



**PREDIÇÃO DA COMBUSTÃO DE GÁS NATURAL EM UMA FORNALHA
UTILIZANDO REAÇÃO EM UMA E DUAS ETAPAS**

Angela O. Nieckele

Dept. Eng. Mecânica, PUC/Rio, 22453-900, RJ, RJ, BRASIL, nieckele@mec.puc-rio.br

Mônica F. Naccache

Dept. Eng. Mecânica, PUC/Rio, 22453-900, RJ, RJ, BRASIL, naccache@mec.puc-rio.br

Marcos S. P. Gomes

Dept. Eng. Mecânica, PUC/Rio, 22453-900, RJ, RJ, BRASIL, mspgomes@mec.puc-rio.br

João N. E. Carneiro

Dept. Eng. Mecânica, PUC/Rio, 22453-900, RJ, RJ, BRASIL, carneiro@mec.puc-rio.br

Ricardo Serfaty

Equip. Projeto & Eng, CENPES/PDEAB, PETROBRAS, 21949-900, RJ, RJ, BRASIL,
rserfaty@cenpes.petrobras.com.br

Resumo. *O trabalho avalia o processo de combustão de gás natural com ar em uma fornalha cilíndrica. O modelo de taxas finitas generalizadas foi selecionado para simular as reações. Duas situações foram consideradas. Na primeira utilizou-se uma única reação global para prever a queima do combustível, e na segunda considerou-se uma reação em duas etapas. As equações de conservação de massa, quantidade de movimento, energia e espécies químicas foram resolvidas utilizando-se o método de volumes finitos, com o software comercial FLUENT. Para modelar o escoamento turbulento, selecionou-se o modelo k- ϵ de duas equações diferenciais. As soluções obtidas, com os dois modelos, para os campos de temperatura e de concentração das espécies químicas foram comparadas entre si e com dados experimentais disponíveis na literatura. Observou-se que a reação em duas etapas representa bem melhor o fenômeno físico, fornecendo resultados que estão em melhor concordância com os dados experimentais.*

Palavras-chave: combustão, forno cilíndrico, gás natural

1. INTRODUÇÃO

O processo de combustão gasosa em fornos industriais pode ser descrito de maneira simplificada como sendo uma combinação dos processos de mistura, ignição, queima, e expansão de jatos de gases, sendo estes últimos compostos basicamente pelos combustíveis envolvidos e pelos produtos da combustão. Em geral, os combustíveis são injetados nos fornos através de queimadores, que podem ter diferentes geometrias. Pode-se também injetar um ou mais combustíveis, em diferentes locações no interior do forno. Logo, o processo de mistura e expansão de jatos deve ser analisado de forma bastante cuidadosa, devido a sua grande influência na eficiência de um forno industrial.

Devido a grande complexidade dos fenômenos envolvidos (escoamento turbulento; transferência de calor a altas temperaturas, o que envolve a necessidade de modelagem da troca por radiação; a participação de inúmeras espécies químicas na reação de combustão, o que pode exigir a inclusão de

um grande número de reações químicas para que o processo possa ser corretamente avaliado; entre outros), e ao grande interesse na área, quer seja por questões de otimização energética ou por questões ambientais associadas à redução na emissão de poluentes, a literatura sobre o processo de combustão industrial vem apresentando um crescente número de trabalhos descrevendo investigações tanto experimentais quanto numéricas.

Voltando-se para o foco desta investigação, existem vários trabalhos na literatura dedicados à investigação numérica de processos de combustão com diferentes modelos. O conceito de dissipação de vórtices (Eddy Dissipation Concept, EDC) e o conceito da função densidade de probabilidade (Probability Density Function, PDF) foram investigados nos trabalhos de Gran e Magnussen (1996), Gran et al. (1997), Ma et al. (1999) e Magel et al. (1996). Correa e Shyy (1987) analisaram modelos físicos e técnicas numéricas utilizadas na simulação da queima turbulenta de gases pré-misturados em geometrias complexas. Bons resultados foram obtidos com modelos de taxas finitas quando o comportamento cinético da mistura e das reações predominava sobre os demais aspectos. Também constatou-se que o modelo de turbulência k- ϵ era o mais utilizado nas simulações.

Carvalho et al. (1993) descrevem a modelagem numérica de câmaras de combustão. Mais recentemente, Gomes et al. (1997) simularam o processo de combustão em uma fornalha cilíndrica, possuindo um único queimador posicionado no eixo da câmara, para a qual existiam dados experimentais (Kobayashi, 1988). A finalidade era verificar o desempenho do modelo na previsão das temperaturas no interior da fornalha. Bons resultados foram alcançados para a maior parte do interior da fornalha. Nieckele et al. (1997) utilizaram o mesmo modelo para simular o processo de combustão em um forno industrial de refusão de alumínio com excelentes resultados.

Goldin e Menon (1998) mostraram uma comparação entre vários modelos utilizando a PDF para simular a combustão turbulenta em chamas de jatos não pré-misturados. Eles investigaram o desempenho de um modelo tradicional de PDF contra um modelo alternativo proposto, no qual a solução da cinética das reações químicas era desacoplada da solução do escoamento. Eaton et al. (1999) apresentaram uma revisão de técnicas de modelagem da combustão aplicadas a combustíveis fósseis e mostraram comparações entre resultados numéricos e experimentais.

Este trabalho apresenta uma simulação numérica do processo de combustão da mistura de ar e combustível no interior de uma fornalha cilíndrica. O objetivo principal foi analisar os resultados da simulação considerando-se a combustão em uma e em duas etapas. Os resultados obtidos foram comparados com dados experimentais e visam orientar o modelamento do processo de combustão de gás natural, auxiliando no projeto de equipamentos industriais, como fornos e incineradores.

2. MODELAGEM MATEMÁTICA

A geometria analisada é baseada no aparato experimental de Magel et al. (1996), e encontra-se ilustrada na Fig. 1. Consiste de um forno cilíndrico com 50 cm de diâmetro e 1,7 m de comprimento. O combustível é injetado em um orifício central com 6 cm de diâmetro e o ar, em um anel adjacente com 5 cm de vão anular. Os resultados das simulações, utilizando reações em uma etapa ou duas etapas, são comparados com os dados experimentais de Magel et al. (1996), que apresenta

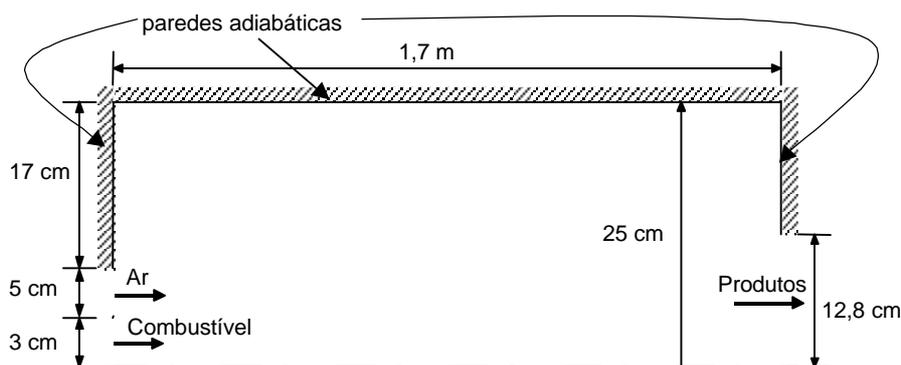


Figura 1. Geometria do forno

informações de temperatura e espécies.

A solução do problema foi obtida através da solução das equações de conservação, utilizando-se o sistema de coordenadas cilíndricas com simetria angular. Considerou-se os gases como fluidos Newtonianos, escoamento em regime permanente. Desprezou-se efeitos gravitacionais.

As propriedades consideradas constantes exceto o calor específico e a densidade da mistura gasosa que é regida pela Lei dos Gases Ideais, $\rho = p_{op}/[R T \sum_{\ell} m_{\ell} / M_{\ell}]$, onde p_{op} é a pressão média de operação no interior do forno, considerada igual a uma atmosfera. R é a constante universal dos gases, T é a temperatura absoluta, m_{ℓ} a fração de massa de cada espécie gasosa e M_{ℓ} é a massa molecular correspondente.

2.1. Equações de Conservação

Para se obter o campo de escoamento no interior do forno, é necessário resolver as equações de conservação de massa, quantidade de movimento linear, energia e espécies químicas. Para representar o regime turbulento, as equações de média no tempo foram consideradas e adotado o modelo de turbulência $k-\epsilon$. As equações de conservação podem ser escritas como:

$$\nabla \cdot (\mathbf{r} \mathbf{v}) = 0 \quad (1)$$

$$\nabla \cdot (\mathbf{r} \mathbf{v} \mathbf{v}) = \nabla \cdot [(\mathbf{m} + \mathbf{m}_t) (\nabla \mathbf{v} + (\nabla \mathbf{v})^T)] + \mathbf{r} \mathbf{g} - \nabla P \quad (2)$$

$$\nabla \cdot (\mathbf{r} \mathbf{v} h) = \nabla \cdot [(\mathbf{m} / Pr + \mathbf{m}_t / Pr_t) \nabla h] + \mathbf{v} \cdot \nabla p + \dot{q} \quad (3)$$

$$\nabla \cdot (\mathbf{r} \mathbf{v} m_{\ell}) = \nabla \cdot [(\mathbf{m} / Sc + \mathbf{m}_t / Sc_t) \nabla m_{\ell}] + R_{\ell} \quad (4)$$

$$\nabla \cdot (\mathbf{r} \mathbf{v} \mathbf{k}) = \nabla \cdot [\mathbf{m}_t / Pr_k \nabla \mathbf{k}] + (\mathbf{G} - \mathbf{r} \mathbf{e}) - \mathbf{m}_t / r Pr_k \mathbf{g} \cdot \nabla \mathbf{r} \quad (5)$$

$$\nabla \cdot (\mathbf{r} \mathbf{v} \mathbf{e}) = \nabla \cdot [\mathbf{m}_t / Pr_e \nabla \mathbf{e}] + (c_1 G - c_2 \mathbf{r} \mathbf{e}) \mathbf{e} / \mathbf{k} \quad (6)$$

Nas equações acima, a viscosidade turbulenta é definida de acordo com o modelo $\kappa-\epsilon$ como $\mathbf{m}_t = c_{\mu} \mathbf{r} \mathbf{k} / \mathbf{e}$, onde c_{μ} é uma constante empírica do modelo assim como c_1 e c_2 . Os números de Prandtl e Schmidt Turbulento, Pr_t e Sc_t , e o número de Prandtl da energia cinética de regime turbulento Pr_k e sua taxa de dissipação Pr_{ϵ} são, também, constantes empíricas. Seus valores de acordo com Launder e Spalding (1974) são: $c_{\mu} = 0,09$; $c_1 = 1,44$; $c_2 = 1,92$; $Pr_t = 0,5$; $Sc_t = 0,50$; $Pr_k = 1,0$ e $Pr_{\epsilon} = 1,0$.

Na equação de quantidade de movimento, Eq. (2), P é a pressão modificada definida como $P = p - (2/3)[(\mathbf{m} + \mathbf{m}_t) \nabla \cdot \mathbf{v} + \mathbf{r} \mathbf{k}]$. O termo G vem das equações do modelo $\kappa-\epsilon$ para geração da energia cinética em regime turbulento, e pode ser calculado de acordo com $G = \mathbf{m}_t \left[\nabla \mathbf{v} + (\nabla \mathbf{v})^T \right] \cdot \nabla \mathbf{v}$.

Estas equações só são válidas no núcleo turbulento, onde $\mu_{\tau} \gg \mu$. Próximo às superfícies sólidas, onde $\mu_{\tau} \ll \mu$, a lei da parede recomendada por Patankar e Spalding (1972) é utilizada.

A lei da parede é obtida assumindo equilíbrio turbulento nas regiões próximas às superfícies sólidas. Deve ser aplicada na região entre a parede e o primeiro ponto nodal da simulação. Esta lei consiste em prescrever um perfil de velocidade logaritmo na região totalmente turbulenta e um perfil linear na subcamada laminar.

$$u^+ = y^+ \quad \text{se } y^+ \leq 11,5 \quad , \quad u^+ = (1/k_{\nu}) \ln(Ey^+) \quad \text{se } y^+ \geq 11,5 \quad (7)$$

onde $u^+ = u / u^*$ é a velocidade adimensional, $y^+ = \rho u^* y / \mu$ é a distância normal à parede adimensional. $u^* = (\tau_s / \rho)^{0,5}$ é a velocidade de atrito, sendo τ_s a tensão cisalhante na parede. As constantes k_v e E que aparecem na equação (7), são $k_v = 0,42$ (constante de von Karman) e $E = 9,81$ (constante devido a rugosidade da parede).

De acordo com a hipótese de equilíbrio entre produção e destruição de energia cinética turbulenta, considerando-se ainda que a tensão cisalhante na parede é aproximadamente constante na região próxima à parede, prescreve-se gradiente normal de energia cinética nulo nas paredes. A dissipação da energia cinética turbulenta é determinada pela seguinte expressão $\varepsilon = c_\mu^{3/4} \kappa^{3/2} / (k_v y)$.

O campo de temperaturas no interior do forno foi obtido através da solução das equações de energia para a entalpia total h , que é definida como a soma das entalpias de cada espécie h_ℓ ponderada pela fração de massa m_ℓ . $h = \sum_\ell m_\ell h_\ell$ onde $h_\ell = \int_{T_{ref}}^T c_{p_\ell} dT$. O termo \dot{q} representa a fonte de entalpia devido às reações químicas de combustão S_{reac} e da transferência de calor por radiação S_{rad} . O primeiro é dado por $S_{reac} = \sum_\ell [h_\ell^0 / M_\ell + \int_{T_{ref}}^{T_{ref,\ell}} c_{p_\ell} dT] R_\ell$ onde h_ℓ^0 e c_{p_ℓ} são as entalpias de formação das espécies ℓ , respectivamente. R_ℓ é a taxa volumétrica de formação das espécies ℓ , portanto, o modelo de combustão se faz necessário.

Para calcular a entalpia no fluido devido à radiação S_{rad} , o modelo DTRM (Discrete Transfer radiation Model) (Carvalho et al., 1991) foi empregado. S_{rad} é computado através da soma das alterações na intensidade de radiação I a cada etapa s de cada vetor que é determinado através do volume de controle. A equação de variação da intensidade de radiação dI a cada etapa ds , pode ser escrito como $dI/ds = -\alpha I + \alpha \sigma T^4 / \pi$, onde α é o coeficiente de absorção e σ é a constante de Stefan-Boltzmann. Os termos à esquerda representam a perda por absorção e o ganho através da emissão devido ao meio participante, respectivamente. O modelo Weighted Sum of Gray Gases Model (WSGGM) (Smith et al., 1982) foi utilizado para o cálculo do coeficiente de absorção.

O transporte na fase gasosa foi calculado através da solução do conjunto de $n-1$ equações de conservação para as espécies químicas, onde n representa o número de espécies químicas, então: $\sum_\ell m_\ell = 1$ e $\sum_\ell R_\ell = 0$. O termo fonte R_ℓ , pode ser expresso através da soma das taxas de reação (geração ou consumo) para as espécies ℓ em toda reação k , denominado $R_{\ell,k}$, de acordo com: $R_\ell = \sum_k R_{\ell,k}$. As taxas nas reações de combustão foram calculadas através dos modelos de Arrhenius e Magnussen (Kuo, 1986; Fluent User's Guide 1995). O valor final para a taxa de reação utilizado no cálculo do termo fonte devido às reações químicas, foi o menor entre as duas obtidas com os modelos de Arrhenius e Magnussen.

No modelo de Arrhenius, a taxa de reação pode ser obtida de acordo com

$$R_{\ell,k} = \eta_{\ell,k} M_\ell T^{\beta_k} A_k \exp(-E_k/RT) \prod_j C_j^{\gamma_{j,k}} \quad (8)$$

onde $\eta_{\ell,k}$ é coeficiente molar estequiométrico para a espécie ℓ na reação k (valores positivos para reagentes, valores negativos por produtos), M_ℓ peso molecular da espécie ℓ (kg/kmol), β_k expoente de temperatura (adimensional), A_k fator pré-exponencial (unidades consistentes), C_j concentração molar de cada espécie reagente j (kmol/m³), $\gamma_{j,k}$ expoente de concentração do reagente j na reação k , E_k energia de ativação para a reação (J/kmol), R é a constante universal [$R = 8314$ Nm/(kgmol K)].

No modelo de Magnussen, a taxa de reação é determinada pelo menor valor obtido com as equações (9). Nas expressões abaixo, j^* representa o reagente que fornece o menor valor para a reação, e p representa os produtos. $K_1 = 4$ e $K_2 = 0,5$ são constantes empíricas.

$$R_{\ell,k} = \eta_{\ell,k} M_\ell K_1 \rho \frac{\varepsilon}{k} \frac{m_{j^*}}{\eta_{j^*,k} M_{j^*}} \quad ; \quad R_{\ell,k} = \eta_{\ell,k} M_\ell K_1 K_2 \rho \frac{\varepsilon}{k} \frac{\sum_p m_p}{\sum_p \eta_{p,k} M_p} \quad (9)$$

2.2. Reações

Considerou-se a oxidação do metano ocorrendo através de dois mecanismos. O primeiro mecanismo consiste em uma reação em uma etapa



e o segundo mecanismo consiste em uma reação de dois passos.



O modelo de taxa finita necessita da definição dos coeficientes estequiométricos para cada espécie para cada reação, de acordo com as equações (11) e (12) para a reação em duas etapas e de acordo com a equação (10) para a reação em uma etapa. A entalpia de formação de cada espécie também deve ser especificada. Em J/kg temos: $h^\circ_{\text{CH}_4}=7,49 \times 10^7$; $h^\circ_{\text{O}_2}=0$; $h^\circ_{\text{N}_2}=0$; $h^\circ_{\text{CO}_2}=3,94 \times 10^8$; $h^\circ_{\text{H}_2\text{O}}=2,42 \times 10^8$; $h^\circ_{\text{CO}}=1,11 \times 10^8$. Os pesos moleculares de todas as espécies envolvidas são: $M_{\text{CH}_4}=16$; $M_{\text{O}_2}=32$; $M_{\text{N}_2}=28$; $M_{\text{CO}_2}=44$; $M_{\text{H}_2\text{O}}=18$; $M_{\text{CO}}=28$. Os parâmetros necessários para o Modelo de Arrhenius para cada reação encontram-se na Tabela 1.

Tabela 1: Parâmetros do Modelo de Arrhenius para cada reação

Reações	A_k	E_k	β_k	$\gamma_{\text{CH}_4,k}$	$\gamma_{\text{O}_2,k}$	$\gamma_{\text{CO}_2,k}$	$\gamma_{\text{N}_2,k}$	$\gamma_{\text{CO},k}$
eq(11)	$1,0 \times 10^{12}$	$1,00 \times 10^8$	0	1	1	-	-	-
eq(12)	$2,8 \times 10^{12}$	$2,03 \times 10^8$	0	-0,3	1,3	0	-	-
eq(13)	$2,91 \times 10^{15}$	$1,67 \times 10^8$	0	-	0,25	-	-	1

2.3. Propriedades Termofísicas:

A viscosidade absoluta foi considerada constante igual a $\mu = 2,97 \times 10^{-5}$ Pa s. A condutividade térmica foi definida igual a $k = 0,0454$ W/(m K), A pressão atmosférica foi definida como pressão de referência. A regra de mistura para a difusão de massa multicomponente é baseada na mistura diluente, sendo o coeficiente de difusão igual ao coeficiente de difusão do N_2 que é $2,88 \times 10^{-5}$ m²/s

O calor específico (em J/kg K) foi definido como variável em relação a temperatura para cada espécie, de acordo com a Tabela 2. O calor específico da mistura foi obtido a partir de uma média ponderada nas frações em massa.

Tabela 2: Calor específico das espécies em função da temperatura

T(K)	$c_p(\text{CH}_4)$	$c_p(\text{O}_2)$	$c_p(\text{CO}_2)$	$c_p(\text{H}_2\text{O})$	$c_p(\text{N}_2)$	$c_p(\text{CO})$
300	2226	914	846	1858	1045	1041
600	3256	1005	1075	2020	1075	1092
1000	4475	1084	1234	2275	1164	1183
1500	5408	1360	1326	2601	1239	1254
2000	5904	1175	1371	2833	1283	1295
2500	6165	1215	1397	2996	1314	1318

2.4. Condições de Contorno

Considerou-se ar ambiente a 323 K, com massa específica de 1,2 kg/m³, entrando coaxialmente no combustor com uma vazão de 0,186 kg/s, correspondendo a uma velocidade de 36,29 m/s. A composição da fração em massa do ar foi definida como sendo 23% de oxigênio, 76% de nitrogênio N_2 e 1% de vapor de água. O combustível utilizado na simulação foi o mesmo utilizado no aparato

de experimental de Magel et al. (1996), sendo formado basicamente por metano CH₄ (90%) e os 10% restantes de nitrogênio. Este gás foi selecionado como uma aproximação para o gás natural, tendo sido injetado a 313 K, com massa específica de 0,649 kg/m³, com uma vazão de 0,0125 kg/s, correspondendo a uma velocidade de 7,69 m/s.

A intensidade de turbulência na entrada foi especificada como sendo igual a 6% para o oxidante e 10% para o combustível. Com relação a dissipação turbulenta, especificou-se o comprimento característico igual a 0,04 m para o oxidante e 0,03 m para o combustível.

A condição de contorno térmica utilizada foi de paredes adiabáticas, com emissividade igual a 0,6. A emissividade dos gases na entrada e saída do forno foi definida como sendo igual a 1,0. Já a Tabela 3 apresenta as concentrações das espécies na entrada.

Tabela 3: Concentrações na entrada

Espécie	orifício central				orifício anular			
	CH ₄	O ₂	N ₂	H ₂ O	CH ₄	O ₂	N ₂	H ₂ O
fração em massa	0,9	0	0,1	0	0	0,23	0,76	0,01

Nas paredes, utilizou-se a condição de contorno de não deslizamento (velocidade nula), sendo as paredes impermeáveis com relação as espécies químicas. Esta condição implica em prescrever fluxo difusivo normal à parede nulo, isto é, $\partial m_\ell / \partial y = 0$. No eixo de simetria, considerou-se nulo o gradiente radial de todas as variáveis, com exceção do componente radial da velocidade, o qual é nulo. A condição de saída para todas as variáveis foi de fluxo difusivo nulo.

Na seção de entrada, considerou-se escoamento uniforme na direção axial, com perfil de concentração também uniforme, em cada região de entrada. Considerou-se a energia cinética turbulenta igual a $\kappa = \chi V_{in}^2/2$, onde $\chi = 0,01$ é a intensidade da turbulência na entrada e V_{in} é o módulo do vetor velocidade na seção de entrada. Para a taxa de dissipação de energia cinética turbulenta, especificou-se $\epsilon = (c_\mu^{3/4} \kappa^{3/2}) / (\kappa_n \beta L_{in})$, onde βL_{in} corresponde ao comprimento característica na entrada, sendo $\beta = 0,04$ a percentagem do tamanho da abertura do escoamento na entrada L_{in} .

3. MÉTODO NUMÉRICO

A solução numérica das equações de conservação foi obtida numericamente através do código comercial Fluent, baseado no método de volumes finitos (Fluent, 1995). O esquema “power-law” foi selecionado para avaliar os fluxos nas faces do volume de controle. O acoplamento velocidade-pressão foi resolvido através do algoritmo SIMPLE. O sistema de equações algébricas para conservação de massa e conservação de espécies químicas foi resolvido pelo método “Additive Correction Multigrid” de Hutchinson e Raithby (1986). Todas as outras equações de conservação foram resolvidas através do método TDMA do algoritmo linha por linha (Patankar, 1980), com o bloco de correção para acelerar a convergência.

Especificou-se uma malha não uniforme de 60 x 30 volumes de controle nas direções axial e radial, com os pontos nodais concentrados próximo as paredes e na região da chama. Um teste de malha foi realizado e com o dobro do número de pontos nodais os resultados qualitativos foram os mesmos, sendo a discrepância máxima para a temperatura inferior a 8% e para a concentração das espécies 6%.

A solução foi considerada convergida quando a soma dos resíduos normalizados foi inferior a 10⁻⁴ e o resíduo normalizado a entalpia foi menor que 10⁻⁶.

4. ANÁLISE DOS RESULTADOS

A seguir serão apresentados e discutidos os resultados obtidos com a queima do metano representada por uma única reação global ou com dois reações. Foi feita também uma comparação com resultados experimentais de distribuição de temperatura, de oxigênio, de dióxido e de monóxido de carbono, encontrados no trabalho de Magel et al. (1996).

A Figura 2 mostra a distribuição de temperaturas obtidas para o caso da reação em duas etapas. Observa-se uma região de temperatura mais baixa próximo a linha de centro correspondente ao jato frio da entrada com alta velocidade. A mistura dos gases ocorre um pouco a jusante da entrada, o que ocasiona o início da queima a partir do segundo terço do forno, resultando em um aumento de temperatura perto da saída do forno. A distribuição das isotermas para o caso de reação em uma etapa é bem semelhante. As temperaturas máxima e mínima para o caso de reação em uma etapa foram de 313 K e 1500 K. Para o caso de reação em duas etapas obteve-se uma temperatura máxima superior, igual a 1750 K. A temperatura mínima é igual correspondente ao valor dos gases na entrada.

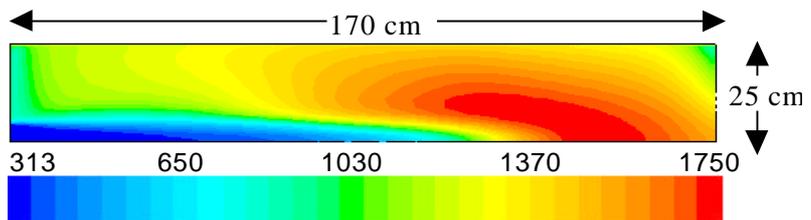


Figura 2. Distribuição de Temperatura – reação em 2 etapas

A Figura 3 apresenta uma comparação da distribuição de temperatura ao longo da linha de centro para os dois casos analisados e os dados experimentais de Magel et al., 1996. Como já foi comentado, ambos os casos apresentam um acréscimo de temperatura a partir de $x \approx 0,5$ m causado pelo início do processo de combustão, em concordância com os dados experimentais. Com o fim da combustão, a solução numérica prevê uma redução na temperatura com é de se esperar. A solução obtida com a reação em duas etapas apresenta uma concordância muito boa com os dados experimentais, inferior a 6%. O perfil de temperatura para o caso de uma única reação global é qualitativamente semelhante, porém, o pico de temperatura é antecipado em relação a reação em duas etapas e dados experimentais.

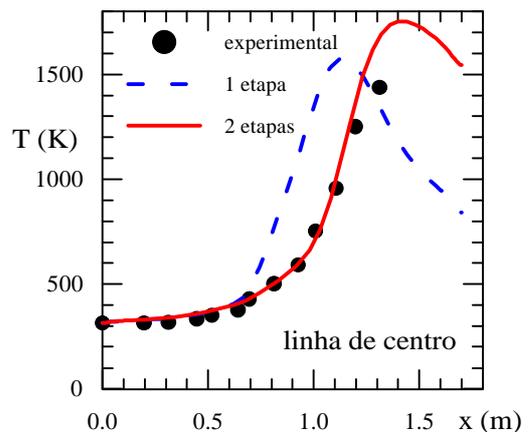


Figura 3. Variação da temperatura ao longo da linha de centro

A Figura 4 apresenta o perfil de temperatura ao longo da direção radial para três diferentes posições axiais. Os resultados obtidos para os dois casos são comparados com os dados experimentais de Magel et al., 1996. Observa-se que o comportamento é qualitativamente similar aos experimentais. Próximo a entrada a concordância da reação em dois estágios com os dados experimentais é muito boa. Para $x = 0,912$ m, os dois modelos apresentam uma concordância apenas qualitativa, com uma boa discrepância entre si e com os dados experimentais, porém a reação em dois estágios se mostra ligeiramente superior. Próximo ao final do forno, a concordância entre os dados melhora sensivelmente, novamente com uma superioridade para a reação em duas etapas.

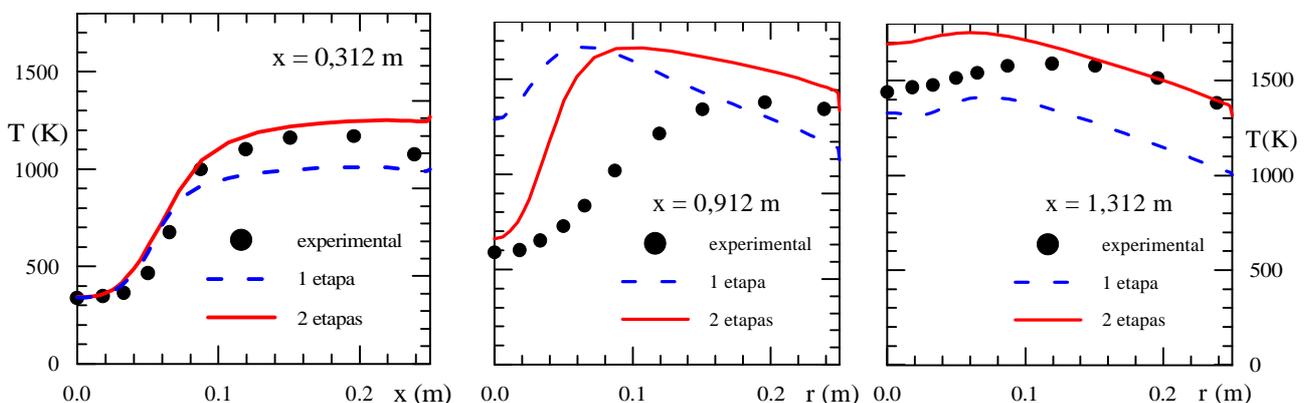


Figure 4. Distribuição de temperatura ao longo da direção radial em diferentes posições axiais.

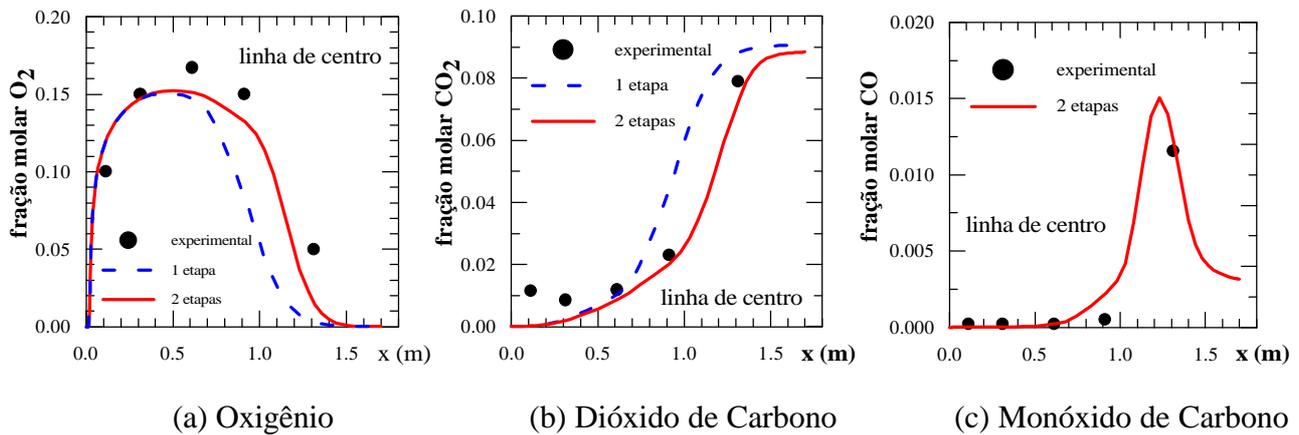


Figura 5. Distribuição de espécies ao longo da linha de centro.

Figura 5 mostra a comparação dos resultados numéricos e experimentais (Magel et al., 1996) de concentração de oxigênio, dióxido de carbono e monóxido de carbono, ao longo da linha de centro. Observa-se uma boa concordância dos resultados numéricos com os experimentais. A concentração de oxigênio aumenta ao longo da linha de centro porque a entrada de ar não é alinhada com o eixo central. Assim, ocorre uma expansão do jato na entrada, levando o oxigênio mais para frente, para o centro do forno. Com o início do processo de combustão, a concentração de oxigênio diminui. Ao mesmo tempo, ocorre um aumento da temperatura (Figura 3) e, no caso da reação em duas etapas, da concentração de monóxido de carbono (criado pela primeira reação). Conforme esperado, no caso da reação em uma etapa, o dióxido de carbono é criado antes. Observa-se que os dois casos apresentam uma boa concordância qualitativa em relação aos dados experimentais. Porém, no caso com a reação em duas etapas a concordância quantitativa também é bastante satisfatória. Outra vantagem da reação em duas etapas é a capacidade de prever a distribuição de monóxido de carbono, a qual como pode-se observar na Fig. 5c, apresenta uma boa concordância com os dados experimentais.

As Figuras 6 e 7 mostram a variação radial da concentração de oxigênio e dióxido de carbono, para diferentes posições axiais. Novamente, observa-se uma boa concordância qualitativa com os dados experimentais, e o caso com a reação em duas etapas apresenta os melhores resultados. Porém, nota-se uma discrepância nas concentrações de oxigênio obtidas em regiões mais próximas da saída. Os resultados das concentrações de dióxido de carbono são melhores, sendo que as maiores diferenças em relação aos dados experimentais são obtidas próximas da entrada.

5. COMENTÁRIOS FINAIS

Neste trabalho foi analisado o processo de combustão de gás natural em um forno cilíndrico. Foi utilizado o modelo de combustão de taxa finita generalizada e o modelo de Arrhenius-Magnussen para avaliar as taxas de reações. Foram consideradas dois casos: o primeiro considerando uma reação global para caracterizar o processo de combustão, e o segundo caso que considerou uma reação em duas etapas, que permite a previsão do monóxido de carbono. Os resultados numéricos foram obtidos com o "software" FLUENT, utilizando o método de volumes finitos. Observou-se uma boa concordância entre os resultados numéricos e os dados experimentais de Magel et al. (1996), sendo que o caso com duas etapas apresentou os melhores resultados, muito próximos dos valores experimentais.

REFERÊNCIAS

- Correa, S. M. Shyy, W., 1987, "Computational Models And Methods For Continuous Gaseous Turbulent Combustion", *Prog. Energy Combust. Sci.*, Vol. 13, pp. 249-292.
- Carvalho, M.G., Farias, T., and Fontes, P., 1991, "Predicting Radiative Heat Transfer in Absorbing,

Emitting, and Scattering Media Using the Discrete Transfer Method", W.A. Fiveland et al, *Fundamentals of Radiation Heat Transfer, ASME HTD*, Vol. 160, pp. 17-26.

Carvalho, M.G., Azevedo, J.L.T., Coelho, P.J., and Nogueira, M., 1993, "Mathematical Modelling of Heat Transfer in Combustion Chambers", *Proc. 12th Brazilian Congress of Mechanical Engineering*, Vol. I, pp. 15-23.

Eaton, A.M., Smoot, L.D. and Eatough, C.N., 1999, "Components, Formulations, Solutions, Evaluation, And Application Of Comprehensive Combustion Models", *Progress In Energy And Combustion Science*, Vol. 25, n, 4, pp. 387-436.

Fluent User's Guide, v. 4.3,1995, Fluent Inc., New Hampshire.

Gomes, M. S. P., Nieckele, A.O., Naccache, M. F., and Kobayashi, W., 1997, "Numerical Investigation of the Oxygen Enriched Combustion Process in a Cylindrical Furnace", *Proc. 4th Int. Conf. on Tech. and Combustion for a Clean Environment*, Portugal, Vol. II, *Oxy-combustion*, 36.1, pp. 1-5.

Goldin, G. M. and Menon, S.A. 1998, "Comparison of Scalar PDF Turbulent Combustion Models", *Combustion and Flame*, Vol. 113, n. 3, pp. 442-453.

Gran, I.R. and Magnussen, B. F., 1996, "A Numerical Study Of A Bluff-Body Stabilized Diffusion Flame - Part 2 - Influence Of Combustion Modeling And Finite-Rate Chemistry", *Combust. Sci. and Tech.*, Vol.119, pp. 191-217.

Gran, I.R., Ertesvåg, I.S. and Magnussen, B. F., 1997, "Influence of Turbulence Modeling on Predictions of Turbulent Combustion", *AIAA JNournal*, Vol 35, n. 1, pp. 106-110.

Hutchinson, B. R., and Raithby, G.D., 1986, "A Multgrid Method Based on the Additive Correction Strategy", *Numerical Heat Transfer*, Vol. 9, pp.511-537.

Kobayashi, H., 1988, "Oxygen Enriched Combustion System", Union Carbide Corporation, Internal Report

Kuo, K.K., 1986. "Principles of Combustion", John Wiley & Sons, New York.

Launder, B.E. and Spalding, D.B., 1974. "The Numerical Computation of Turbulent Flows", *Computer Methods in App. Mech. and Engineering*, Vol. 3, pp. 269-289.

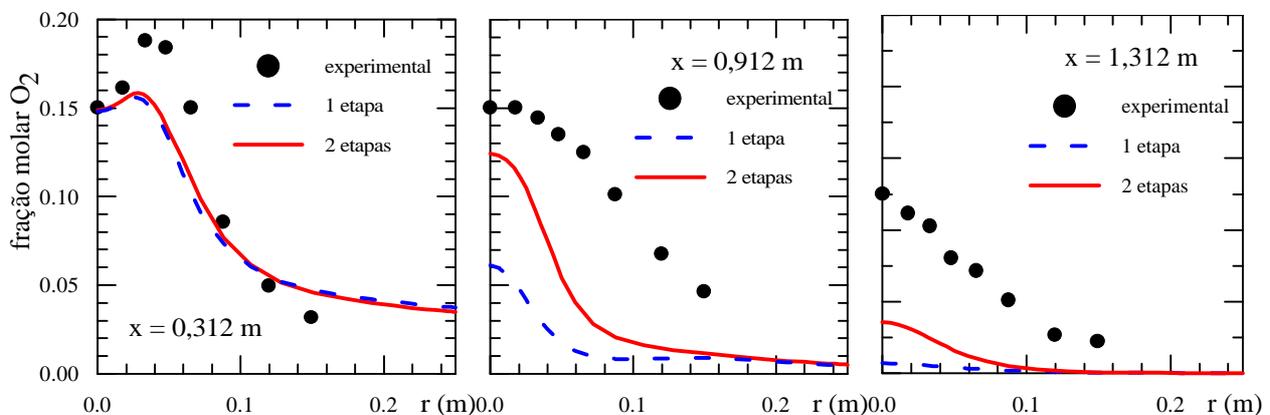


Figure 6. Distribuição de oxigênio ao longo da direção radial em diferentes posições axiais

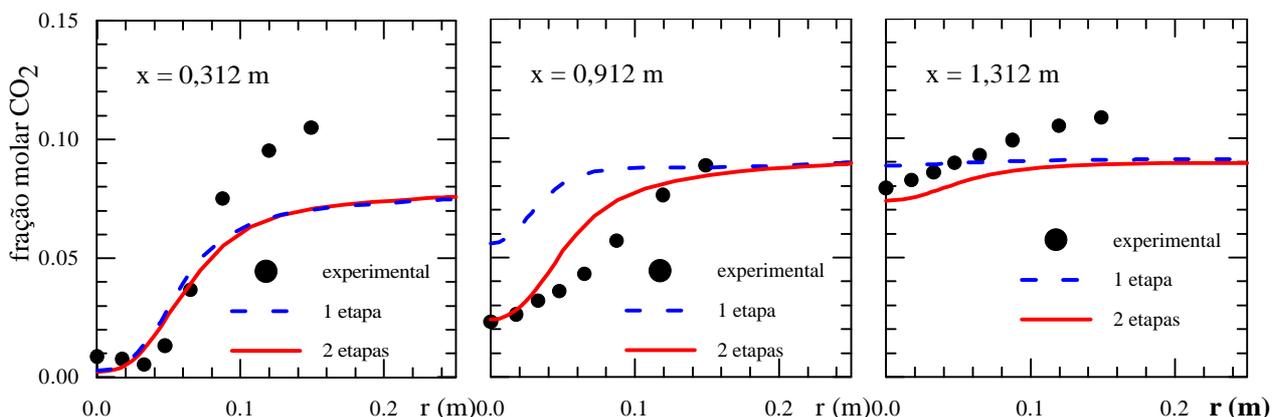


Figure 7. Distribuição de dióxido de carbono ao longo da direção radial em diferentes posições axiais.

- Ma, C.Y., Mahmud, T., Gaskell, P.H. and Hampartsoumian, E., 1999, Proc. of the Institution of Mechanical Engineers, *Journal of Mechanical Engineering Science*, Part C, Vol. 213, n.7, pp. 697-705.
- Magel, H.C., Schnell, U., and Hein, K.R.G., 1996, "Modeling Of Hydrocarbon And Nitrogen Chemistry In Turbulent Combustor Flows Using Detailed Reaction Mechanisms", *Proc. 3rd Workshop on Modeling of Chemical Reaction Systems*, Heidelberg.
- Nieckele, A.O., Naccache, M. F., Gomes, M. S. P. and Kobayashi, W., 1997, "Numerical Simulation of a Three Dimensional Aluminum Melting Furnace", *Proc. 4th Int. Conf. on Tech. and Comb. for a Clean Environ.*, Lisboa, Portugal, Vol. II, *Oxy-combustion*, 36.3, pp. 15-20.
- Patankar, S.V. and Spalding, D.B., 1972. Heat and Mass transfer in Boundary Layers, Morgan-Grampian, London.
- Patankar, S.V. 1980, " Numerical Heat Transfer e Fluid Flow", Mcgraw-Hill.
- Sivathann, Y.R. and Faeth, G.M, 1990, "Generalized State Relationships for Scalar Properties in Non Premixed Hydrocarbon/Air Flames, *Combustion Flame*, Vol. 82, pp.211-230.
- Smith, T.F., Shen, Z.F., and Friedman, J.N., 1982. "Evaluation of Coefficients for the Weighted Sum of Gray Gases Model", *Transactions of the ASME - Journal of Heat Transfer*, Vol. 104, pp. 602-608.

PREDICTION OF NATURAL GAS COMBUSTION IN A CILINDRICAL FURNACE BY A ONE STAGE AND TWO-STAGED REATION

Angela O. Nieckele

Dept. Mechanical Eng., PUC/Rio, 22453-900, RJ, RJ, BRASIL, nieckele@mec.puc-rio.br

Mônica F. Naccache

Dept. Mechanical Eng., PUC/Rio, 22453-900, RJ, RJ, BRASIL, naccache@mec.puc-rio.br

Marcos S. P. Gomes

Dept. Mechanical Eng., PUC/Rio, 22453-900, RJ, RJ, BRASIL, mspgomes@mec.puc-rio.br

João N. E. Carneiro

Dept. Mechanical Eng., PUC/Rio, 22453-900, RJ, RJ, BRASIL, carneiro@mec.puc-rio.br

Ricardo Serfaty

Project Equip. & Eng, CENPES/PDEAB, PETROBRAS,21949-900 RJ, RJ, BRASIL, rserfaty@cenpes.petrobras.com.br

Abstract. *The work evaluates the combustion of natural gas in a cylindrical furnace. The Generalized Finite Rate Reaction Model was selected for predicting the reactions. Two situations were considered. In the first case the combustion of the fuel was predicted by a single global reaction, and in the second case a two-step reaction was considered for predicting the combustion process. The conservation equations of mass, momentum, energy and chemical species were solved by the finite volume procedure, with the commercial software FLUENT. The turbulent flow was modeled by employing the two differential equation k- ϵ model. The solutions obtained with the two reaction models, for the temperature and species concentration fields, were compared among them and against experimental data available in the literature. It was observed that the two-step reaction model represents better the physical phenomena, showing a better agreement with the experimental data.*

Key-words: combustion, cylindrical furnace, natural gas