

## Análise da Câmara de Combustão de Microturbinas Empregando-se o Código Computacional CHEMKIN III

**Vinicius Zacarias Madela**

**Luís F. de A. Pauliny**

**Carlos A. Gurgel Veras** – [gurgel@enm.unb.br](mailto:gurgel@enm.unb.br)

Universidade de Brasília  
Faculdade de Tecnologia  
Departamento de Engenharia Mecânica  
Asa Norte, 70910-900  
Brasília – DF

**Fernando de S. Costa** – [fernando@cptec.inpe.br](mailto:fernando@cptec.inpe.br)

Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais  
Laboratório Associado de Combustão e Propulsão  
Rod. Presidente Dutra km 40, 12630-000  
Cachoeira Paulista – SP

### Resumo

A utilização de mecanismos detalhados de queima de hidrocarbonetos em códigos comerciais de dinâmica dos fluidos computacional é inviabilizada pela demanda excessiva de memória computacional e velocidade de processamento. A análise, porém, pode ser realizada por uma cadeia de reatores do tipo “*perfectly stirred*” (PSR) e “*plug flow*” (PFL) baseada em análise preliminar do escoamento por intermédio de dinâmica dos fluidos computacional. Os resultados indicam a validade na aplicação da técnica de cadeia de reatores em problemas complexos de dinâmica dos fluidos com reação química principalmente no que se refere ao estudo das emissões. O presente trabalho apresenta os resultados obtidos na simulação da câmara de combustão de microturbinas multicomcombustíveis. Particularmente, são apresentadas as previsões para a queima de metano e de diesel. Para tal foram utilizadas as rotinas apropriadas do código computacional CHEMKIN III.

**Palavras-chave:** Combustão, turbinas, CHEMKIN III

### 1. INTRODUÇÃO

Com o progresso da mecânica dos fluidos computacional abrem-se novas possibilidades para o desenvolvimento de processos aplicados às engenharias. Estas novas possibilidades estão diretamente relacionadas com o baixo custo na previsão das conseqüências impostas por alterações nas condições de contorno de um dado problema. Dentro deste contexto, este trabalho se propõe à análise de uma câmara de combustão de uma unidade turbocompressora

idealizada para queimar combustíveis variados, tais como metano e diesel com auxílio do código computacional CHEMKIN III ([www.reactiondesign.com](http://www.reactiondesign.com)). Estas pequenas unidades geradoras, produzindo em média até 10 kW têm um potencial considerável de se tornarem uma alternativa tecnológica importante na matriz energética internacional. Diversos fabricantes investiram no aprimoramento destas unidades as quais já estão disponíveis no mercado (*Turbo-Genset*, [www.turbogenset.com](http://www.turbogenset.com); *Capstone Turbine Co.*, [www.capstoneturbine.com](http://www.capstoneturbine.com)). Devido às dimensões reduzidas, estas unidades são denominadas **microturbinas**. As microturbinas possuem vantagens relativas quando comparadas com outros meios de geração de eletricidade que as tornam extremamente competitivas e desejáveis. No Brasil o mercado é imensurável. Milhares de escolas necessitam de eletrificação a baixo custo, com reduzida manutenção nas unidades geradoras e, principalmente, na simplicidade operacional. Pequenas fábricas, centros comerciais, grupos de trabalho deslocados entre outros complementam a demanda por estas unidades geradoras.

Microturbinas são seguras, eficientes, silenciosas, confiáveis, necessitam de pouca manutenção e produzem energia elétrica a um baixo custo. Elas são projetadas para queimarem uma grande variedade de combustíveis, como gás natural, diesel, álcool e biogás.

Geradores convencionais movidos por um motor a diesel ligado a um alternador de baixa velocidade, com capacidade de 50 kW, tipicamente pesam entre 1 e 2 toneladas. Uma microturbina pode produzir a mesma potência pesando apenas 100 kg. Estas proporções reduzidas é um dos pontos-chaves deste projeto. Compacta, a microturbina pesa em torno de 10% do peso de um gerador equivalente a diesel, o que a torna extremamente portátil e adaptável a uma vasta gama de aplicações. Por exemplo, o transporte de geradores para locais remotos como poços de perfuração pode ser muito caro e demorado, pois envolve movimentação de caminhões e aeronaves, por exemplo. Além de minimizar os custos de instalação, a manutenção requerida por uma microturbina é mínima.

A confiabilidade na ignição é muito alta, o que faz das microturbinas a escolha ideal para operação em condições adversas, como em climas frios. Outras características incluem baixa emissão de poluentes, baixo ruído e capacidade multi-combustível. As emissões são baixas como resultado da queima pobre e da combustão contínua, que contrasta com a combustão intermitente do motor movido a pistão alternativo. O ruído associado a turbinas é constante e de alta frequência, e pode ser controlado com certa facilidade.

Uma das principais características da microturbina analisada neste trabalho é a utilização de uma unidade turbo-compressora igual as usadas em motores a diesel. Geralmente as turbinas utilizam unidades de fluxo axial, que possuem eficiência superior, porém de custo muito elevado. Estas unidades de fluxo axial são usadas, por exemplo, nos motores de avião, que exigem eficiência e confiabilidade máximas. Nos geradores de energia elétrica, entretanto, é possível a utilização de unidades turbo-compressoras centrífugas de fluxo radial, que possuem custos extremamente baixos quando comparados as tradicionais, além de serem de fácil aquisição e de terem disponível manutenção em praticamente todo o território nacional. A unidade usada como modelo no primeiro protótipo foi uma TurboEX, modelo 4LEK.

## 2. A CÂMARA DE COMBUSTÃO

A fabricação e operação de tais unidades requerem portanto a solução de dois problemas fundamentais. Uma vez que o sistema emprega unidades turbocompressoras comerciais de motores diesel, faz-se necessário o projeto e o fabrico da câmara de combustão e de um gerador elétrico capaz de operar em elevadas rotações, superiores a 35000 rpm. Neste trabalho apresenta-se o projeto da câmara de combustão baseado em cálculos das rotinas pertinentes do

pacote computacional CHEMKIN III. O programa utilizado foi recentemente adquirido pelo Laboratório de Combustão e Propulsão do Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais.

O processo de combustão é de importância crítica para o ciclo da microturbina porque é neste processo que a energia, que será depois convertida em trabalho na turbina é fornecida ao sistema. Portanto qualquer perda que ocorra no processo terá um efeito direto na eficiência térmica do ciclo.

O processo de combustão no interior da câmara é extremamente complicado o acarreta na quase inviabilização de uma análise rigorosa do escoamento reativo e das interações deste com as paredes do combustor. Desta forma, a redução nas perdas de carga bem como nas dimensões gerais da câmara exigem um tratamento rigoroso do processo. Os fenômenos são totalmente interligados, o escoamento é tridimensional e as reações químicas são função da temperatura e das concentrações locais no escoamento. Um projeto elaborado da câmara de combustão acarreta em uma redução no tamanho dos combustores, aumenta a vida útil deste bem como a confiabilidade na operação com diversos combustíveis. Um número razoável de simulações permitiu uma aproximação da teoria com a realidade do projeto, o que causou economia de tempo e material durante a fabricação do protótipo.

A principal função da câmara de combustão é, obviamente, acolher a reação química do combustível com o ar oriundo do compressor e os produtos da combustão com entalpia elevada injetados na turbina. Para o bom desempenho desta função, a câmara de combustão deve preencher os seguintes requisitos (Lee, 1954):

1. a combustão deve ocorrer de maneira completa no interior da câmara de combustão pois esta afetará a eficiência térmica global da microturbina;
2. as perdas de carga devem ser baixas;
3. a geometria da câmara deve garantir estabilidade da combustão dentro de um amplo intervalo de relações ar-combustível (RAC);
4. a ignição deve ser confiável e simples para várias condições climáticas;
5. alto grau de mistura entre ar e combustível, assim como entre os produtos da combustão e o ar, de modo a realizar uma combustão completa assim como criar uma distribuição de temperatura uniforme nos gases que vão para a turbina;
6. não criar depósitos de carbono sob nenhuma condição de trabalho planejada;
7. o volume e o peso da câmara de combustão devem estar dentro de limites toleráveis.

### **3. METODOLOGIA**

A modelagem numérica de câmaras de combustão de turbinas a gás requer sofisticados códigos computacionais de elevado custo e difícil utilização. Em função disto, grande parte das câmaras de combustão ainda em utilização foram projetadas com o emprego maciço de informações empíricas. Com as modernas restrições na emissão de poluentes tem-se observado o emprego de códigos computacionais robustos no projeto e otimização dos principais elementos que compõem a câmara de combustão. Na região estável da queima, bem como a parte da injeção secundária o acoplamento entre mecânica dos fluidos (turbulência), transferência de calor e reação química tornam o problema extremamente complexo, mesmo para códigos bem elaborados. Uma prática corrente é o emprego de mecanismos de reação globais onde apenas um, dois ou no máximo quatro passos definem a taxa em que um dado hidrocarboneto é convertido em produtos da combustão. Este problema pode ser resolvido conceitualmente pelo emprego de uma cadeia de reatores simplificados com concomitante emprego de mecanismos reativos detalhados (Turns, 1993). Segundo Turns, esta maneira de se estudar o processo é muito dependente da experiência do projetista na montagem das cadeias de reatores. Usualmente, empregam-se reatores do tipo bem misturado (PSR) e

reatores PFL (“plug flow”), em série e/ou paralelo para a montagem da cadeia. A definição da cadeia pode também ser efetuada a partir da simulação prévia da câmara em um código CFD com mecanismos globais de reação. Este artifício foi empregado por Swithebank *et al.* (1973) no dimensionamento completo de uma câmara de combustão de turbina a gás onde até seis reatores (PSR e PFL) foram conectados em série. O mecanismo reativo, porém era do tipo global (simplificado).

A primeira parte da simulação dos fenômenos que ocorrem no interior da câmara de combustão foi realizada com a rotina “Aurora”, do pacote CHEMKIN III, que considera o reator como perfeitamente misturado. A etapa subsequente, ou seja, a diluição dos produtos da combustão foram simulados utilizando-se a rotina “Plug”, também do pacote CHEMKIN III.

A estabilização da chama na câmara de combustão ocorre a partir de uma definição para a aerodinâmica do escoamento numa região próxima à injeção de combustível. O comportamento aerodinâmico desta região garante que a chama se estabilize e permaneça ancorada sem que se utilize de energia externa para a ignição do combustível que é continuamente injetado. Existem diversos dispositivos que garantem a estabilização. O mais comum é a colocação de um “swirler” para conduzir o ar para o interior da câmara com um dado grau de turbulência e atuação que permita o desenvolvimento de uma zona de recirculação que misture produtos aquecidos da combustão com a mistura fresca que adentra a câmara (Lawn, 1987). O nível de turbulência é tão alto que supõe-se elevado grau de mistura para todos os constituintes, portanto, ausência de gradientes de concentração. O processo passa a ser limitado simplesmente pelo nível de temperatura e das taxas de reação dos elementos da mistura

A rotina Aurora é um programa computacional que determina a temperatura e a composição química para um regime permanente em um reator perfeitamente misturado. Esses reatores são caracterizados pelo volume do reator, tempo de residência ou fluxo de massa, perda de calor ou temperatura, além da temperatura dos gases de entrada e a composição química da mistura. O modelo leva em conta reações químicas elementares (mecanismos detalhados) com taxas finitas. As equações governantes são um sistema de equações algébricas não lineares. O programa resolve essas equações usando um método híbrido de resolução, usando tanto Newton quando integração temporal. Nos casos onde o método de Newton encontra dificuldades na convergência, a integração temporal ajuda a trazer a solução trivial para o domínio de convergência do método de Newton. O programa roda em conjunto com a biblioteca principal do pacote CHEMKIN. O mecanismo empregado foi aquele proposto pelos seguintes grupos de pesquisa: “University of California at Berkeley”, “Stanford University”, “The University of Texas at Austin”, e “SRI International” dos EEUU. O mecanismo é denominado GRI-Mech (1999) e contém 53 espécies químicas com 325 reações elementares. O mecanismo foi desenvolvido especificamente para simulação da queima de gás natural.

O PSR foi executado em duas etapas, pois devido à recirculação decorrente do sistema de ancoragem da chama utilizado (“swirler”), a região de ignição da chama está em constante contato com os produtos da combustão que se encontram turbilhonados no interior da câmara. As etapas foram então assim divididas: a primeira consumiu 80% da mistura primária total, ocupando apenas 25% da região primária total. Isso porque região onde a chama pode queimar utilizando como reagentes apenas a mistura limpa é pequena. A segunda etapa, portanto, usa como reagentes os 20% de mistura limpa restante, além dos produtos da combustão provenientes da primeira etapa. Esta etapa usa um volume três vezes maior que a etapa anterior, ou seja, 75 % da região primária total.

No projeto da unidade como um todo definiu-se que aproximadamente 75% do ar admitido pelo compressor deve ser injetado na câmara após a região primária, parte na zona

de queima secundária e o restante na zona de diluição. Portanto, a câmara de combustão deve realizar uma queima estequiométrica (mais estável) com os 25% de ar que são admitidos pelo compressor. Esta divisão é realizada pela configuração geométrica das entradas na câmara de combustão (25%) e da área externa a esta (75%) a partir de um projeto preliminar e será ajustada experimentalmente.

Após a queima estequiométrica da mistura de gases na região primária da câmara de combustão, os gases provenientes atingem valores elevados de temperatura, da ordem de 2100 K, ou seja, valores inaceitáveis para as palhetas da turbina. Por esse motivo, os produtos da combustão devem ser diluídos em ar com uma temperatura relativamente baixa, de modo a trazer a mistura final para o ponto de trabalho da turbina, que tem uma temperatura máxima de aproximadamente 1100 K. A diluição será feita com o ar secundário, que será injetado na câmara de combustão em três etapas, sendo que em todas elas o fluxo de massa de ar de diluição é o mesmo.

O ar, ao chegar no difusor que separa o ar primário do secundário, se encontra a uma temperatura de 393.9 K, valor esse maior que a temperatura ambiente devido a compressão do ar da pressão atmosférica até a pressão de trabalho, equivalente a 2 atm.

Para a simulação dos fenômenos que ocorrem após cada entrada de ar de diluição foi usado a rotina Aurora. A rotina Plug utiliza como dados de entrada o comprimento e o diâmetro do duto, os gases de entrada e suas frações molares, além da temperatura e pressão de entrada. É também requerida a velocidade do escoamento. O programa considera um duto de seção circular, onde as propriedades em cada seção são constantes, ou seja, o problema é tratado como unidimensional, com variações na direção axial, mas não nas direções radial e angular.

A rotina Plug foi executada em três etapas, onde em cada uma a terça parte do ar secundário total foi injetado na parte interna da câmara de combustão. Os gases de entrada da primeira etapa foram extraídos da saída da segunda etapa do PSR, e para as etapas seguintes foram utilizados a saída da etapa anterior. O espaçamento entre as entradas foi considerado constante, para simplificar a análise dos dados.

## **4. RESULTADOS OBTIDOS**

Os resultados foram obtidos a partir das simulações realizadas pelo código CHEMKIN III. Os testes foram feitos para diferentes comprimentos da câmara de combustão, sendo que em todos os testes o diâmetro utilizado para a parte interna foi de 60 mm. Diversos comprimentos para as diferentes etapas (duas etapas de queima e três etapas de diluição) foram testados e, no exemplo abaixo são demonstrados os resultados para câmaras de 240 e 270 mm respectivamente. Nestes casos, variou-se apenas os comprimentos das etapas de queima, sabendo que o requisito mais importante para que este conjunto funcione corretamente é a limitação da temperatura final dos gases da combustão. As etapas de diluição foram todas realizadas com comprimentos iguais a 50 mm, valor este que poderia teoricamente ser reduzido, porém dificultaria a manufatura da câmara de combustão. A primeira etapa de queima foi definida como 30 mm, região esta pequena pois o espaço da câmara onde a mistura limpa é queimada sozinha é mínimo. A região de queima secundária sofreu variação do comprimento, de modo a se avaliar o comprimento necessário para a completa combustão dos gases provenientes da região primária.

### **4.1 Avaliação dos principais aspectos da câmara de combustão**

Para a câmara de 240 mm, obtivemos o perfil de temperatura mostrado na Fig. 1, onde pode-se observar as quedas de temperatura provocadas pela entrada do ar de diluição. A

queima continua ocorrendo mesmo após a primeira entrada de ar secundário, elevando novamente a temperatura. Após a segunda entrada as reações químicas basicamente cessam, e tanto a temperatura quanto as concentrações químicas se mantêm constantes para as regiões entre as entradas de ar. A Tabela 1 sumaria os valores da temperatura em pontos estratégicos da câmara de combustão enquanto a Tab. 2 apresenta os dados gerais da câmara de 240 mm.

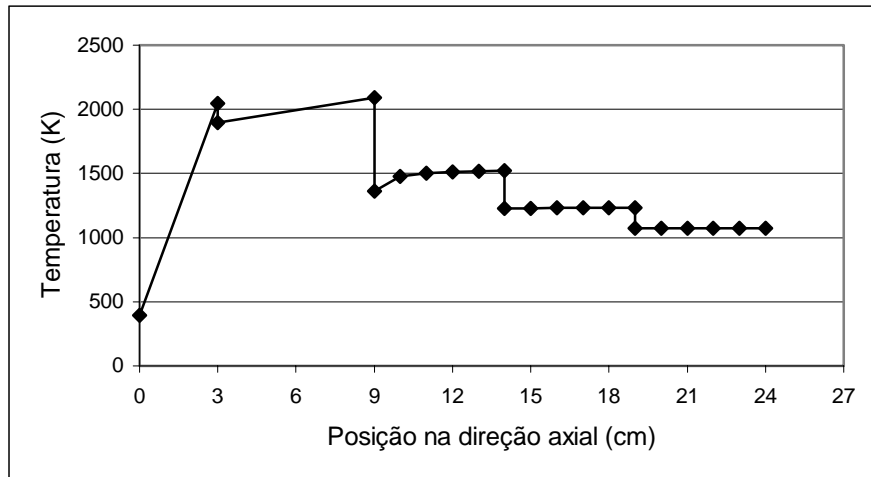


Figura 1 – Perfil de temperatura para a câmara de 240 mm.

Os valores encontrados para cada etapa foram:

Tabela 1 – Temperaturas ao longo da câmara de 240 mm.

Etapa	Posição inicial (mm)	Posição final (mm)	Temperatura inicial (K)	Temperatura final (K)
PSR 1	0.0	30.0	393.9	2046.0
PSR 2	30.0	90.0	1898.0	2089.0
PFL 1	90.0	140.0	1362.9	1520.4
PFL 2	140.0	190.0	1227.2	1231.1
PFL 3	190.0	240.0	1074.6	1075.0

Os dados finais para a câmara testada foram:

Tabela 2 – Dados gerais da câmara de 240 mm.

Comprimento total	240 mm
Temperatura de saída	1075.0 K
Temperatura máxima encontrada	2089.0 K

Resultados semelhantes foram encontrados quando a segunda região de queima foi aumentada em 30 mm. Entretanto, esse aumento na região de queima diminuiu os valores das temperaturas, deixando os gases atingirem as palhetas da turbina com uma temperatura consideravelmente abaixo da temperatura de projeto. Como o aumento no comprimento não foi demasiadamente significativo, o comprimento escolhido foi o de 270 mm. A Figura 2 indica a distribuição de temperatura ao longo da câmara de combustão de 270 mm. As Tabelas 3 e 4 sumariam as temperaturas e características gerais da câmara.

Estas simulações levam em conta apenas três entradas pontuais de ar, por isso a existência dos degraus no perfil de temperatura. No protótipo as entradas pontuais serão substituídas por várias pequenas entradas, o que tornará a queda de temperatura mais suave. Infelizmente com os recursos disponíveis não foi possível traçar um perfil de temperatura mais próximo do real, pois isto implicaria na utilização de dezenas de reatores do tipo PFL encadeados. A Figura 3 mostra os índices de formação de NO ao longo da câmara de combustão. Pode-se observar que quanto mais elevada a temperatura, maior a taxa de formação deste poluente. Quando o ar de diluição é injetado na câmara, a fração molar de NO cai devido à introdução de mais ar limpo no sistema. Entretanto, isso apenas parece diminuir a quantidade de NO, porque na verdade ele diminui de maneira percentual na mistura mas mantém sua quantidade absoluta estável.

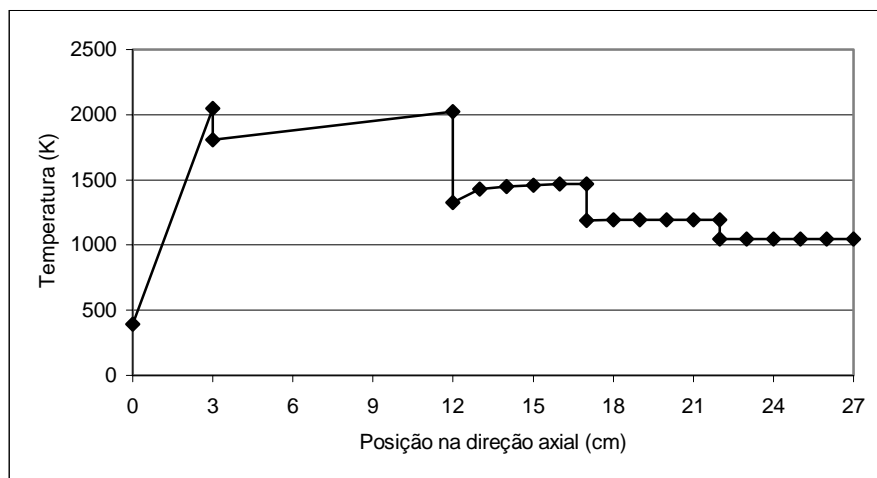


Figura 2 – Perfil de temperatura para a câmara de 270 mm.

Os valores encontrados para cada etapa foram:

Tabela 3 – Temperaturas ao longo da câmara de 240 mm.

Etapa	Posição inicial (mm)	Posição final (mm)	Temperatura inicial (K)	Temperatura final (K)
PSR 1	0.0	30.0	393.9	2046.0
PSR 2	30.0	120.0	1807.4	2022.0
PFL 1	120.0	170.0	1324.8	1470.4
PFL 2	170.0	220.0	1190.4	1194.1
PFL 3	220.0	270.0	1045.2	1045.5

Os dados finais para a câmara testada foram:

Tabela 4 – Dados gerais da câmara de 240 mm.

Comprimento total	270 mm
Temperatura de saída	1045.5 K
Temperatura máxima encontrada	2022.0 K

O único modo de abaixar a taxa de formação deste poluente é abaixando a temperatura da queima, o que só pode ser conseguido através do empobrecimento da mistura, ou seja, da adição de mais ar na queima do combustível. Isso entretanto diminuiria a estabilidade da chama, consequentemente diminuindo a confiabilidade da turbina como um todo.

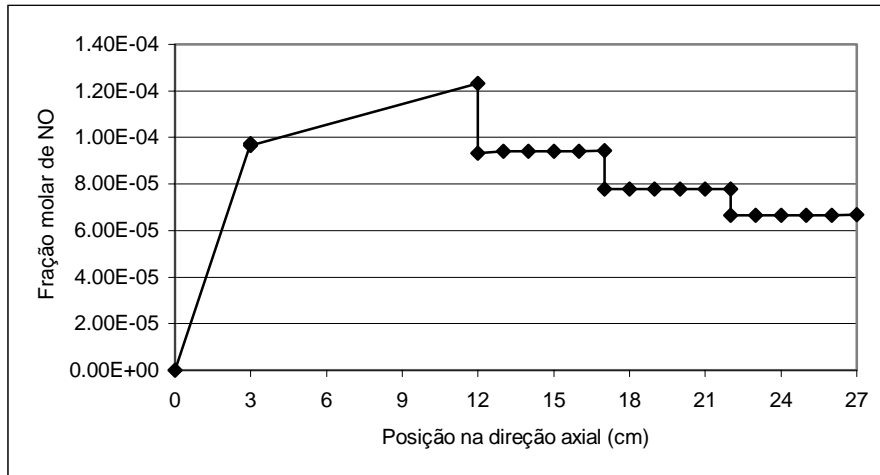


Figura 3 – Distribuição de NO ao longo da câmara de combustão.

A Figura 4 mostra como ocorre a queima do  $\text{CH}_4$  no interior da câmara de combustão. Pode-se observar que logo no início quase todo o  $\text{CH}_4$  é consumido, indicando que o processo ocorre dentro da região estipulada. Uma fração desprezível ainda atinge a região de diluição, o que proporciona o aumento de temperatura observado na primeira etapa do reator PFL.

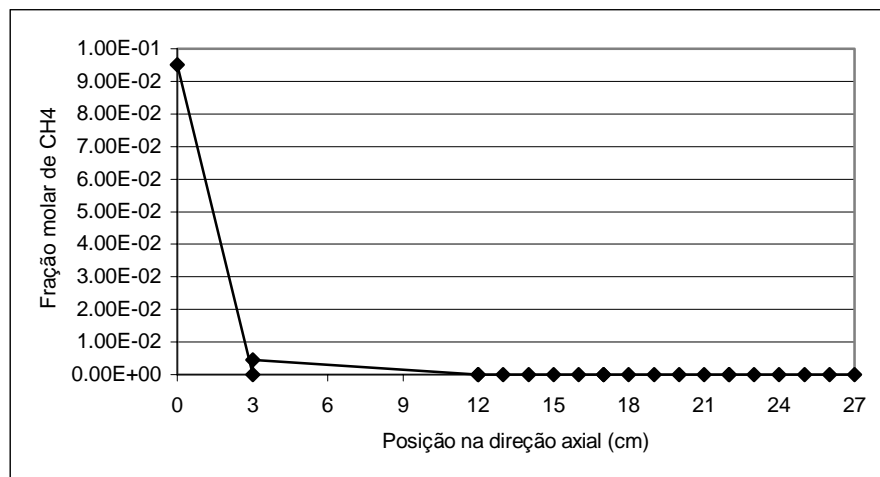


Figura 4 – Distribuição de  $\text{CH}_4$  ao longo da câmara de combustão.

As concentrações de  $\text{O}_2$  e  $\text{H}_2\text{O}$  variam de acordo com a Figura 5, onde pode ser observado que elas basicamente são inversamente proporcionais. Isto ocorre porque as moléculas de  $\text{H}_2\text{O}$  são formados a partir da decomposição do  $\text{O}_2$ . Durante a fase de queima da mistura, quase todo o  $\text{O}_2$  é convertido em  $\text{H}_2\text{O}$ . Quando a mistura entra na região de diluição e a queima acaba, a transformação de  $\text{O}_2$  em  $\text{H}_2\text{O}$  é cortada, e suas quantidades absolutas ficam estáveis. As frações molares sofrem variações devido a entrada de mais ar limpo, que contém  $\text{O}_2$  e  $\text{N}_2$ .



Durante as reações químicas que ocorrem na queima do  $\text{CH}_4$ , aquelas responsáveis pela formação do radical  $\text{OH}$  são consideradas importantes reações intermediárias pois o  $\text{OH}$  participa de inúmeras reações elementares fundamentais tanto para a emissão de poluentes como na liberação de calor de combustão, por exemplo, na produção de  $\text{H}_2\text{O}$ . Portanto a quantidade de  $\text{OH}$  indica, indiretamente, quanto da reação ainda está por acontecer e as potencialidades para a formação de poluentes.

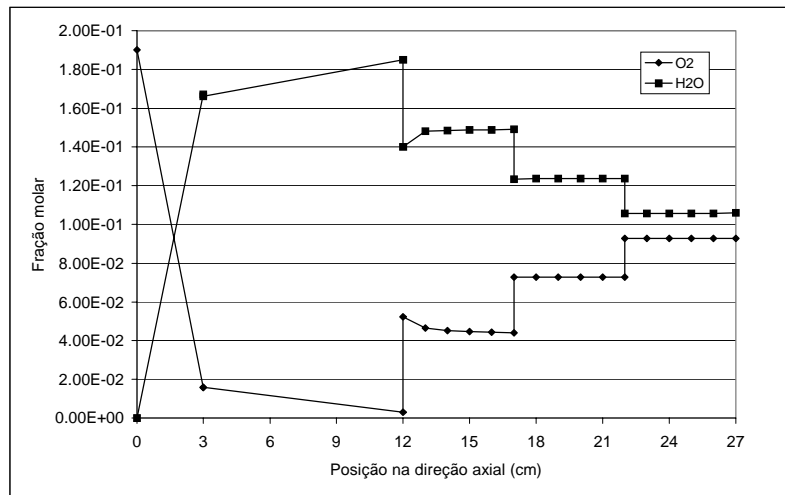


Figura 5 – Distribuição de  $\text{O}_2$  e  $\text{H}_2\text{O}$  ao longo da câmara de combustão.

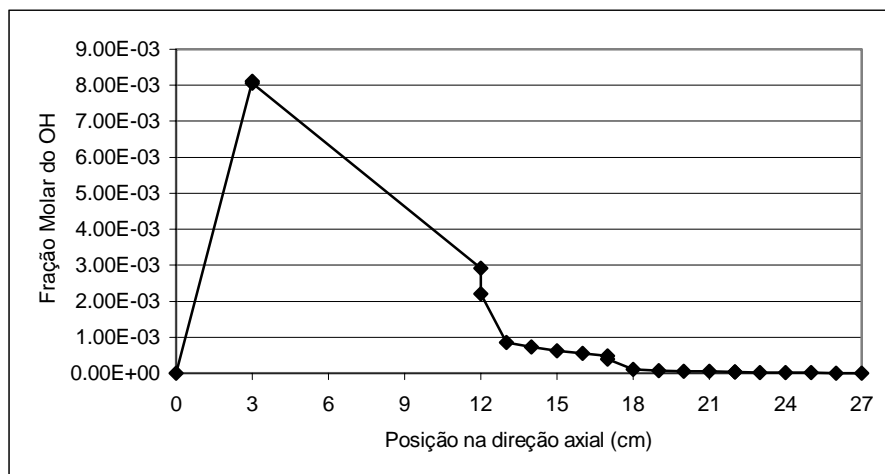


Figura 6 – Distribuição de  $\text{OH}$  ao longo da câmara de combustão.

## 5. CONCLUSÕES

A utilização de programas computacionais nos permitiu analisar os fenômenos que ocorrem no interior da câmara de combustão, de modo a ajudar a determinar o comprimento ideal desta, assim como a melhor posição dos furos responsáveis pela entrada do ar secundário e conseqüente diluição dos produtos da combustão. Isto economizou tempo e material durante a fabricação do modelo (protótipo), que resultou numa câmara de combustão

que já foi construída, e está agora em processo de otimização. A câmara de combustão projetada foi testada em fevereiro último numa bancada de teste do Laboratório de Combustão e Propulsão do Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais e mostrou-se estável em diversas vazões. O comprimento de chama permaneceu dentro dos limites traçados pelas simulações apresentadas neste trabalho. No momento o sistema está sendo integrado e a unidade completa operará em, no máximo, 20 dias.

## 6. REFERÊNCIAS

- ESTOP & MCCONKEY, “Applied Thermodynamics for Engineering Technologists, Logman Group, London, 1993 Fifth Edition.
- GRI-Mech Version 3.0, 1999, [http://www.me.berkeley.edu/gri\\_mech/](http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/).
- INCROPERA, F.P. & WITT, D.P., 1992, Fundamentos de Transferência de Calor e de Massa, – LTC.
- LAWN, C.J., 1987, Principles of Combustion Engineering for Boilers, Academic Press.
- LEE, JOHN F., “ Theory and Design of Steam and Gas Turbines “, McGraw-Hill Book Company 1954
- Muniz, W.F., Couto, H.S., Ribeiro, G.L.S., e NETTO, D.B., 1997, Flame Holding Performance of Axial Swirlers” – 5<sup>th</sup> Asian Pacific International Symposium on Combustion and Energy Utilization.
- PARNELL, Kronock & Simm, A “Chemical Reactor Model and its Application to a Practical Combustor”.
- SWITHEBANK, J., Poll, I., Vincent, M.W. and Wright, D.D., 1973, Combustion Design Fundamentals, 14<sup>th</sup> Symposium (International) on Combustion, pp. 627-638.
- URNS, S., 1993, An Introduction to Combustion – Concepts and Applications, Mc-Graw Hill Inc., USA.