

MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO
UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA MECÂNICA

SIMULAÇÃO NUMÉRICA DA COMBUSTÃO DE MISTURAS POBRES DE METANO EM MEIO
POROSO

por

Mateus Collovini Scheid

Monografia apresentada ao Departamento de Engenharia Mecânica da Escola de Engenharia da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, como parte dos requisitos para obtenção do diploma de Engenheiro Mecânico.

Porto Alegre, dezembro de 2013



Universidade Federal do Rio Grande do Sul
Escola de Engenharia
Departamento de Engenharia Mecânica

SIMULAÇÃO NUMÉRICA DA COMBUSTÃO DE MISTURAS POBRES DE METANO EM MEIO
POROSO

por

Mateus Collovini Scheid

ESTA MONOGRAFIA FOI JULGADA ADEQUADA COMO PARTE DOS
REQUISITOS PARA A OBTENÇÃO DO TÍTULO DE
ENGENHEIRO MECÂNICO
APROVADA EM SUA FORMA FINAL PELA BANCA EXAMINADORA DO
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA MECÂNICA

Prof^a. Dr^a. Thamy Cristina Hayashi
Coordenadora do Curso de Engenharia Mecânica

Área de Concentração: **Energia e Fenômenos de Transporte**

Orientador: Prof^a. Dr^a. Thamy Cristina Hayashi

Comissão de Avaliação:

Prof. Paulo Smith Schneider

Prof. Adriane Prisco Petry

Prof. Volnei Borges

Porto Alegre, 03 de dezembro de 2013.

DEDICATÓRIA

Dedico este Trabalho de Conclusão de Curso (TCC) aos meus pais, Dalvi Luiz Scheid e Lizete Collovini Scheid, por toda a dedicação e cuidados em minha educação, além do apoio nas decisões tomadas ao longo deste trajeto. Dedico este TCC também a Marcela Castro do Amaral Brito, por toda a paciência, suporte e carinho dispensados a mim.

AGRADECIMENTOS

Em primeiro lugar, agradeço à Professora Thamy Cristina Hayashi pela orientação no presente Trabalho de Conclusão de Curso que, mesmo repleta de outras responsabilidades, motivou-se a dedicar tempo para que fosse possível sua conclusão.

Agradeço também aos professores Bardo Ernst Josef Bodmann e Horácio Antonio Vielmo, por terem ensinado as bases das linguagens e métodos de programação que instigaram a escolha do tema deste trabalho e ajudaram a direcionar minha carreira.

Agradeço a meus pais, aos quais dedico este TCC, sem os quais minha formação não seria a mesma. Obrigado pelo apoio às minhas decisões e pelo incentivo a buscar meus objetivos.

À minha irmã, Letícia Collovini Scheid, pela amizade e imenso crescimento pessoal.

A meus amigos Daniela Pontes Naconeski, Gustavo Sillero, Ítalo Passuelo Zanette, Luciana Tovo Rodrigues, Tiago Scheid e Tony Diniz de Lima Naconeski, os quais tornaram todo o percurso acadêmico ainda mais divertido.

Agradeço à minha noiva e companheira Marcela Castro do Amaral Brito, a quem também dedico este TCC, pelo carinho e leveza em suas ações, constituindo-se um verdadeiro exemplo ao longo dos últimos anos.

SCHEID, M. C. **Simulação Numérica Da Combustão De Misturas Pobres De Metano Em Meio Poroso**. 2013. 14 folhas. Monografia (Trabalho de Conclusão do Curso em Engenharia Mecânica) – Departamento de Engenharia Mecânica, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2013.

RESUMO

Queimadores que utilizam meios porosos representam uma tecnologia relativamente recente e que apresenta vantagens em relação a outros processos de queima, como excelente desempenho, estabilidade de chama, baixos níveis de emissão de poluentes e largos intervalos de potência disponível. Este trabalho objetiva estudar numericamente diferentes modos de operação de um queimador poroso, analisando-se os efeitos nas variações de parâmetros como razão de excesso de ar e potência de operação. Usa-se misturas de ar e metano como fluido de trabalho. A matriz porosa é constituída de alumina (Al_2O_3). O código utilizado na programação é escrito na linguagem Fortran, utiliza algoritmo SIMPLE e método de volumes finitos. Obteve-se perfis de temperatura para diferentes parâmetros de operação do queimador. Conseguiu-se estabilizar chamas no interior de matrizes porosas, observando-se escoamentos homogêneos que preenchem toda a geometria. Observou-se que a análise de diferentes geometrias e estruturas para queimadores enriqueceriam o estudo do escoamento e do processo de combustão que ocorre no interior do equipamento, bem como a evolução do código de programação para acoplar mecanismos de reação de cinética química detalhada seriam de grande valor científico, sendo sugestão para trabalhos futuros.

PALAVRAS-CHAVE: queimador poroso, mistura pobre, meio poroso.

SCHEID, M. C. **Numerical Simulation Of Methane Poor Mixture Burn In Porous Media.** 2013. 14 pages. Monografia (Trabalho de Conclusão do Curso em Engenharia Mecânica) – Departamento de Engenharia Mecânica, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2013.

ABSTRACT

Burners that use porous media are a relatively recent technology that shows promising advantages in comparison to other burn processes, such as excellent performance, flame stability, low pollutant emission levels e wide available power ranges. This work studies numerically different operation modes of a porous burner, analyzing the effects upon variation of operation parameters like power and excess air ratio. Mixtures of air and methane are used as work fluid. The porous matrix is composed of alumina (Al_2O_3). The programming code is written on Fortran language, uses SIMPLE algorithm on its mechanism and employs the finite volume method on its solution. Temperature profile data for different operation parameters was obtained for the burner. Different flame profiles have been stabilized inside the porous matrix, and homogeneous flows that fill all the geometry have been observed. It has been also observed that the analysis of different geometries and structures of these burners would enrich the study of combustion and flow process that happens inside the equipment, as well as evolving the program code to couple detailed chemical kinetics mechanisms represent be of great scientific value, being that a suggestion for future works on this subject.

KEYWORDS: porous burner, poor mixture, porous media.

LISTA DE SÍMBOLOS

Alfabeto Latino

A	Fator pré-exponencial de Arrhenius Área perpendicular a uma superfície
A_{fs}	Área específica da interface sólido-fluido
a_{sf}	Área da interface sólido-fluido por unidade de volume do material poroso
c	Traço de concentração
$c_{p,f}$	Calor específico do fluido
$c_{p,s}$	Calor específico do sólido
d_p	Diâmetro do poro
dA	Diferencial de área
e	Índice relativo à posição leste
E_a	Energia de ativação
D_{km}	Difusividade molecular da espécie química k na mistura
h	Coeficiente superficial de transferência de calor por convecção
h_k	Entalpia específica da espécie química k
h_v	Coeficiente volumétrico de transferência de calor por convecção
k_f	Condutividade térmica do fluido
k_s	Condutividade térmica do sólido
m	Parâmetro da taxa de reação
M_k	Peso molecular da espécie química k
n	Parâmetro da taxa de reação Índice relativo à posição norte
\mathbf{n}	Vetor unitário normal à uma superfície
N_{sp}	Número de espécies químicas
p	Pressão
Pr	Número de Prandtl
q_r	Fluxo de calor radiante
R	Constante universal dos gases
r_ϕ	Resíduo absoluto local
s	Índice relativo à posição sul
S_ϕ	Termo fonte para uma quantidade genérica
\bar{S}	Termo fonte linearizado
S_p	Componente do termo fonte nas equações de transporte discretizadas
S_U	Componente do termo fonte nas equações de transporte discretizadas
t	Tempo
T_f	Temperatura do fluido
T_s	Temperatura do sólido
u_D	Vetor velocidade de Darcy
u_{Di}	Componente do vetor velocidade de Darcy na direção i
u	Componente do vetor velocidade na direção x
v	Componente do vetor velocidade na direção y
\mathbf{v}	Vetor velocidade
\mathbf{v}_f	Vetor velocidade do fluido
V	Volume
w	Índice relativo à posição oeste
x	Coordenada horizontal do sistema de coordenadas retangulares
y	Coordenada vertical do sistema de coordenadas retangulares
y_k	Fração mássica da espécie k na mistura

Alfabeto Grego

ω	Vetor velocidade da interface entre duas fases
$\dot{\omega}_k$	Taxa de produção mássica da espécie química k devido a reações químicas
Ψ	Quantidade genérica
Ψ_f	Quantidade genérica de fluido
∇	Operador divergente
Ω	Tensor genérico
β	Parâmetro da taxa de reação
Γ_ϕ	Coeficiente de difusão para uma quantidade genérica
ε	Porosidade
λ	Razão de excesso de ar
μ_f	Viscosidade dinâmica do fluido
ρ_f	Densidade do fluido
ρ_s	Densidade do sólido
σ_Ψ	Termo fonte
ϕ	Razão de equivalência

ÍNDICE

	Pág.
1	INTRODUÇÃO1
2	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA2
2.1	Aplicações e Aspectos Gerais2
3	OBJETIVOS4
4	METODOLOGIA.....4
4.1	Modelo Geométrico4
4.2	Modelagem Físico-Matemática.....5
4.2.1	Método das Médias Volumétricas5
4.2.2	Equação da continuidade6
4.2.3	Balanço de massa das espécies químicas.....6
4.2.4	Balanço de energia considerando equilíbrio térmico local.....6
4.2.5	Balanço da quantidade de movimento6
4.2.6	Modelos de fecho7
4.2.6.1	Perda de carga7
4.2.6.2	Combustão7
4.2.6.3	Propriedades Termofísicas e de Transporte8
4.3	Metodologia da Solução Numérica9
5	RESULTADOS10
6	CONCLUSÃO.....13

1 INTRODUÇÃO

Sabe-se que o uso e o domínio do fogo pelos humanos implicou uma mudança dramática em sua maneira de viver. O uso do fogo possibilitou a indivíduos de inúmeras sociedades cozinhareem os próprios alimentos, afastar possíveis predadores, prover conforto térmico e iluminação em condições que não eram possíveis até então.

Embora não a seja única, a combustão de materiais, além do uso nas condições supracitadas, também representa uma importante possibilidade de obtenção de trabalho mecânico.

Ainda que fontes de energia renovável venham sendo estudadas ao longo dos últimos anos, a relativa disponibilidade e boa relação custo-benefício provinda da exploração das reservas de petróleo dificultam a consolidação do uso de novas fontes.

O efeito negativo dos processos de combustão constitui-se na geração de poluentes, inerente ao processo. O aumento da concentração de contaminantes no ar atmosférico aumentou consideravelmente a partir da Revolução Industrial e tomou proporções alarmantes com a popularização do uso de motores a combustão interna em automóveis. As primeiras normas acerca de emissões surgiram em torno de 1960, já evidenciando o problema do *smog*, como resultado das reações de óxidos de nitrogênio, NO_x e hidrocarbonetos, a citar-se o CO , (produtos da combustão) na presença da luz solar [Heywood, 1988]. A partir de então, os instrumentos regulamentadores de emissões tem se tornado cada vez mais restritivos.

Por este viés, e considerando-se o fato das reservas de combustíveis fósseis serem limitadas fisicamente torna-se evidente que seu uso deva ser o mais eficiente possível. Assim sendo, busca-se processos que apresentem melhor eficiência, de melhores níveis de emissão de poluentes, estáveis e que operem com combustíveis de baixa inflamabilidade em misturas pobres [Barcellos *et al.*, 2007].

A combustão em meios porosos representa então uma alternativa viável na conversão de energia química do material combustível em calor sensível dos gases ou intensos escoamentos de calor radiante [Hayashi, 2005].

Quando comparados a queimadores de chama livre, os de meio poroso diferenciam-se por viabilizar a queima de materiais de baixo poder calorífico ou ainda de misturas pobres em virtude da existência de recirculação de calor e pré-aquecimento da mistura. Há transferência de calor entre regiões à jusante da chama para regiões à montante dela, elevando-se a reatividade da mistura [Pereira, 2002]. Na Figura 1.1, pode-se ver uma foto da espuma cerâmica utilizada em um queimador de meio poroso, com chama estável.



Figura 1.1 Chama estabilizada dentro de uma espuma cerâmica de carbeto de silício [Pereira, 2002].

Em vista do exposto, sistemas com esse modelo de funcionamento possuem menores dimensões, velocidades de chama mais elevadas, assim como maiores temperaturas de operação, além de apresentarem maior estabilidade de chama. As concentrações de produtos indesejados, provindos da combustão incompleta, são também diminutas [Malico, 2001].

2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

2.1 Aplicações e Aspectos Gerais

Segundo Pereira, 2002, a tecnologia da combustão em meios porosos teve seu estudo intensificado a partir de 1980, quando se vislumbrou a possibilidade de sua utilização tanto em escala industrial quanto residencial.

Em Malico, 2001, cita-se como desafios enfrentados pelos pesquisadores dessa tecnologia a dificuldade em obter-se medições experimentais de escoamento e temperatura intrínsecas ao meio poroso, devido ao acesso físico limitado. Além disso, as fronteiras do conhecimento ainda beiram os mecanismos que regem as trocas térmicas em meios porosos e sua influência na combustão.

Em Barcellos *et al.*, 2007, discute-se o emprego do sistema em projetos de caldeiras a vapor, objetivando-se estender os limites de inflamabilidade e diminuir os níveis de emissão de NO_x e CO. Utilizou-se trocadores de calor nas laterais do queimador para testar o comportamento do dispositivo e da estabilidade da chama, constatando-se que a extração de calor não apagou a chama do queimador. A Figura 2.1 exemplifica, esquematicamente, o sistema utilizado no estudo. Devido à matriz porosa e ao perfil de temperatura nela verificado, trapezoidal, a queima de misturas pobres de metano emitiram menos de 2ppm dos poluentes anteriormente citados. Além da estabilidade da chama, verificada também para a queima de misturas muito pobres, evidenciou-se elevada eficiência e capacidade em reter o calor produzido na queima e transferi-lo aos trocadores de calor, transportadores de água e produtores de vapor. Obteve-se que a razão de equivalência e as velocidades do escoamento têm grande influência sobre os perfis de temperatura do sistema, sobre as emissões e sobre a eficiência do sistema, sendo ela tão maior quanto a razão de equivalência usada.

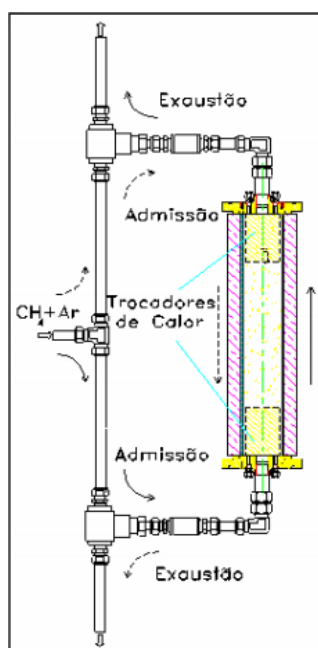


Figura 2.1 – Esquema representativo da caldeira proposta em Barcellos *et al.*, 2007.

Em Hayashi, 2005, reportou-se estudos feitos em um queimador construído com o intuito de utilização para aquecimento doméstico, utilizando-se uma mistura de óleo combustível e óleos vegetais como elemento combustível. O dispositivo acopla tecnologias de vaporização de chama fria e combustão no interior de meio poroso, aplicando também sistemas de troca de calor multijatos de elevada eficiência. Na Figura 2.2, visualiza-se uma imagem de parte do protótipo ensaiado em Hayashi.



Figura 2.2 – Protótipo de um queimador poroso em funcionamento [Hayashi, 2005].

No modelo utilizado por Hayashi, destaca-se sua câmara de combustão, composta por uma seção difusora e um queimador poroso, sendo este de duas camadas. A primeira camada constitui-se uma espuma cerâmica de carbeto de silício (S_iC), com porosidade de 90% e 10 poros por polegada (ppi); Precede-se esta espuma com uma placa de alumina (Al_2O_3), a qual contém furos de 1mm de diâmetro e porosidade equivalente de 4%, utilizada com o intuito de estabilizar a frente de chama e evitar retorno de chama para a seção difusora. A modelagem da placa de alumina como equivalente a um material de baixa porosidade mostrou-se inadequada no estudo de Hayashi. Propuseram-se modelos numéricos de uma, duas e três dimensões para simular queimas em matrizes porosas.

Em Batalhone, 2012, estudou-se diferentes formas de entrada do fluido de trabalho no meio poroso, em um queimador de formato retangular, bidimensional. Verificou-se, para diferentes perfis de velocidades de entrada, comportamentos semelhantes de escoamento, após a convergência do modelo. Mesmo para baixas velocidades e pressões, constatou-se ausência de vórtices, evidenciando o meio poroso como homogeneizador do escoamento na entrada do queimador, com poucos poros de avanço.

Em Chapiro, 2009, estuda-se um modelo composto de um cilindro longo de rocha porosa, no interior do qual há combustível sólido. Com escoamento unidimensional e reações seguindo modelos de ação de massas de primeira ordem, técnicas para a recuperação de óleos pesados, por meio da técnica de combustão *in situ* (*In Situ Combustion – ISC*), foram propostos. A combustão em meio poroso contribui no aumento total da temperatura da câmara, viabilizando a redução da viscosidade do óleo circulante, aumentando sua velocidade de escoamento e separando os componentes leves do óleo.

Segundo Kulkarni *et al.* (1992, *apud* Hayashi, 2005), a combustão em meios porosos prevê a estabilização da chama no interior da matriz porosa, em uma ampla gama de condições de operação, mesmo trabalhando-se com múltiplas camadas porosas com diferentes e abruptas variações de propriedades de transferência de calor. Em seu estudo, acopla-se os efeitos condutivos, radiantes e convectivos da transferência de calor, emulando-se os mecanismos de reação com múltiplos passos na queima de misturas de ar e metano. No projeto desenvolvido, constatou-se que significativos rendimentos podem ser atingidos controlando-se as propriedades dos materiais à montante e jusante da frente de chama no

queimador. A montante, recomenda-se o uso de materiais com porosidade mais baixa, mais curtos e de espessura maior, em comparação ao material da matriz porosa à jusante.

Em Avdic *et al.*, 2010, modela-se um queimador poroso para aquecimento de uso doméstico. Compara-se sistemas de chama livre, nos quais os produtos da reação exotérmica passam por trocadores de calor e transferem calor para um segundo fluido de trabalho, com queimadores em matriz porosa. Ressalta-se as vantagens do uso de sistemas de meio poroso, tanto por melhor atender a parâmetros ambientais no quesito emissão de poluentes quanto por apresentarem diminutas dimensões (cerca de 10%), comparativamente aos outros queimadores. Além disso, os intervalos de operação (razão entre a potência máxima e mínima) de queimadores convencionais podem ser mais baixos.

Dentre os princípios de funcionamento dos queimadores de matriz porosa que justificam as vantagens já citadas, comenta-se o fato de, no momento da entrada da mistura no sistema, a fase sólida encontrar-se a temperaturas superiores a dos reagentes. Sendo assim, ar e combustível são aquecidos por convecção ao se dirigir à região de combustão. Nessa região, a queima da mistura eleva a temperatura para valores acima da fase sólida.

Exposto isso, o pré-aquecimento dos reagentes pela troca térmica com os produtos possibilita a queima de combustíveis de menor poder calorífico, de ampla gama de limites de inflamabilidade a elevadas velocidades de processamento. A altas velocidades, verifica-se também baixas emissões de poluentes (CO e NO_x), sendo o processo de combustão muito eficiente.

3 OBJETIVOS

O presente trabalho objetiva a simulação numérica da combustão em um queimador poroso, a fim de se estudar a estrutura da chama em seu interior. O equipamento possui formato cilíndrico, com uma camada porosa de alumina (Al₂O₃) e entrada da mistura por cavidade circular na parte central. O modelo utiliza geometria axissimétrica, a fim de reduzir o esforço computacional de um modelo completo. O modelo físico-matemático bidimensional é definido, assim como a modelagem numérica utilizada para a solução das equações de Navier-Stokes e dos balanços energéticos e de massa das espécies químicas. As variáveis de entrada são a potência do equipamento e a razão de excesso de ar (λ).

O ponto de partida do trabalho desenvolvido constitui-se em um código pré-existente, utilizado em Hayashi, 2005. Neste trabalho, o modelo foi reescrito em 2D e implementado numericamente para a geometria de um queimador composto por uma camada porosa.

Ao final da definição do modelo, os resultados são apresentados e discutidos, levando em consideração o entendimento do fenômeno e resultados disponíveis na literatura.

4 METODOLOGIA

4.1 Modelo Geométrico

O modelo geométrico adotado é bidimensional, horizontal em coordenadas axissimétricas. Em seguida, um desenho esquemático é apresentado (Figura 4.1). Definem-se R_1 e R_2 como o raio de entrada da mistura e raio total da geometria, respectivamente, e H como seu comprimento. Como proposto anteriormente, aproveita-se a condição de simetria para reduzir os esforços computacionais necessários. Tem-se:

- ✓ Comprimento: $H = 0,08\text{m}$;
- ✓ Raio da seção de saída: $R_2 = 0,035\text{m}$;
- ✓ Raio da seção de entrada: $R_1 = 0,016\text{m}$;

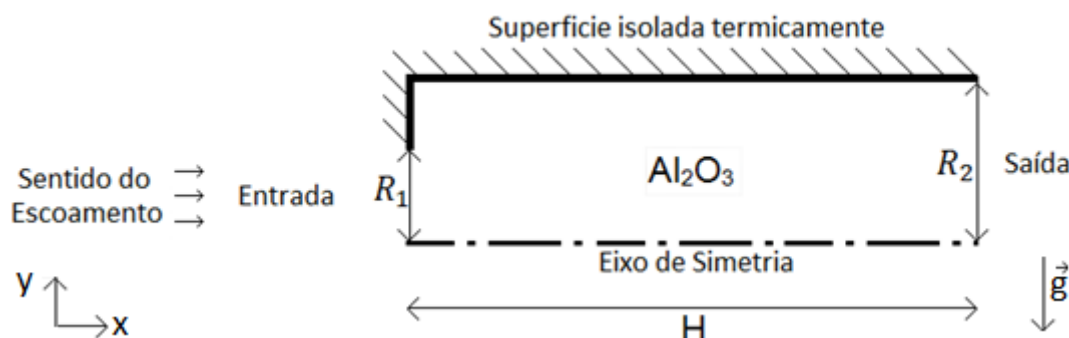


Figura 4.1 - Desenho esquemático do queimador poroso estudado.

As laterais do queimador são isoladas termicamente (superfícies adiabáticas) e impermeáveis. A porosidade da camada de alumina é de $\varepsilon = 80\%$, com 10ppi. A gravidade não foi considerada no escoamento estudado, de sentido horizontal para a direita. O processo de combustão é descrito por um mecanismo global de um passo, sendo o combustível gás metano (CH_4). As simulações realizadas consideram escoamento laminar permanente em meio poroso. Além disso, os fluxos radiantes não são considerados, pois este trabalho concentra-se no estudo preliminar da estrutura e estabilização da chama no interior do meio poroso. Utilizou-se razões de excesso de ar (λ), ou seja, relações entre o número de átomos de oxigênio presentes na mistura e a quantidade de átomos de oxigênio necessários para haver combustão, compatíveis para misturas com excesso de ar. Para valores maiores do que 1, tem-se misturas pobres. Para valores abaixo de 1, tem-se misturas ricas.

4.2 Modelagem Físico-Matemática

Segundo Hayashi, 2005, mesmo que as equações diferenciais de transporte sejam válidas dentro dos poros, soluções gerais para campos escalares, como temperatura, não podem ser geradas, pela complexidade estrutural de uma matriz porosa. Modela-se escoamento e transferências de calor, momento e massa em meios porosos por meio de equações da continuidade aplicadas em volumes médios. Dessa forma, obtém-se um modelo volumétrico representativo da matriz porosa saturada com fluido de trabalho.

Utilizou-se essa metodologia, de médias volumétricas, neste trabalho. A seguir, resume-se este procedimento. A fim de se obter a descrição do procedimento em sua íntegra, sugere-se ao leitor interessado recorrer a Hayashi, 2005.

4.2.1 Método das Médias Volumétricas

O conceito de volume elementar representativo (REV) de um meio poroso saturado com fluido tem a intenção obter equações macroscópicas que representem os processos ocorridos no interior da matriz porosa. Para a utilização do método, requer-se que o comprimento característico do elemento seja grande o suficiente para que se consiga observar variações nas propriedades do fluido. Dessa forma, variações nos volumes médios no entorno dos elementos, no domínio considerado, não implicam alterações no valor médio das propriedades associadas àquela posição. A Figura 4.2 ilustra a definição do REV, composto por duas fases (gasosa e sólida).

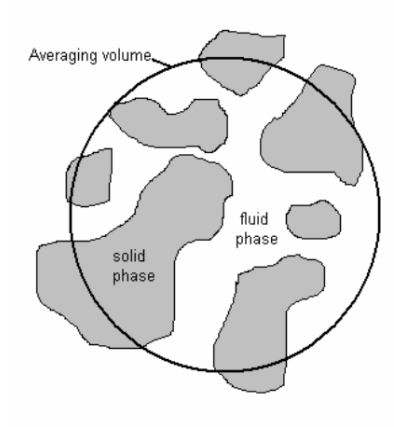


Figura 4.2 – Esquema de um volume elementar representativo para um meio poroso [Hayashi, 2005].

A aplicação do método de médias volumétricas às equações de transporte de Navier-Stokes resultam na expressão 4.1, equação diferencial governante no transporte de uma quantidade genérica Ψ_f :

$$\frac{\partial \langle \Psi_f \rangle}{\partial t} - \frac{1}{V} \int_{A_{fs}} \Psi \boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{n} \, dA + \nabla \cdot \langle \mathbf{v}_f \Psi_f \rangle + \frac{1}{V} \int_{A_{fs}} \Psi_f \mathbf{v}_f \cdot \mathbf{n} \, dA = \nabla \cdot \langle \boldsymbol{\Omega} \rangle + \frac{1}{V} \int_{A_{fs}} \boldsymbol{\Omega} \cdot \mathbf{n} \, dA + \langle \sigma_\Psi \rangle \quad (4.1)$$

As equações consideradas, resolvidas nesse modelo, são apresentada a seguir. Após, na seção 4.2.6, aborda-se considerações de fecho do conjunto de equações obtido.

4.2.2 Equação da continuidade

$$\frac{\partial(\varepsilon \rho_f)}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon \rho_f \mathbf{v}) = 0 \quad (4.2)$$

4.2.3 Balanço de massa das espécies químicas

$$\frac{\partial(\varepsilon \rho_f y_k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_f y_k \varepsilon \mathbf{v}) = \nabla \cdot (\varepsilon \rho_f \mathcal{D}_{km} \cdot \nabla y_k) + \varepsilon \dot{\omega}_k M_k \quad k = 1, \dots, N_{sp} \quad (4.3)$$

4.2.4 Balanço de energia considerando equilíbrio térmico local

Empregou-se equilíbrio térmico local entre as fases gasosa e sólida, sendo as médias de suas temperaturas localmente iguais, não sendo considerada trocas convectivas de calor entre as duas fases (a temperatura do fluido de trabalho de do sólido é considerada a mesma) [Hayashi, 2005]. Isto resulta na expressão seguir:

$$[\varepsilon c_{p,f} + (1 - \varepsilon) c_{p,s}] \frac{\partial T_s}{\partial t} + \varepsilon \rho_f c_{p,f} \nabla \cdot \mathbf{v} T = \nabla \cdot \{[\varepsilon k_f + (1 - \varepsilon) k_s] \nabla T\} - \varepsilon \sum_{k=1}^{N_{sp}} \dot{\omega}_k M_k h_k \quad (4.4)$$

4.2.5 Balanço da quantidade de movimento

$$\varepsilon \rho_f \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \varepsilon \rho_f \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} = -\varepsilon \nabla p + \varepsilon \mu_f \nabla \cdot (\nabla \mathbf{v}) - (\nabla p)_p \quad (4.5)$$

4.2.6 Modelos de fecho

Tendo-se apresentado as equações utilizadas no modelo de escoamento, faz-se necessário descrever os modelos de fecho adotados para completar o modelo do queimador.

4.2.6.1 Perda de carga

A perda de carga em um escoamento em matrizes porosas origina-se no atrito de arraste. Em baixas velocidades, ela é calculada pela Lei de Darcy:

$$\frac{dp}{dx} = -\frac{\mu_f}{K} u_D \quad (4.6)$$

A velocidades elevadas, os efeitos inerciais ganham importância e potencializam o arraste. Kaviany (1995, *apud* Hayashi, 2005) sugere a adaptação da equação de Ergun [Macdonald *et al.*, 1979] para sistemas multidimensionais:

$$\frac{dp}{dx_i} = -\frac{\mu_f}{K} u_{D_i} - \frac{c(1-\varepsilon)}{\varepsilon^3} \frac{\rho_f}{d_p} |u_{D_i}| u_{D_i} \quad (4.7)$$

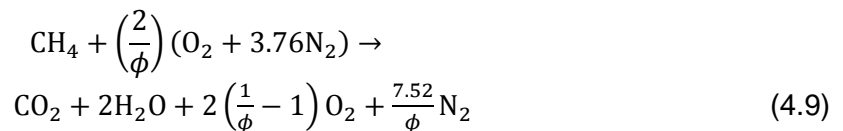
Nas equações 4.6 e 4.7, K representa a permeabilidade do meio poroso, definida pela equação de Karman-Cozeny:

$$K = \frac{\varepsilon^3}{180(1-\varepsilon)^2} d_p^2 \quad (4.8)$$

4.2.6.2 Combustão

A combustão ocorre no interior dos poros da matriz cerâmica e seu efeito corresponde aos termos fonte no balanço de energia da fase fluida e pelo balanço mássico das espécies químicas reagentes no modelo matemático. Analisando-se as maneiras de representar os mecanismos de reação global do processo de queima, tem-se dois modelos principais: modelo de um passo (*single step*) e de múltiplos passos (*multi step*). As duas propostas diferem entre si, sendo a última de maior complexidade de implementação, considerando todos os passos das reações químicas do processo. O modelo de passo único considera unicamente a reação global governante, reduzindo consideravelmente o esforço computacional necessário para a execução do código.

Neste trabalho, considerou-se o mecanismo global de um passo para a mistura ar-metano (CH_4), totalizando 5 espécies químicas. Despendeu-se um grande tempo de projeto desenvolvendo-se o código para contemplar esse quesito. Dito isso, tem-se a equação global simulada, equação 4.9:



A taxa de conversão do combustível, dependente da temperatura e da disponibilidade dos reagentes, é representada pela relação [Hayashi, 2005]

$$\dot{\omega}_{\text{fuel}} M_{\text{fuel}} = AT^\beta e^{\frac{-E_a}{RT}} \rho^{m+n} (y_{\text{fuel}})^m (y_{\text{O}_2})^n \quad (4.10)$$

sendo A o fator pré-exponencial de Arrhenius, E_a a energia de ativação da reação, R a constante universal dos gases, β , m e n são constantes, vistas a seguir.

Os valores usados neste trabalho para estes parâmetros são definidos na Tabela 4.1. Sugere-se, novamente, a leitura de Hayashi, 2005, para detalhamento.

Tabela 4.1 – Parâmetros de reação para modelo global de um passo usados no código [Westbrook e Dryer, 1981, *apud* Hayashi, 2005].

	$A \left[\left(\frac{\text{m}^3}{\text{kg}} \right)^{m+n-1} \text{s}^{-1} \right]$	$\frac{E_a}{R} [\text{K}]$	β	m	n
CH ₄	1,0 x 10 ¹⁰	16839	0	1,0	1,0

4.2.6.3 Propriedades termofísicas e de transporte

Os processos de transferência de calor, massa, momento e energia na combustão são determinados pelas propriedades de transporte como viscosidade, condutividade térmica e massa específica.

A massa específica dos gases é calculada considerando-se o comportamento de gases ideais.

Em Heywood, 1988, define-se a viscosidade de misturas ar-hidrocarbonetos para temperaturas de 500K a 4000K, para pressões de 1 a 100 atm e razões de equivalência (1/λ) de 0 a 4, intervalos que compreendem as faixas de operação do queimador estudado:

$$\mu_{ar} = 3.3 \cdot 10^{-7} \cdot T^{0.7} \left[\frac{\text{kg}}{\text{m}} \cdot \text{s} \right] \quad (4.11)$$

Ainda em Heywood, 1988, apresenta-se uma expressão semi-empírica para o cálculo da condutividade térmica dos gases, relacionando μ , c_p da mistura e o número de Prandtl, utilizada no código desenvolvido:

$$k = \mu \cdot c_{pmix} / Pr \quad [W/(m.K)] \quad (4.12)$$

Em Turns, 2000, são apresentados coeficientes para ajustes de curva de propriedades termodinâmicas para as espécies químicas envolvidas na reação de combustão do queimador para diferentes faixas de temperatura. As Equações 4.13 e 4.14 exibem as expressões usadas no cálculo do calor específico das espécies químicas e do combustível, respectivamente. Já na Tabela 4.2, tem-se os valores dos coeficientes utilizados:

$$c_p / R_{univ} = a_1 + a_2 T + a_3 T^2 + a_4 T^3 + a_5 T^4 \quad (4.13)$$

$$c_{pCH_4} = 4.184 \left(a_1 + a_2 \frac{T}{1000} + a_3 \left(\frac{T}{1000} \right)^2 + a_4 \left(\frac{T}{1000} \right)^3 + a_5 \left(\frac{T}{1000} \right)^{-2} \right) \quad (4.14)$$

Tabela 4.2 – Coeficientes para ajuste de curvas de calor específico para as espécies químicas [Turns, 2000].

	Faixa	a1	a2	a3	a4	a5	a6
O2	300-1000K	3.212936	0.11274864E-2	-0.05756150E-5	0.13138773E-8	-0.08768554E-11	-0.10052490E4
	1000-5000K	3.697578	0.06135197E-2	-0.12588420E-6	0.01775281E-9	-0.11364354E-14	-0.12339301E4
N2	300-1000K	3.298677	0.14082404E-2	-0.03963222E-4	0.05641515E-7	-0.02444854E-10	-0.10208999E4
	1000-5000K	2.926640	0.14879768E-2	-0.05684760E-5	0.10097038E-9	-0.06753351E-13	-0.09227977E4
CO2	300-1000K	2.275724	0.09922072E-1	-0.10409113E-4	0.06866686E-7	-0.02117280E-10	-0.04837314E6

	1000-5000K	4.453623	0.03140168E-1	-0.12784105E-5	0.02393996E-8	-0.16690333E-13	-0.04896696E6
H2O	300-1000K	3.386842	0.03474982E-1	-0.06354696E-4	0.06968581E-7	-0.02506588E-10	-0.03020811E6
	1000-5000K	2.672145	0.03056293E-1	-0.08730260E-5	0.12009964E-9	-0.06391618E-13	-0.02989921E6
CH4	300-5000K	-0.29149	26.327	-10.61	1.5656	0.16573	-18.331

4.3 Metodologia da Solução Numérica

Utilizou-se técnicas de mecânica dos fluidos computacional (CFD) como forma de solução numérica para o modelo apresentado nas seções anteriores. Adotou-se o modelo bidimensional axissimétrico para os cálculos.

As equações governantes foram discretizadas no domínio de cálculo, aplicando-se o método de volumes finitos/diferenças finitas. O acoplamento de pressão/velocidade foi realizado pelo algoritmo SIMPLE (*Semi Implicit Method for Pressure Linked Equations*). Foi utilizada uma malha regular de elementos retangulares.

Utilizou-se metodologia semelhante à utilizada em Hayashi, 2005, durante o desenvolvimento e parametrização do código Fortran do modelo estudado, aplicando-se, após a consideração das condições iniciais e de contorno pertinentes, o laço iterativo até a convergência dos resultados nas variáveis dependentes.

Observa-se, das equações governantes apresentadas nas seções anteriores, que elas podem ser expressas de forma genérica, como:

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\phi\mathbf{v}) = \nabla \cdot (\Gamma_\phi \nabla\phi) + S_\phi \quad (4.15)$$

sendo ϕ a quantidade transportada, S_ϕ o termo fonte e Γ_ϕ o coeficiente de difusão de ϕ [Hayashi, 2005].

Integrando-se esta expressão volumetricamente e utilizando-se o teorema da divergência de Gauss, obtém-se equações diferenciais sobre todas as bordas do volume de controle. Após discretizada e consideradas as implicações de problemas de regime permanente, vislumbra-se a equação de transporte integrada:

$$(\rho u A \phi)_e - (\rho u A \phi)_w + (\rho v A \phi)_n - (\rho v A \phi)_s = \left(\Gamma_\phi A \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_e - \left(\Gamma_\phi A \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_w + \left(\Gamma_\phi A \frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_n - \left(\Gamma_\phi A \frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_s + \bar{S}_\phi \Delta V \quad (4.16)$$

Na equação 4.16, A é a área da seção transversal das faces de um volume de controle, ΔV é o volume e \bar{S}_ϕ é o valor médio do termo fonte para o respectivo volume de controle. Em se tratando de um modelo bidimensional, $\Delta V = \Delta x \Delta y$, $A_e, A_w = \Delta x$ e $A_n, A_s = \Delta y$. Destaca-se que o código utilizado foi tratado de forma a converter as equações para o uso de coordenadas cilíndricas. Caso decida-se parametrizar o código para sua utilização em coordenadas retangulares, automaticamente considera-se raio unitário nas equações pertinentes.

Na Figura 4.3 tem-se o esquema do elemento de malha considerado nos desenvolvimentos.

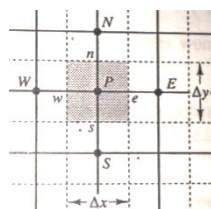


Figura 4.3 - Elemento bidimensional em utilizado no modelo [Adaptado de Versteeg e Malalasekera, 1995].

Seguindo-se práticas estabelecidas de tratamento de modelos semelhantes, os coeficientes difusivos em qualquer interface são avaliados como a média dos valores da propriedade analisada nos pontos mais próximos a montante e a jusante do elemento calculado. Define-se este tratamento como esquema das diferenças centrais.

Prosseguindo-se na análise da equação 4.17, se expressa o termo fonte como função linear da variável ϕ_p , a saber:

$$\bar{S}\Delta V = S_U + S_p\phi_p \quad (4.17)$$

Assim, chega-se a equações representativas dos pontos do domínio, sendo a_I representante dos coeficientes dos pontos fronteiros ao ponto "P" e o termo somatório definido para os pontos em torno do ponto "P" central:

$$a_p\phi_p = \sum a_I\phi_I + S_U \quad (4.18)$$

$$a_p = \sum a_I + \Delta F - S_p \quad (4.19)$$

Nas expressões acima, ΔF representa o fluxo convectivo e a_p o coeficiente central.

A fim de testes de convergência, o sistema soma os resíduos de todas as variáveis dependentes monitoradas. A cada iteração, compara-se os níveis de resíduos, r_ϕ , das variáveis, com o critério de convergência.

$$r_\phi = \left| \sum a_I\phi_I + S_U - a_p\phi_p \right| \quad (4.20)$$

Com isto exposto, conclui-se a apresentação do modelo adotado. Para maior detalhamento do sistema de volumes finitos e algoritmo SIMPLE, sugere-se recorrer a Versteeg e Malalasekera, 1995.

5 RESULTADOS

A simulação do queimador poroso foi considerada para diferentes condições de operação. Os valores de potência adotados foram 3 kW, 6 kW e 9 kW. Para cada um desses valores, testou-se excessos de ar iguais a 1.25, 1.67 e 2.5. Verificou-se que o modelo teve dificuldades de convergência em razões de excesso de ar iguais a 2.5 para valores de potência maiores do que 3kW. Isso deve-se ao fato das velocidades de escoamento serem diretamente proporcionais à temperatura e à razão de excesso de ar. Acima de um determinado valor, a mistura ar-combustível consegue passar pela matriz porosa sem queimar, não conseguindo-se, assim, a estabilização da chama.

Os resultados do programa foram obtidos utilizando-se um ambiente Linux, de sistema operacional Ubuntu, compilador gfortran, operantes em um computador de processador Intel Core i7-2600, 3.4 GHz, 16 GB de memória RAM.

A malha do modelo numérico foi composta de 14196 elementos, para os quais o processo iterativo foi executado até atingir-se a convergência entre os resultados, a saber, diferenças inferiores a 0.0001. O tempo de execução do programa foi, de modo geral, próximo a 30 min.

A seguir, os resultados obtidos para a combustão no equipamento estudado são exibidos e comentados.

Na Figura 5.1, tem-se a distribuição de temperatura e linhas de corrente para escoamentos resultantes de operação a 3kW de potência e razões de excesso de ar iguais a 1.25 e 1.67, respectivamente.

Considerando-se temperaturas a montante e a jusante do escoamento a 300 K, tem-se diminuição da temperatura próximo à saída do equipamento, resultante de trocas térmicas com o ambiente a jusante do meio poroso. Além disso, vê-se que, ao se aumentar o excesso de ar, a combustão ocorre mais distante da região de entrada da malha, em virtude de maiores velocidades de escoamento. As distribuições de temperatura e linhas de corrente para potências de 6 kW e 9 kW seguem o mesmo comportamento, como pode ser constatado nas Figuras 5.2 e 5.3.

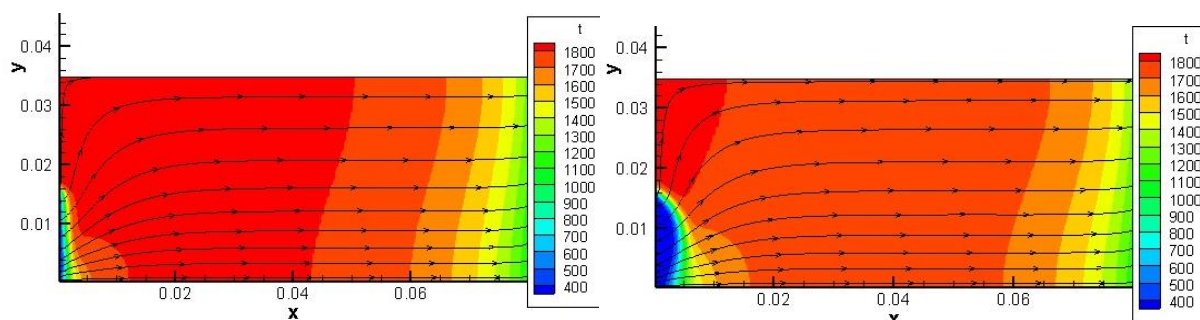


Figura 5.1 – Temperatura (K) e linhas de corrente para 3 kW. À esquerda, razão de excesso de ar, $\lambda = 1.25$. À direita, $\lambda = 1.67$.

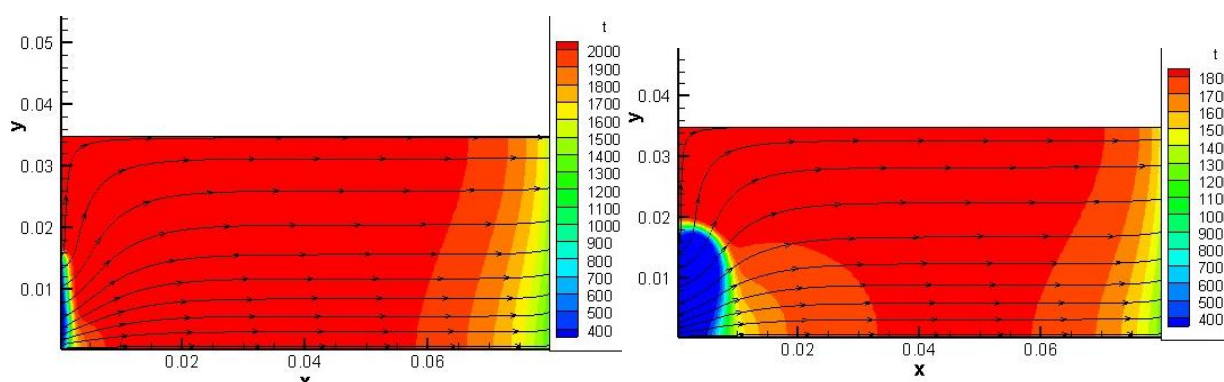


Figura 5.2 – Temperatura (K) e linhas de corrente para 6 kW. À esquerda, razão de excesso de ar, $\lambda = 1.25$. À direita, $\lambda = 1.67$.

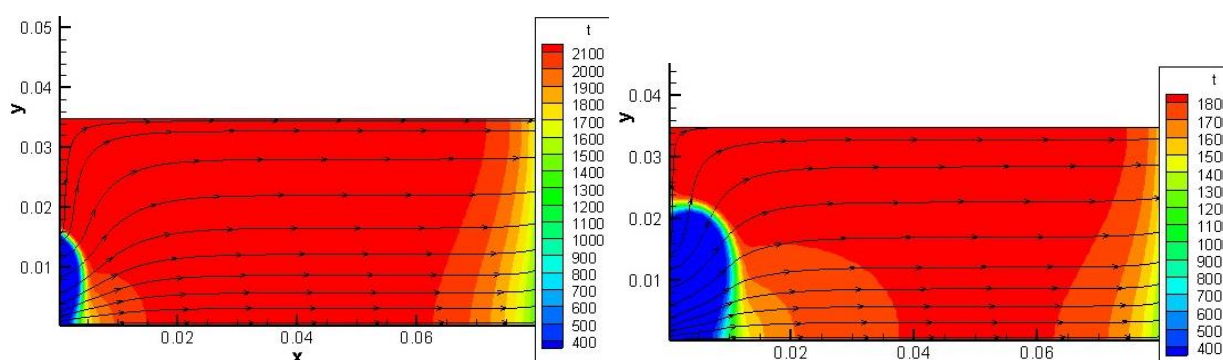


Figura 5.3 – Temperatura (K) e linhas de corrente para 9 kW. À esquerda, razão de excesso de ar, $\lambda = 1.25$. À direita, $\lambda = 1.67$.

Dos resultados, percebe-se a homogeneização do escoamento pouco depois de sua entrada na malha, efeito resultante esperado do escoamento em um meio poroso, não havendo a formação de zonas de recirculação.

Da simulação de diferentes valores de potência, é saliente que, com o aumento dela, as velocidades de escoamento também aumentam, fazendo com que a frente de chama se posicione mais distante da região de entrada da mistura na matriz porosa.

Para $\lambda = 2.5$, encontrou-se dificuldade para a convergência da simulação, ou seja, houve estabilização da queima no interior da matriz porosa. Na Figura 5.4, exibe-se a temperatura, as linhas de corrente e o perfil de consumo de combustível obtido para o λ mencionado e potência de 3 kW.

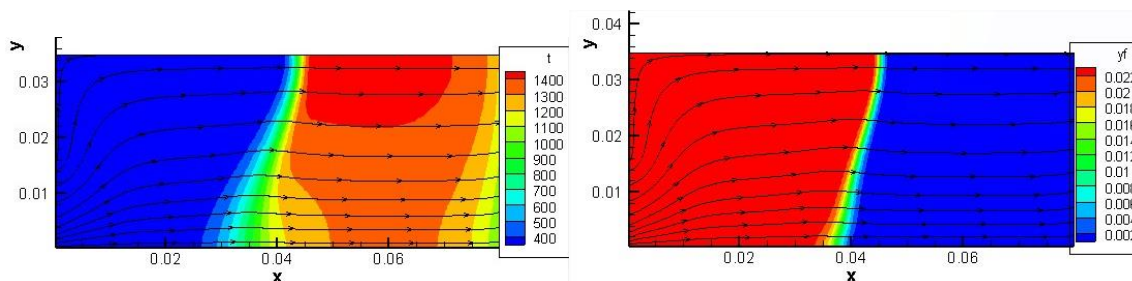
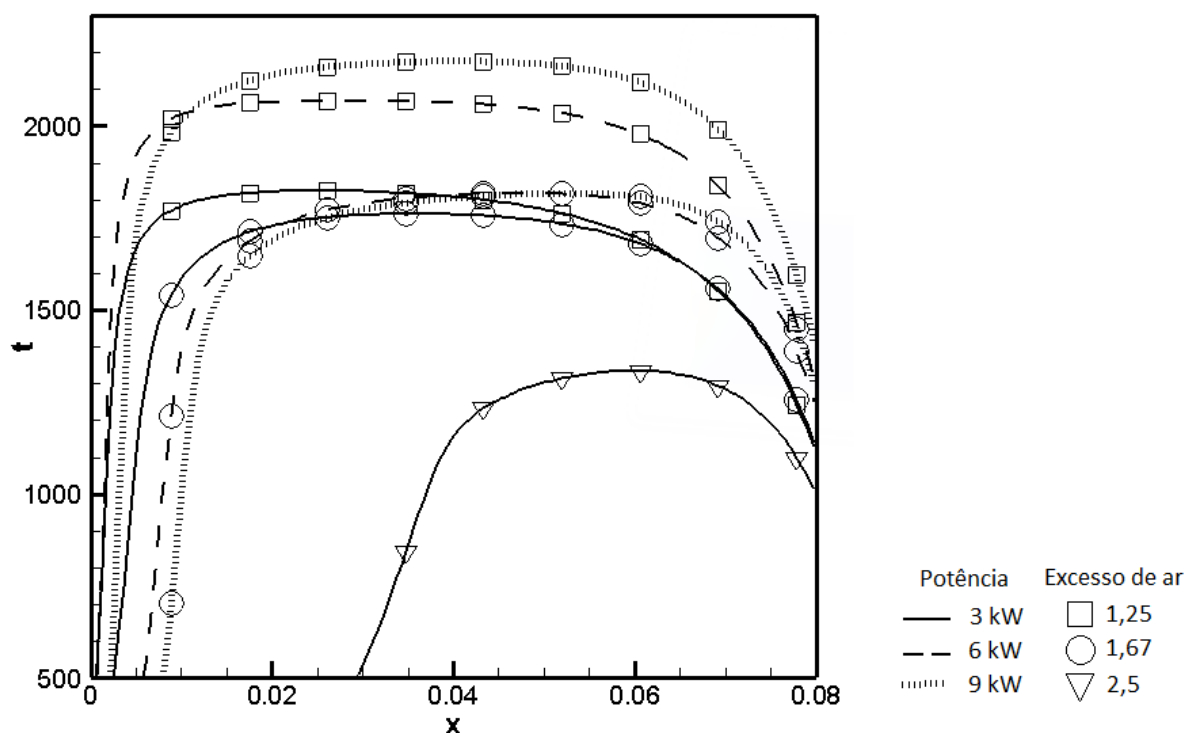


Figura 5.4 – À esquerda, temperatura (K) e linhas de corrente para 3 kW e $\lambda = 2.5$. À direita, fração mássica de combustível, para os mesmos parâmetros de simulação.

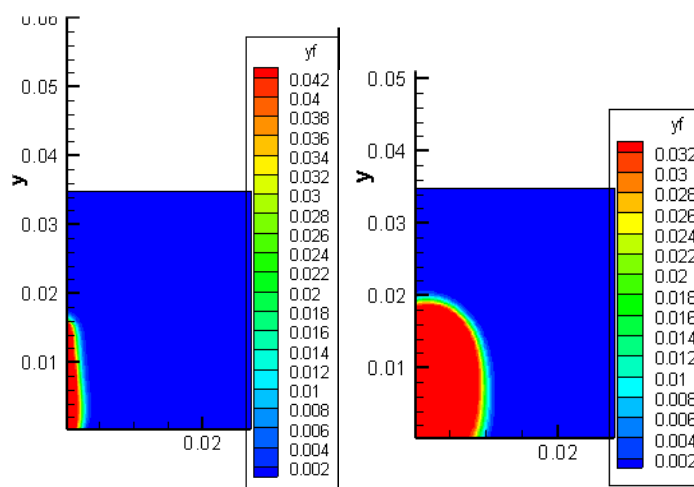
Para potências superiores a 3 kW, não se conseguiu estabilizar frentes de chama no interior do meio poroso, utilizando-se $\lambda = 2.5$. Na Figura 5.5, exibe-se a distribuição de temperaturas na linha central do queimador para os diferentes parâmetros de potência e razões de excesso de ar simuladas. Como esperado, a temperatura aumenta com o aumento da potência para o mesmo λ de operação. Para uma mesma potência, a temperatura máxima diminui com o aumento do excesso de ar. Para maiores diluições, verificam-se maiores velocidades, deslocando então a frente de chama para um ponto mais adiante no escoamento.



Figuras 5.5 – Distribuição de temperaturas na linha central do queimador para as condições simuladas.

Na Figura 5.6, destaca-se o consumo de combustível na entrada do domínio. A tendência observada nas imagens segue o esperado, sendo mais lenta e mais distante da região de entrada a medida que se empobrece a queima. Ilustra-se o resultado para um dos

valores de potência simulado, mas observa-se comportamento semelhante para os demais valores de potência, para razões de excesso de ar similares.



Figuras 5.6 – Comportamento de consumo de combustível na entrada. A potência de operação vale 6 kW. À esquerda, $\lambda = 1.25$; À direita, $\lambda = 1.67$.

6 CONCLUSÃO

Simulações computacionais de engenharia confiáveis tem recebido grande atenção acadêmica, representando uma poderosa ferramenta de análise e compreensão tecnológica, sendo de suma importância em uma infinda gama de áreas de conhecimento, sobretudo em novas tecnologias. No desenvolvimento de queimadores porosos, reduz-se lacunas em seu entendimento e possíveis custos atrelados à fabricação de protótipos por meio de métodos numéricos.

Diferentes aspectos da simulação da queima de misturas pré-misturadas de metano e ar foram investigadas no interior de um queimador poroso composto por uma camada de material. Estabelecidos os domínios geométrico, matemático e físico, desenvolveu-se e parametrizou-se um código de programação que simulasse o escoamento e a combustão no interior do modelo escolhido. O efeito de razões de excesso de ar e diferentes potências de equipamento foi estudado, considerando-se cálculos em duas dimensões e em coordenadas cilíndricas, reagindo o modelo de forma compatível com o esperado, tendo a implementação do código atingido o objetivo do estudo proposto. Obteve-se um perfil homogêneo de escoamento, sem zonas de recirculação, no interior da geometria analisada, como esperado em queimadores porosos. Verificou-se que, com o aumento da razão de excesso de ar, desloca-se a frente de chama estabilizada para regiões mais distantes da entrada do queimador.

Para trabalhos futuros, sugere-se utilizar o programa para simulação em queimadores com diferentes configurações geométricas e estruturais, a fim de se estudar, por exemplo, a utilização de diferentes combinações de materiais porosos em série, enriquecendo assim as informações acerca do escoamento. Além disso, a adaptação do modelo para simular geometrias em três dimensões também poderia trazer informações úteis para o desenvolvimento de queimadores em matrizes porosas.

O estudo do comportamento de chamas de diferentes combustíveis como, por exemplo, o biogás proveniente de aterros, poderia ser feito através do modelo desenvolvido. O biogás é uma mistura de gases em que predominam o metano e o dióxido de carbono. Pode-se verificar que misturas combustível-ar de gás natural ou biogás possuem fração volumétrica de metano muito próximas, principalmente para os biogases mais ricos em metano.

Testes em diferentes faixas de razões de excesso de ar podem ajudar a identificar limites precisos de funcionamento do queimador desenvolvido. Enfim, a implementação de

modelos de reação com cinética química detalhada faz-se necessária para melhor descrever o processo de combustão ocorrido no equipamento.

7 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ADVIC, F.; ADZIC, M.; DURST, F. **“Small scale porous medium combustion system for heat production in households”**, Applied Energy 87, 8pg., 2148-2155, 2010.

BARCELLOS, W.M.; SOUZA, L.C.O.; FILHO, J.J.H.; BANANEIRA, E.L.Q.; BESERRA, I.H.V. **“Combustão do Gás Natural em Protótipo de Caldeira Não-Convencional de Queimador Poroso”**. Publicado no 4º PDPETRO, Campinas, SP, 2007.

CHAPIRO, G. **“Gas-Solid Combustion in Insulated Porous Media”**. Dissertação para obtenção do Grau de Doutor em Matemática, Rio de Janeiro, RJ, 2009.

HAYASHI, T. C. **“Multidimensional modelling and calculation of combustion in porous media”**. Tese para obtenção do Grau de Doutor em Engenharia Mecânica, Universidade Técnica de Lisboa, Lisboa, Portugal, 2005.

HEYWOOD, J. B. **“Internal Combustion Engine Fundamentals”**, McGraw Hill, New York, 1988.

KAVIANY, M. **“Principles of heat transfer in porous media”**. 2nd ed., Springer-Verlag, New York, 1995.

KULKARNI, M.R.; PECK, R.E. **“Analysis of a bilayered porous radiant burner”**, Presented at the Fall Meeting of the Western States Section of the Combustion Institute, Berkeley, USA, 1992.

MACDONALD, I.F.; EL-SAYED, M.S.; MOW, K. E DULLIEN, F.A.L. **“Flow through porous media – The Ergun equation revisited”**. Industrial Engineering Chemistry Fundamentals, 18, pg.199-208, 1979.

MALICO, I. **“Modelação e cálculo de sistemas de combustão com pré-mistura no interior de meios porosos”**. Dissertação para a obtenção do Grau de Doutor em Engenharia Mecânica, Universidade de Évora, Évora, Portugal, 2001.

MENDES, M.A.A. ; PEREIRA, J.M.C. ; PEREIRA, J.C.F. **“Calculation of premixed combustion within inert porous media with model parametric uncertainty quantification”**, Combustion and Flame 158, 11 pg., 466-476, 2011.

PEREIRA, F. M. **“Analysis of the premixed flame structure within porous inert media and development of a level set model for numerical simulations”**. Dissertação para obtenção do Grau de Doutor em Engenharia Mecânica, Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, SC, 2009.

URNS, S. R. **“An Introduction to Combustion: Concepts and Applications”**, McGraw Hill, Singapore, 2000.

VERSTEEG, H.K. e MALALASEKERA, W.; VERSTEEG, H.K. **“An Introduction to Computational Fluid Dynamics The Finite Volume Method”**. Longman Group, London, 1995.

WESTBROOK, C.K.; DRYER, F.L., **“Simplified reaction mechanisms for the hydrocarbon fuels in flames”**, Combustion Science and Technology 27, 13pg., 31-43, 1981.