

## Thermal Performance of Nuclear Fuel Rods with a Jacobian Elliptic Cross Sectional Form

**De Aguiar, João B.**

Sistemas Mecânicos, Escola Politécnica, USP  
Av. Prof. Mello Moraes, 2231, São Paulo, SP, 05508-900

[jbaguiar@usp.br](mailto:jbaguiar@usp.br)

**Tu, Carlos C.C., Abe, Luciano**

Sistemas Mecânicos Escola Politécnica, USP

[carlcctu@usp.br](mailto:carlcctu@usp.br); [Luciano.abe@poli.usp.br](mailto:Luciano.abe@poli.usp.br)

*Abstract. Boiling water reactors, BWR, commercially use fuel rods with a circular cross section. Set the operational conditions as well as the distribution of these rods, a specific power is established. Changing this form while conserving the cross sectional area may deliver a better performance. This fact is investigated here for a family of elliptic forms, in a thermal sense, using the finite element method. Two limiting values are considered: the melting temperature of the fuel and the critical flux rate. For 2d models, gains of the order of twenty percent in performance are estimated. It is also perceived the advantage of this alteration in other form of reactor, and discussed means of addressing other aspects of the problem.*

*Keywords: elliptic fuel rod; temperature field; power performance, finite element*

### 1. Presentation

Commercial nuclear reactors use fuel rods of uranium oxide,  $UO_2$ , of circular cross section, followed by a gap filled with nuclear combustion gases, helium mostly, and protected by cladding material, responsible for the final heat exchange with the cooling fluid, the water. These rods are distributed in many bundles, arranged in a regular form, inside the core of the reactor. Once initiated the nuclear activity in the reactor, water in liquid phase enters at prescribed temperature and pressure, flows along the length of the rods, leaving in a boiling state (Glasstone & Sesonski, 1994) Maximum temperature position in each rod, as well as heat flow lines set the field for circular rods. And consequently its specific power capacity. However in peak demand it is important to be able to get some additional power output, reason why a different form of cross sectional geometry for the rods, hence with different thermal fields, is devised.

Here a family of forms is proposed, having the same cross sectional area of commercial circular rods. Finite element modeling is used to obtain the temperature and heat flux field, in a two-dimensional case, observing the same physical restrictions of maximum temperature and critical heat flux, section 2. Under the typical operating conditions of a BWR, section 3, the physical limits are evaluated and the numerical procedure discussed. Results are presented in section 4 for diverse forms and, in particular, the circular form is checked, for the accuracy of the discretized solution. Analytical results for this case are also restated. Characteristics of better forms are analyzed then.

### 2. Model

#### 2.1 Geometry

Proposed new format for the transversal sectional forms of the fuel rods, Fig. 1, will derive from a family of curves defined from elliptic jacobian functions (Milne-Thomson, L.M.,1950) resultant from the transform:

$$\bar{z} = a \operatorname{cn}(w); \quad \bar{z} = x - iy \quad w = u + iv \quad (1)$$

between the w-plane and the z-plane. From the addition formula of the  $\operatorname{cn}$  function, geometric locus in the  $\langle x, y \rangle$  plane for every equipotential  $v = v_0$  value at different settings of parameter  $m$ , is:

$$\begin{aligned}
 x &= a \frac{cn(u/m)cn(v/1-m)}{cn^2(v/1-m) + msn^2(u/m)sn^2(v/1-m)} \\
 y &= a \frac{sn(u/m)dn(u/m)sn(v/1-m)dn(v/1-m)}{cn^2(v/1-m) + msn^2(u/m)sn^2(v/1-m)}
 \end{aligned}
 \tag{2}$$

where the elliptic functions *cn* and *dn* :

$$\begin{aligned}
 cn(u, v/m) &= \sqrt[2]{1 - sn^2(u, v/m)} \\
 dn(u, v/m) &= \sqrt[2]{1 - msn^2(u, v/m)}
 \end{aligned}
 \tag{3}$$

derive, for every *u* or *v*, at each value of *m* from the *sn* function, defined according to the integral:

$$sn^{-1}(u, v/m) = \int_0^{u,v} \frac{dt}{\sqrt{(1-t^2)(1-mt^2)}}
 \tag{4}$$

This function is known as Jacobian elliptic function. It is a Legendre elliptic integral of the first kind.

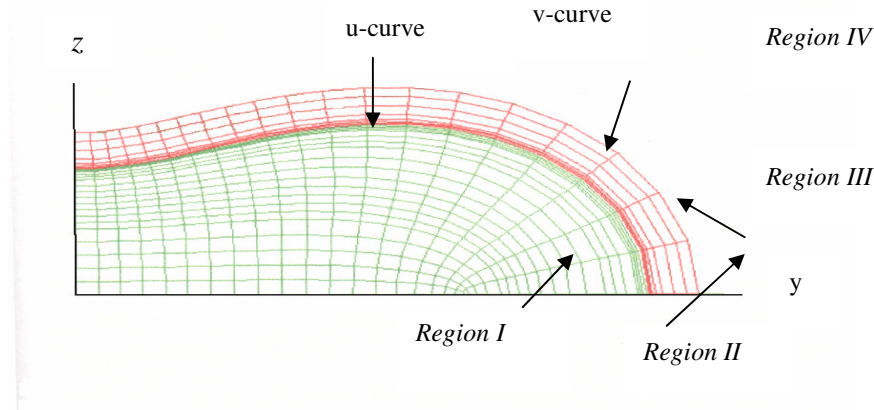


Fig. 1 Element of the family of new forms showing the diverse regions of the problem

A part this geometric form, the common circular rod of radius *a* :

$$\langle x, y \rangle / y = \sqrt{a^2 - x^2}
 \tag{5}$$

that can also be represented in integral form from  $y = \int_0^x \frac{-t}{\sqrt{a^2 - t^2}} dt$ , in the first quadrant, will be used as a comparison form for evaluation of the new format.

## 2.2 Energy Equation

Local rate form of the energy equation relates the rate of variation of the internal energy to the rate of external work and heat exchange:

$$\rho \dot{\mu} = -\boldsymbol{\sigma} : \mathbf{D} + \text{Div} \mathbf{q} + q_b; \quad \text{Div} = \text{Grad} \cdot \quad (6)$$

Here the internal energy per unit volume  $\mu$  is a function of the point and temperature  $\theta$   $\mu = \hat{\mu}(\cdot, \theta)$ ,  $\rho$  stands for the mass density,  $\mathbf{q}$  is the heat flux vector, supposed independent of strains or displacements,  $\mathbf{q} = \hat{\mathbf{q}}(\cdot, \theta)$  and  $q_b$  represents the internal heat generation rate, obtained from the solution of the neutron diffusion problem, (Winterton, R.H.S.,1981)

For the plane problem, unit thickness, under permanent conditions while disregarding coupling caused by the work term  $\boldsymbol{\sigma} : \mathbf{D}$ , being  $\boldsymbol{\sigma}$  the stresses and  $\mathbf{D}$  the deformation gradient rate, in integral form:

$$\int_S \mathbf{q} \cdot \mathbf{n} dA + \int_V q_b dV = 0 \quad (7)$$

Here latent heat effects and phase changes are disregarded. Surfaces  $S$  include temperature specified surfaces  $S_\theta$  as well as flux specified surfaces  $S_q$ .

As a general arrangement, fuel rods comprise an inner region, region 1, surrounded by an almost empty space, region 2, followed by a protection cladding, region 3, in contact with the cooling fluid, region 4. Fuel rod is made up of uranium oxide,  $UO_2$ , material 1, which is separated from the protection material, in our case Zircaloy, material 3, by means of gases resulting from nuclear reactions. These gases are mostly helium but also criptonium and xenonium, depending on the reactor considered, occur, material 2. For the first body, symmetry boundary conditions as well as continuity in the first interface impose that:

$$\begin{aligned} \mathbf{q} &= \mathbf{0}; \quad 0 \leq y \leq_1 y \quad \wedge \quad 0 \leq z \leq_1 z \\ \mathbf{k} \cdot \frac{\partial \theta}{\partial \mathbf{n}} &= {}_1 q_2^n \quad \text{on} \quad {}_1 S_2 \end{aligned} \quad (8)$$

being  $\mathbf{k} = \hat{\mathbf{k}}(\theta)$  the matrix of thermal conductivity, term of Fourier's law. In the intermediate sector, as passage region, net flow is null:

$$\begin{aligned} \int_{{}_1 S_2 + {}_2 S_3} \mathbf{q} \cdot \mathbf{n} dA &= 0; \\ \mathbf{q} &= \mathbf{0}; \quad {}_1 y \leq y \leq_2 y \quad \wedge \quad {}_1 z \leq z \leq_2 z \end{aligned} \quad (9)$$

where the horizontal  $y$  and vertical  $z$  limits for the  $S_{q=0}$  surface, symmetry, have been established.

As there is no generation in the outer region,  $\int_{{}_2 S_3 + {}_3 S_4} \mathbf{q} \cdot \mathbf{n} dA = 0$  and  $\mathbf{q} = \mathbf{0}$  for  ${}_2 y \leq y \leq_3 y \quad \wedge \quad {}_2 z \leq z \leq_3 z$ .

For the outer interface,  ${}_3 \mathbf{k} \cdot \frac{\partial \theta}{\partial \mathbf{n}} = {}_3 q_4^n$  on  ${}_3 S_4$  where  ${}_3 q_4^n = q_t + q_c + q_r$  being:

$$\begin{aligned} q_t &= -\mathbf{k} \cdot \text{Grad} \theta; \quad \text{Grad} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{X}}; \quad \mathbf{X}^T = [X, Y, Z] \\ q_r &= A(\theta^4 - \theta_r^4) = r(\theta - \theta_\infty^r) \\ q_c &= h(\theta - \theta_\infty^c) \end{aligned} \quad (10)$$

Of the diverse components of heat transfer, thermal conductivity  $q_t$  dominates, mostly in the core region. It is function of the conductivity matrix  $\mathbf{k}$ , supposed isotropic and dependent upon temperature. It is followed

in importance, by the convection heat transfer  $q_c$  for the interaction with the refrigerant, function of the conduction coefficient  $h_c$  and reference temperature in the fluid cell  $\theta_\infty^c$ . Also the radiation component  $q_r$  appears, which involves direction and form coefficient  $A$  in addition to the reference temperature  $\theta_\infty^r$ .

### 2.3 Principle of Virtual Temperatures

The principle of virtual temperatures (Bathe, K.J.,1995), which is a variational statement of energy balance, may be obtained directly by the standard Galerkin approach. Applied to the problem at hand, entails us to write:

$$\int_V Grad \delta \theta \cdot \mathbf{q} dV - \int_V \delta \theta q_b dV = \int_S \delta \theta \mathbf{q} \cdot \hat{\mathbf{n}} dS = 0 \quad (11)$$

where  $\delta \theta$  is an arbitrary variational field satisfying the essential boundary conditions. In order to solve for the  $\theta$  field, the body is approximated geometrically with finite elements, so that the temperature is interpolated as:

$$\theta = \mathbf{N}^N \boldsymbol{\theta}^N \quad (12)$$

being  $\boldsymbol{\theta}^N$  the nodal temperatures. The Galerkin approach assumes that the variational field is interpolated by the same function. With these interpolations, the variational statement produces the system of equations:

$$\begin{aligned} \mathbf{F}^N &= \mathbf{0} \\ \mathbf{F}^N &= \int_S \mathbf{N}^N \cdot \mathbf{q} dS - \int_V Grad \mathbf{N}^N \cdot \mathbf{q} dV - \int_V \mathbf{N}^N q_b dV \end{aligned} \quad (13)$$

that can be solved for the nodal temperatures, if a Newton type of solutions is employed. Allowing for the diverse surface forms of heat transfer, Eq. (10), it leads to:

$$(\mathbf{K}_t + \mathbf{K}_c + \mathbf{K}_r) \boldsymbol{\theta} = \mathbf{Q}_b + \mathbf{Q}_r + \mathbf{Q}_c \quad (14)$$

where the matrices of conduction, convection and radiation are defined as:

$$\begin{aligned} \mathbf{K}_t &= \int_V \mathbf{B}^{N^T} \mathbf{k} \mathbf{B}^N dV; \quad \mathbf{B} = Grad \mathbf{N}^N; \quad V = V_1 + V_2 + V_3 \\ \mathbf{K}_c &= \int_{S^c} \mathbf{N}^N \mathbf{h} \mathbf{N}^N dS; \quad S^c = S_1 + S_2 + S_3 + S_4 \\ \mathbf{K}_r &= \int_{S^r} \mathbf{N}^N \mathbf{r} \mathbf{N}^N dS \end{aligned} \quad (15)$$

with no conductivity contact surface. The source terms are:

$$\mathbf{Q}_c = \int_{S^c} \mathbf{N}^N \mathbf{h} \theta_\infty^c dS \quad (16a)$$

$$\mathbf{Q}_r = \int_{S^r} \mathbf{N}^N r \theta_\infty^r dS \quad (16b)$$

$$\mathbf{Q}_b = \int_V \mathbf{N}^N q_b dV \quad (16c)$$

where  $S^c$ ,  $S^r$  are convection and radiation surfaces. Furthermore, with diverse bodies, boundary and continuity conditions, will add the corresponding matrices in Eq. (14).

## 2.4 Physical Limits

In order to determine the real temperature field, Eq. (14), in the discretized problem, the free parameter  $q_b$  has to be set at every iteration of the solution process. Two physical limits have to be observed however. The first relates to an upper value of the temperature field,  $\theta_u = \theta_{melting}$  of the core material. The other is related to the maximum allowable heat flow rate  $q_4^n$ , the critical flow rate to the surrounding water,  $q_{critical}$ .

## 3. Model Parameters

### 3.1 Input Values

A series of geometric forms were considered in the analysis. Forms depend upon the pair of parameters  $\nu$  and  $m$ . For both the set of values  $\langle 0.2; 0.4; 0.5; 0.6; 0.7; 0.8 \rangle$  was taken in a one-to-one combination. In every case the same cross sectional area of the circular element,  $D = 11.4 \text{ mm}$ ;  $A = \pi D^2/4$  was imposed. Once set the cross sectional form of the fuel element, a gap  $f$  of values in the interval  $0.25 \leq f \leq 0.73 \text{ mm}$  was taken. External cladding, following the same contour had value  $c = 0.81 \text{ mm}$ . In some constructions no gap was considered. In others an external protection layer wasn't present as well.

Some thermal material properties are shown in table 1, for the representative values in the range encountered in the problem. In particular the coefficient of conductivity of the fuel, assumed isotropic, depends on temperatures. For it an approximate relation for the dependency in  $\text{W/cm}^0\text{C}$  is:

$$k(\theta) = \frac{40.4}{464 + \theta} + 0.132e - 03 \exp(0.00188\theta); \quad ^0\text{C} \quad (17)$$

Table 1 Some physical properties of the materials

	$\rho \text{ [kg/mm}^3\text{]}$	$k_t \text{ [W/mm}^0\text{C]}$	$C_p \text{ [mJ/kg}^0\text{K]}$
Uranium oxide	10.980e-06	2.60e-03	0.31
Helium	0.0973e-09	0.211e-03	5.20
Zircaloy	6.5600e-06	16.5e-03	0.33

Coefficients of convection in the outer interface also depend upon local temperature. A range of variation exists,  $4.0e - 03 \leq h_c \leq 6.0e - 03 \text{ W}^0\text{K}$  in the interval  $285 \leq \theta_c \leq 350 \text{ }^0\text{C}$ .

### 3.2 Numerical Scheme

In order to apply the linear thermal procedure associated with the finite element discretization, a Newton-Raphson scheme for the iterations has to be devised. For every value of the free parameter  $q_b^{(n)}$ , corresponding to iteration  $n$ , and fixed the solid-fluid interaction parameters, a temperature field  $\theta^{(n)}$  may be obtained. For this solution however, in general, there is an unbalance of the vector  $\mathbf{F}^{(n)}$ , Eq. (13), that has to be dealt with. If it is assumed that in the next iteration, an increment of the heat generation rate  $\Delta q_b$  will be set so as to clear this unbalance,  $\mathbf{F}^{n+1} = \mathbf{0}$ , then:

$$\Delta q_b = - \left\langle \frac{\mathbf{F}}{\partial_{q_b} \mathbf{F}} \right\rangle_n \quad (17)$$

in a forward fashion. Evidently this increment, and the solution derived from it, has to satisfy the physical limits imposed to the problem. Moreover, as a one term expansion only is under consideration, care must be taken in the setting of an error value, for closure of the procedure. The initial trial point may be taken directly from the solution of the circular rod case. This has been conducted, in general, to a few iterations.

The iterative scheme to be employed may be best described from the incremental form of Eq. (13):

$$\partial \mathbf{F} = \int_S \mathbf{N}^N \cdot \partial \mathbf{q} dS - \int_V \text{Grad} \mathbf{N}^N \cdot \partial [\mathbf{k} \frac{\partial \theta}{\partial \mathbf{X}}] dV - \int_V \mathbf{N}^N \partial q_b dV \quad (18)$$

where:

$$\partial \mathbf{q} = \partial \mathbf{k} \frac{\partial \theta}{\partial \mathbf{X}} + \mathbf{k} \frac{\partial}{\partial \mathbf{X}} \partial \theta + \partial q_c \mathbf{n}_c + \partial q_r \mathbf{n}_r \quad (19)$$

being  $\mathbf{n}_c$  and  $\mathbf{n}_r$  normal unit vector in the  $S_c$  and  $S_r$  partitions of the heat transfer  $S$  surface. Introducing Taylor expansions to the first order of the expressions above, in a Euler forward manner, the incremented form of  $\mathbf{F}$  will be such that:

$$\begin{aligned} lhs &= \int_V \mathbf{B}^T \cdot \mathbf{k} \frac{\partial}{\partial \mathbf{X}} \partial \theta dV + \int_{S_c} \mathbf{N}^N h \partial \theta dS + \int_{S_r} \mathbf{N}^N r \partial \theta dS \\ rhs &= \int_{S_c} \mathbf{N}^N h [(\theta_c + \partial \theta_c) - \theta] dS + \int_{S_r} \mathbf{N}^N r [(\theta_r + \partial \theta_r) - \theta_r] dS + \int_V \mathbf{N}^N [q_b + \partial q_b] dV + \int_V \mathbf{B} \cdot \mathbf{k} \frac{\partial \theta}{\partial \mathbf{X}} dV \end{aligned} \quad (20)$$

where  $lhs = rhs$ . Referring the known quantities to iteration  $i$ , and the unknown quantities to iteration  $i + 1$ , Eq. (20) can be rewritten as:

$$[\mathbf{K}_i^r + \mathbf{K}_c^i + \mathbf{K}_r^i] \partial \theta + [\mathbf{K}_c^i + \mathbf{K}_r^i] \theta^i = \mathbf{Q}_b^{i+1} + \mathbf{K}_c^i \theta_c^{i+1} + \mathbf{K}_r^{i+1} \theta_r^{i+1} \quad (21)$$

where  $\theta_c^{i+1}$  and  $\theta_r^{i+1}$  are the updated external convection/radiation fields.  $\mathbf{Q}_b^{i+1}$  refers to the incremented body generation heat vector.

### 3.3 Physical Limits

Determination of the critical heat flux rate at the outer surface of the fuel rod requires coupling to the water flow problem, or use of some experimental formula. Though developed for BWR reactors and circular rods, Biasi formula may be used for the present case:

$$q_{crit} = 15.048e+7(100D)^{-n} G^{-0.6} H(1-x) \quad (22)$$

where:

$$H = -1.159 + 0.149p \exp(-0.019p) + 9p/(10 + p^2) \quad (23)$$

for pressures  $p$  expressed in bars, and fraction:

$$x = \frac{q_{crit}}{\dot{m}h_{fg}} - \frac{\Delta h_{sub}}{h_{fg}} \quad (24)$$

with  $\Delta h_{fg} = 0.398e+06$  J/kg and  $h_{fg} = 1.51e+06$  J/kg. Typical reactor conditions were assumed:  $p = 70$  bar;  $\theta_{in} = 204$  °C,  $G = 2.e+03$  kg/m<sup>2</sup>s. A rectangular arrangement of the bundle of rods supposes a center to center distance  $l = 18.82$  mm, used in finding the hydraulic diameter to be used above. Rods had an height of 3.2 m, Fig. 2.

The other limit, the melting point of the fuel rod, set at  $\theta_{melting} = 2800$  °C. In the model running, temperature at the surface of the cladding shell was fixed at  $\theta_4^s = 300$  °C.

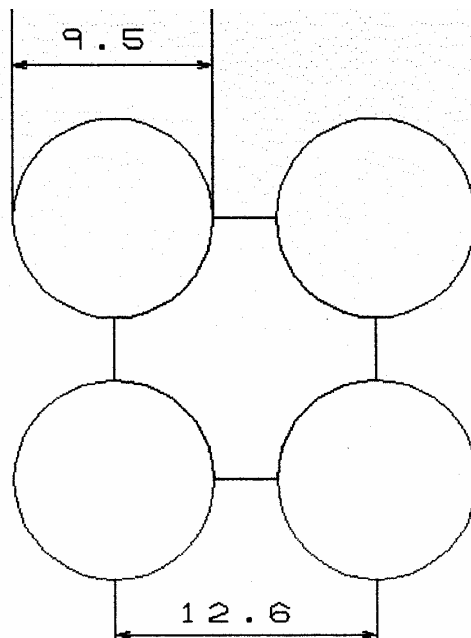


Fig.2 Typical cell distribution of fuel rods

## 4 Results

### 4.1 General Response

Implementation of the above scheme of solution for the different sectional forms led to a series of temperature and flux fields. Discretization involved different elements and densities, according to the region, and some times added to more than a thousand elements. Maximum temperature and critical heat flow limits have been used in determining the solutions.

In Figs. 2 and 3, as an example, temperature and heat flux fields in the case of the elliptic form characterized by the  $\langle 0.7; 0.5 \rangle$  pair is shown. In it surface temperature at the outer cladding is fixed.. Maximum temperature obtained, in the core region, is close to the maximum allowable,  $\theta_u = 2800^0 C$ , and appears in the central region of the rod. Many times maximum temperature will not occur at the origin. Moreover, flux values vary along the outer surface of the cladding, being larger in the points of the surface closer to the center of the rod.

As the response of the rod should change, if the slice being taken is changed along the length of the rod, because the internal heat generation rate, as well as the heat transfer limit, the most critical combination was considered. Position of maximum heat generation, in general occurs at middle length of the rod. Heat flow to the water, initially in liquid state, changes along the length of the rod, passing to a two phase flow and a final boiling condition. Convection coefficient, as such, changes as well. Formally this coefficient could be obtained experimentally and numerically. In the last case a fluid flow analysis would have to be run, so as to generate the velocities gradients, in a 3D model. Therefore setting, in the 2D model, the external surface is an approximation. The chosen temperature compares well with simulations and measures reported in the literature, and was therefore used in some analysis. Moreover, critical heat flux limits, used for the new forms, in the same amount as in the case of the circular rod, is another sort of approximation, used as an initial estimate.

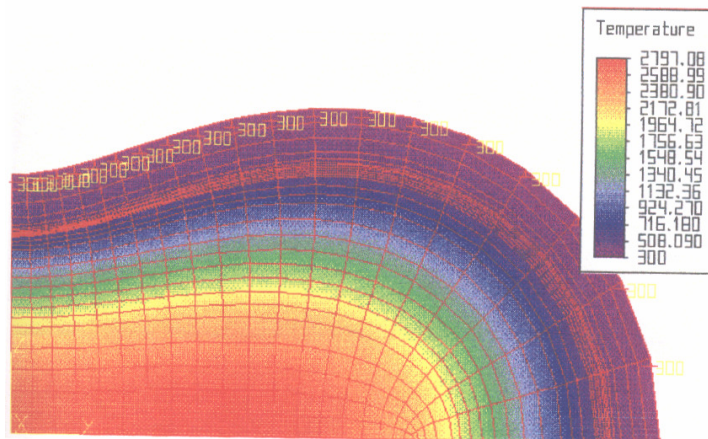


Fig. 2 Temperature distribution for the  $m = 0.7$  and  $\nu = 0.5$  format

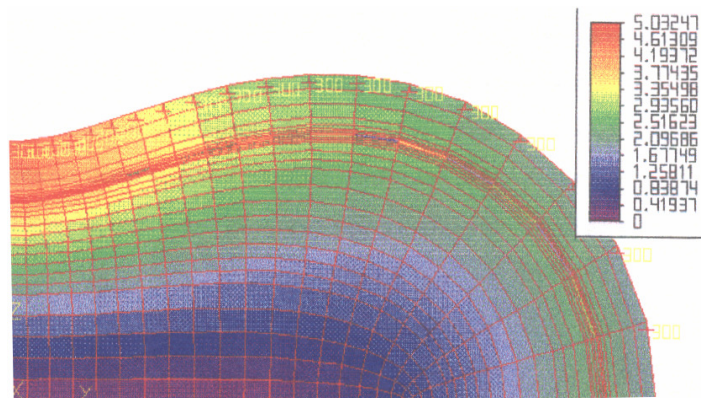


Fig. 3 Flux magnitude for the  $m = 0.7$  and  $\nu = 0.5$  format



## 4.2 Comparisons and Conclusions

The temperature field and the flux magnitude, as generated by the numerical procedure presented above, were compared to the results provided by the analysis of a known solution to this problem: the case of the circular rod. Local form of the energy equation, Eq. (6), in cylindrical coordinates, under permanent conduction conditions, gives:

$$\text{Div}(\mathbf{k}\cdot\nabla\theta) + q_b = 0 \quad (25)$$

or, considered the symmetry of the problem:

$$\frac{d^2\theta}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{d\theta}{dr} + \frac{q_b}{k_*} = 0 \quad (26)$$

whose solution is:

$$\varphi = \varphi_0 - \frac{q_b}{4\kappa_*} r^2; \quad \varphi = \frac{1}{\kappa_*} \int_{\theta_*}^{\theta} \kappa(\theta) d\theta; \quad \varphi = \hat{\varphi}(\theta) \quad 0 \leq r \leq R \quad (27)$$

where  $\theta_*$  is a reference temperature, possibly  $\theta^* = 0^\circ\text{C}$ , and  $\kappa_*$  is the corresponding core material conductivity. Values of the  $\varphi$  integral are tabulated results, (Tu. C.C., 1974).

For the gap region,  $R \leq r \leq R + f$ , a average conductivity may be assumed, so that continuity of heat flux makes  $-k_2 \frac{d\theta}{dr} \Big|_{R+f} = -\frac{q_b R}{2k_1 R}$  and therefore:

$$\theta(r) = \theta_R - \frac{q_b R^2}{2k_2} \ln \frac{r}{R}; \quad \theta_R = \theta_{1,s_2} \quad (28)$$

while for the cladding sector:

$$\theta(r) = \theta_{R+f} - \frac{q_b}{2k_3} R(R+f) \ln \frac{r}{R+f}; \quad \theta_{R+f} = \theta_{2,s_3} \quad (29)$$

Set a value for the temperature of the cladding-fluid interface,  $\theta_{3,s_4} = \theta_f$ , convection conditions will lead to

$$h_c = \frac{q_b R}{2(\theta_f - \theta_\infty)} \frac{R+f}{R+c+f} \text{ and a flux } q_f = q_b \frac{R}{2}$$

that may compared to the critical flux  $q_{cr}$  for the boiling water. Corresponding results obtained under more general conditions, is shown in Fig. 6 and Fig 7, using the finite element method.

A 3D model of this problem, including fluid flow would entail a verification of the thermal coefficients used in the analysis. Here experimental values were used, as the problem was treated as 2D. Complications were caused by the boiling effect ,that PWR reactors do not have. For them, the same kind of analysis would produce very much similar temperature and flux distribution, as shown ahead.

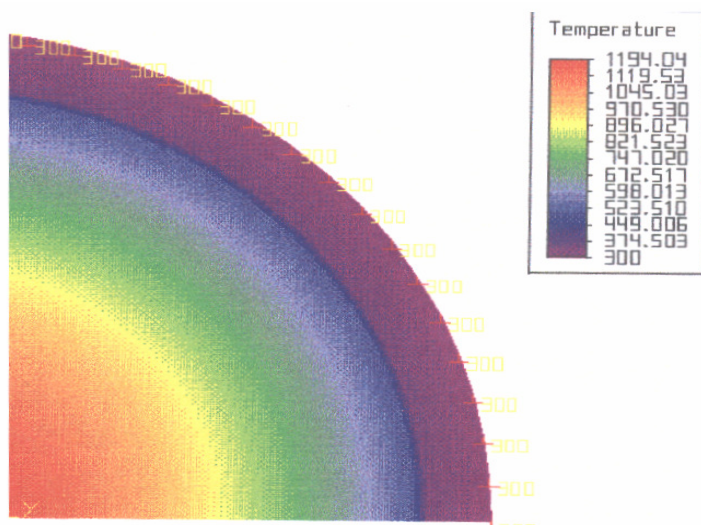


Fig. 6 Temperature distribution for the circular rod

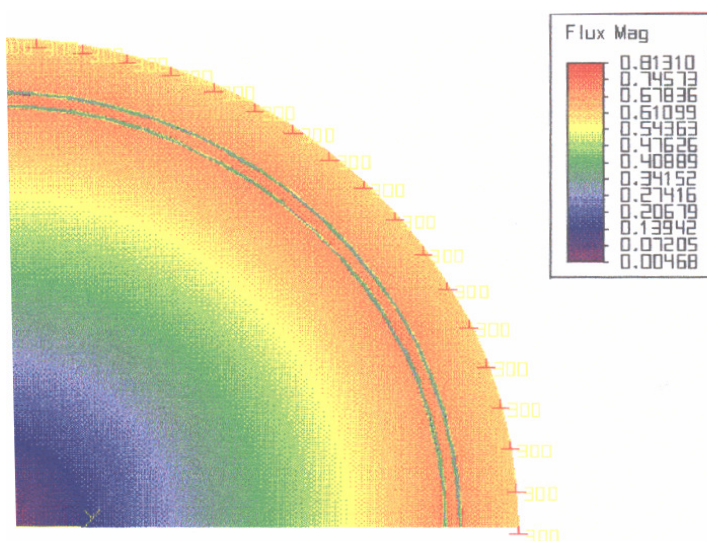


Fig. 7 Heat flux distribution for the circular rod

#### 4.2 Optimum Form

More than 30 elements of the family of formats proposed were analyzed in what says respect to the thermal performance. Sometimes there was improving of performance, sometimes not. Thinner formats, tending to the thin plate, showed better gains. Of all cases, in BWR reactors the one corresponding to the pair  $\langle 0.8; 0.2 \rangle$  represented the best gain. Maximum temperature was not always the limit. In this case this occurred.

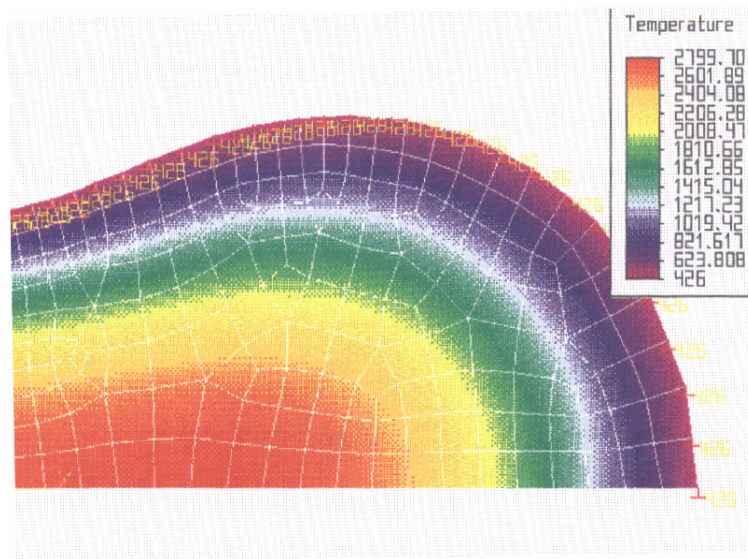


Fig. 7 Temperature distribution for the <0.6; 0.6> format

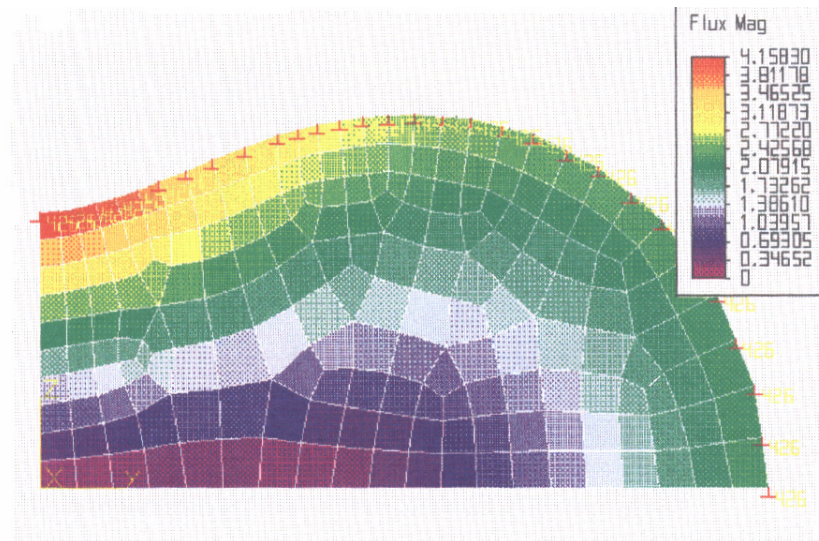


Fig. 8 Heat flux distribution for the <0.6; 0.6> format

## 5. Conclusions

Flux distribution along the outer surface of the family of new formats is never constant, even when temperatures are fixed. Critical flux points, in general occurred in the thinner regions. Once obtained this point performance was measured through the  $q_b$  value. However as only the local capacity of heat transfer is exploited, additional gains could be obtained if the full capacity, corresponding to the setting of this limit to the whole surface of the element, was attained. Also use of pressurized vessels, PWR, would improve gains as the critical flux values could be increased.

## 6. References

Glasstone & Sesonski, **Nuclear Reactor Engineering**, Chapman & Hall, 2<sup>nd</sup> ed., 1995

Cayley, A., **An Elementary Treatise on Elliptic Functions**, Dover Publications, New York, 2<sup>nd</sup> ed.. 1961

Bathe, Klaus Jürgen, **Finite Element Procedures in Engineering Analysis**, Prentice-Hall, 2<sup>nd</sup> ed. New Jersey, 1995

Winterton, R.H.S., **Thermal Design of Nuclear Reactors**, Pergamon Int., Oxford, England, 1981

Tu. C.C., **Estudo Preliminar sobre as Vantagens de uma Barra de Combustível com Seção Transversal Semelhante à de um Glóbulo Vermelho**, Dissertação de Mestrado, E.P., USP, 1974

# OPTIMIZATION OF NATURAL GAS MURAL FLAME BURNERS PERFORMANCE USING BLACK AND WHITE CCD CAMERA IMAGES

**Francisco Domingues Alves de Sousa**

Instituto de Pesquisas Tecnológicas do Estado de São Paulo – IPT  
Cidade Universitária, CEP 05508-901, São Paulo - SP  
fdasousa@ ipt.br

**Sandro da Silva Aguiar**

Braskem - Unidade de Vinílicos – Alagoas

**José Carlos Lourenço**

Braskem - Unidade de Vinílicos – Alagoas

*In this paper a real case study is presented in which three different burner sizes of mural flat flame type were optimized into a test bench, using a technique involving the measurement of boundary variables: gas and air mass flow rates, temperatures and pressures, flue gas composition and the wall radiant emerging power, this one determining the so called radiation zone efficiency. Radiant emerging power was measured from treated images of the wall obtained by CCD cameras, thus allowing to establish comparisons between its values for different operating conditions and finally to determine the optimal ones (those maximizing the emerging power corresponding to a fixed power released by the burner). Application of the adjustments obtained in the bench to the burners installed in two pyrolysis-furnaces, resulted a significant reduction in specific fuel consumption.*

***Mural flame burners, burner test, burner optimization, still furnace optimization, pyrolysis furnace optimization***

## 1. Introduction

During the last decades considerable amount of work has been applied to improve industrial processes efficiency, mostly on those that intensively use work and heat, frequently involving combustion equipment. The adopted measures has been: to improve equipment insulation, to tight the regulation of steam traps, to recuperate heat from processes streams early wasted, to reduce the air excess in combustion processes and so on. Even though, the industrial processes still remain very inefficient.

To follow obtaining efficiency improvements one needs to apply energy conservation measures that are no longer of quick insight, quantification and implementation. In a word, they require deeper analysis of the involved phenomena. This paper reports just one of these cases.

Still furnaces in refineries and petrochemical plants and large reheating furnaces in rolling sectors of steel plants are equipped with large number of inspirator burners (where gas jet drags the combustion air) that produce flat mural flames over surfaces of refractory walls which then transfer heat, mainly by radiation to the coils inside which the streams to be heated flow, or to the steel plates correspondingly.

Each furnace is frequently equipped with tenths of burners from two or three different sizes which renders their individual optimization, while installed, very difficult or even impossible. In these cases, establishment of adjustments that lead to the best performance must be carried out in an apparatus external to the furnace, in which each burner is installed rendering possible to measure the following parameters:

- Fuel gas mass flow rate, temperature and pressure
- Air mass flow rate, temperature and pressure (not possible to measure when the burner is installed in the real furnace)
- Radiative heat power leaving the refractory wall on which the burner is attached

Formerly it is important to emphasize what means to seek for an optimal operation condition. This optimization involves several aspects like:

- To fit the burner to the power range that it must release, in other words utilizing it within its operational limits. There are two important limits: the stoichiometric one, beyond which the gas jet does not aspirate enough air for completing the combustion reaction and the dynamic one, above which the flame blows-out. During experimental work, these limits were determined just at its beginnings.
- For a determined value of the released power, to increase or maximize the useful fraction (power transferred to the product's main stream)
- For the fuel being used, to reduce or minimize pollutant emission rates, choosing adequate air/fuel ratios.

The radiative power emerging from the wall, which determines the so called radiation zone efficiency can be measured from treated images of the wall obtained by CCD cameras, thus allowing to establish comparisons between its values for different operating conditions and finally the determination of the optimal ones (those maximizing the emerging power corresponding to a fixed power released by the burner).

## 2. Equipment description

Figure (1) shows one of the furnaces to which this methodology was applied. It is equipped with four rows of burners in each side of the radiation zone, totaling eighty burners. At its central plane, parallel to the sides that contain the burners, there is a coil built by 6 inches diameter tubes with 32 passages (horizontal tubes) inside which flows the fluid to be heated. The fluid, Ethylene-dichloride (EDC) enters de coil in the liquid phase, being successively evaporated, superheated and finally cracked, resulting the final product, Vinyl chlorine monomer (MVC).

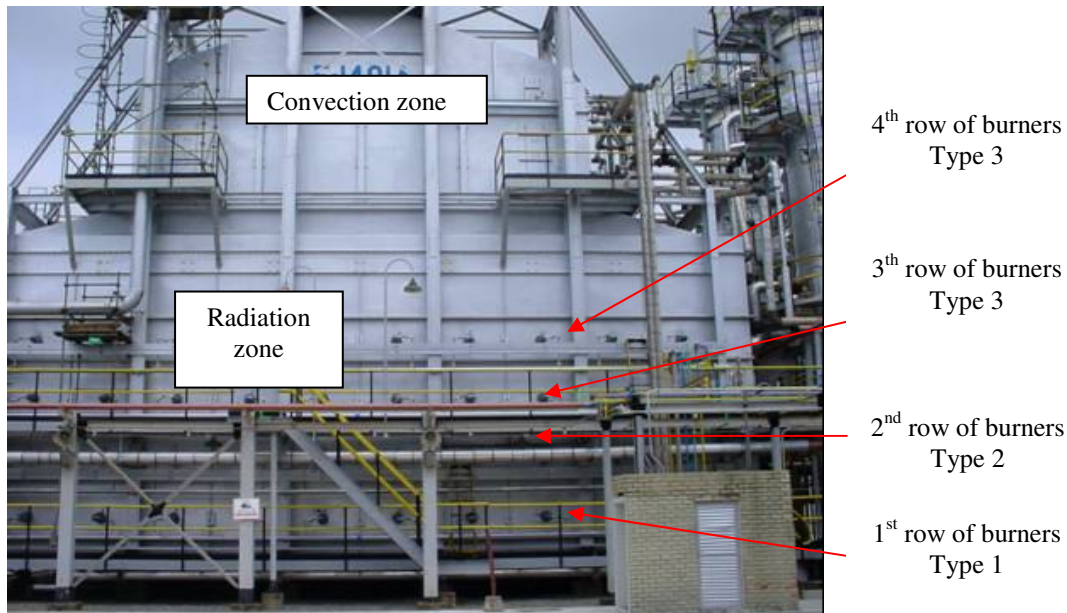


Figure 1 – Cracking furnace with four rows of burners

Figure (2) shows a schematic drawing of the burners and Fig. (3) shows schematically the several heat interactions among the furnace elements

In the present case it is fundamental to optimize  $Q_{RAD,WALL,COIL}$  (power exchanged by radiation between the furnace wall and the coil), maximizing  $Q_{RAD,FLAME,WALL}$  (power exchanged by radiation between the mural flame and the wall) and  $Q_{CONV,FLAME,WALL}$  (power exchanged by convection between the mural flame and the wall).

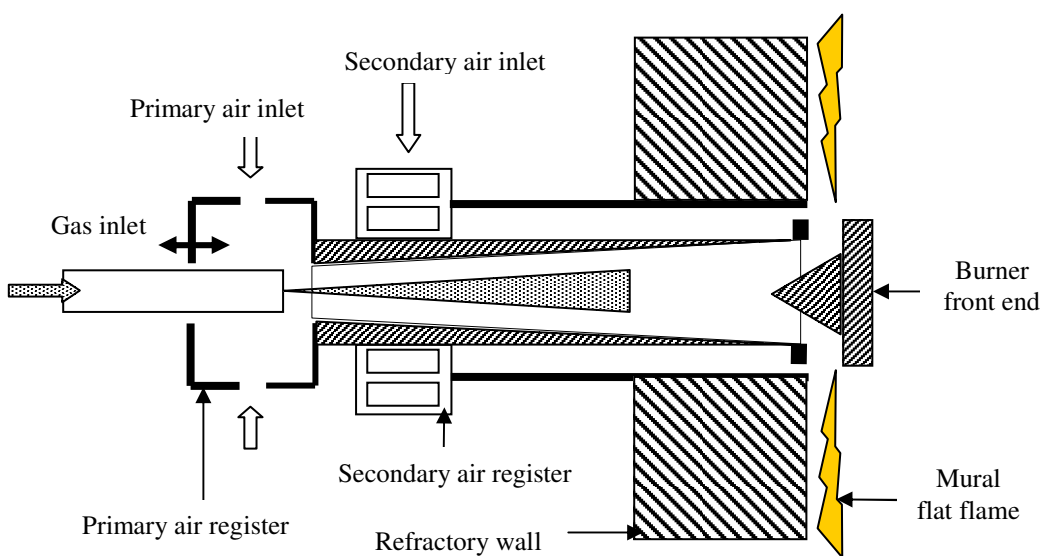


Figure 2 – Schematic drawing of the mural type burners

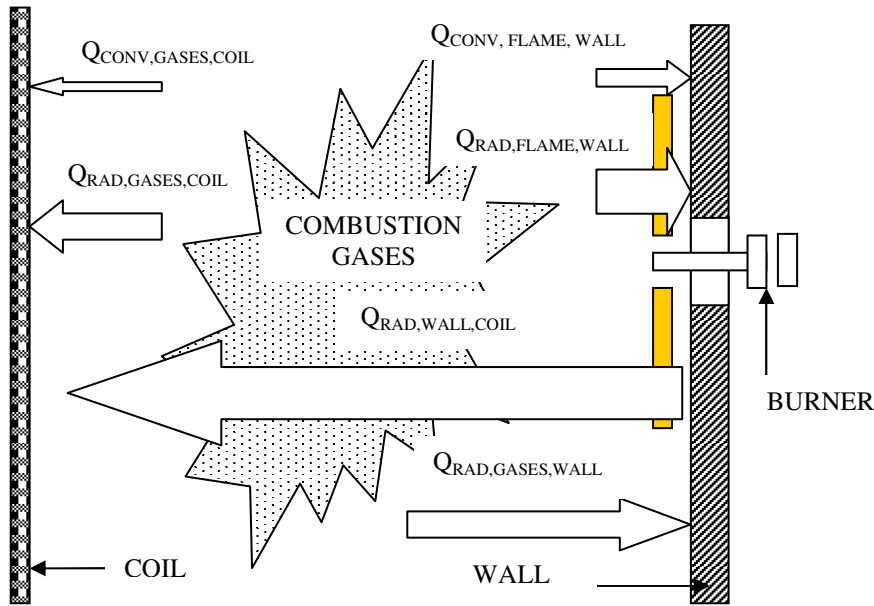


Figure 3 – Heat interactions among furnace elements

### 3. Laboratory apparatus used for carrying out the trials

#### 3.1. Primary air temperature, pressure and flow rate measurement

For getting information about the performance of each burner it is necessary to measure gas and air flow rates. The last one is practically impossible of being measured given the original configuration of the burners. For this a plenum was built around the air register, provided with a grate that regularizes air entrance across it. Air supplied by one blower passes through a measurement system composed by an orifice plate and pressure transducers before entering the plenum. A valve allows the flow rate adjustment, while maintaining the pressure inside the plenum at zero value to simulate the aspiration of atmospheric air that occurs in a real operation. Resuming, the blower is used only to overcome the pressure drop across the flow rate measurement device.

Figures (4) shows the plenum and the gas plus air supply and measurement system. Figure (5) A and B show the combustion chamber inside just after the burner lightning and at steady state respectively.

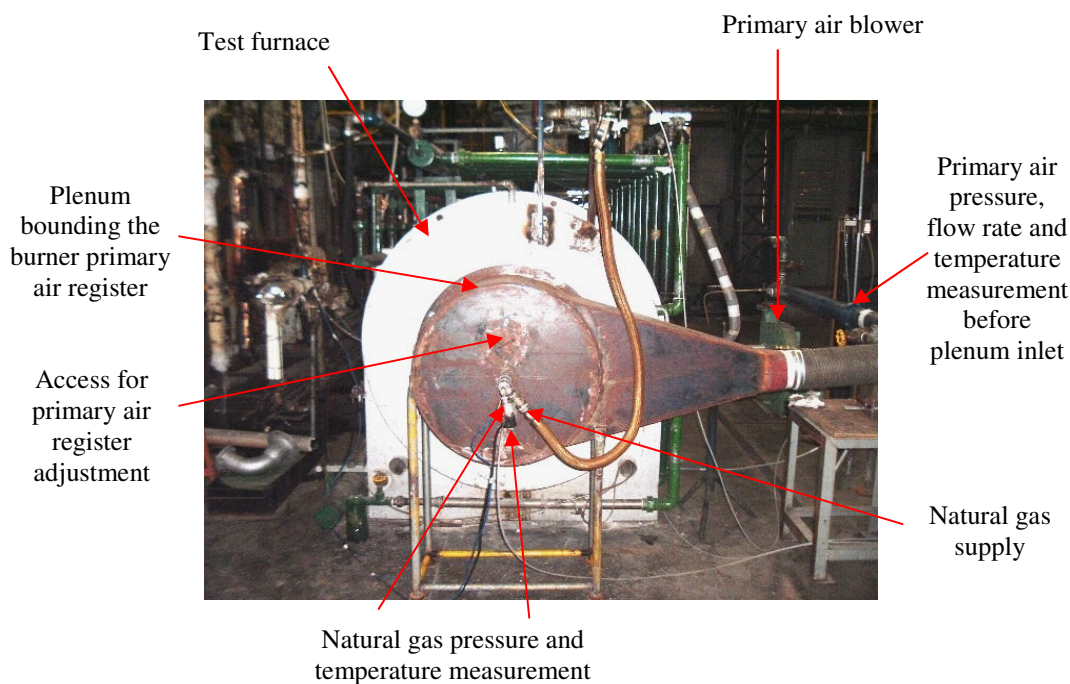


Figure 4 – Primary air and natural gas supplying and flow rate measurement

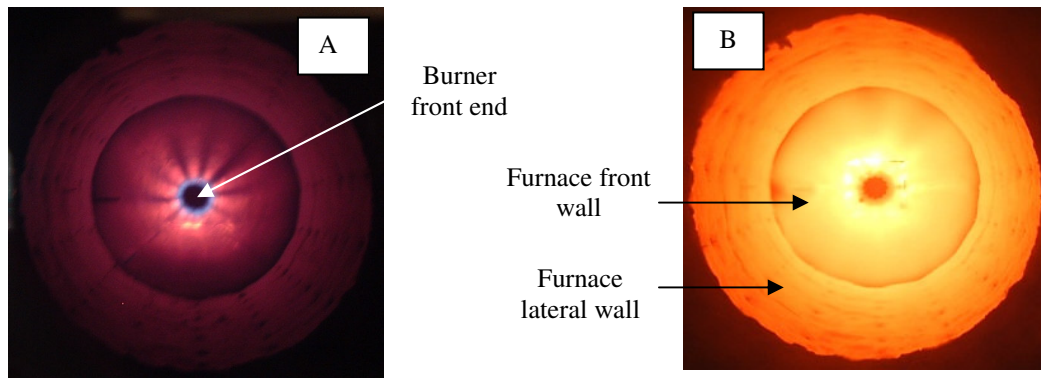


Figure 5 – Pictures of the combustion chamber inside

### 3.2. Measurement of radiative power emerging from the wall

The technique used in this work for measuring the power emerging from the wall over which the flame develops was the computerized inspection. The images were grabbed by a system composed of the following items:

a) An optical set composed by interference filter (900 nm), made by Corion; 12 mm lens with manual adjustments for focus and obturator , type H12-1.2, made by Rainbow and monochromatic CCD camera, type V-1070, made by Marshall. This set was lodged into a cooled device as shown in Fig. (6). The resulting set was mounted onto the rear part of the furnace flue gases channel, as shown in the right side of the same figure.

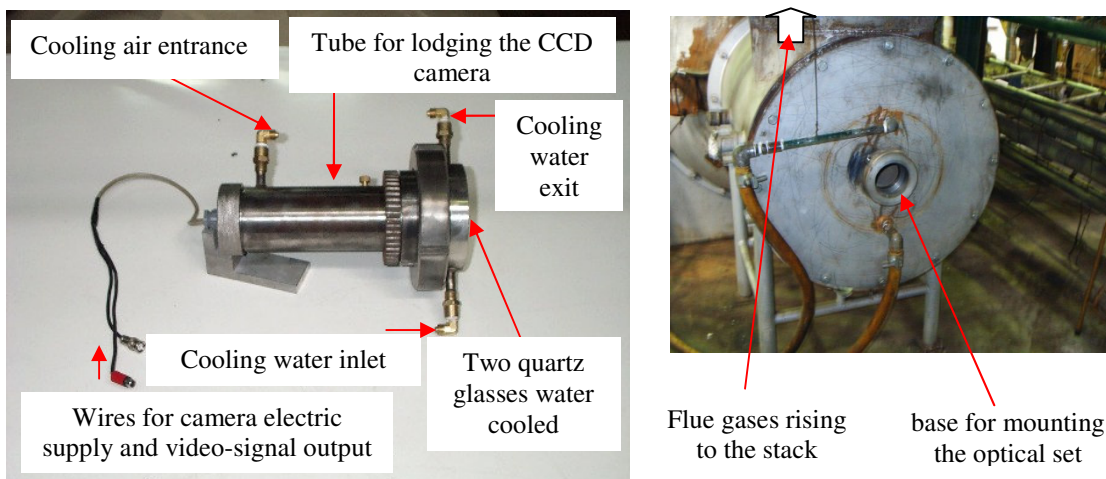


Figure 6 – Optical set mounted on the rear end of the flue gases channel

b) A set of wires for the camera electrical supply and for the signal conduction from it up to the acquisition board which was installed into the computer.

c) The frame acquisition and dispatching board, made by Coreco Imaging.

d) A computer program for automatic visual inspection, called SCIVA, developed by another IPT group, detailed described by Martins (2004), provided with a large tool menu for acquisition, storage in BITMAP file and treatment of images.

#### 3.2.1. Power measurement method validity

A question that certainly one can argue is: if the objective is to shoot images from the internal surface of the furnace front wall where the burner is installed but the optical set is located in the opposed end of the furnace, as shown in Fig. (6), the mural flame interposes between them. As the CO<sub>2</sub> and H<sub>2</sub>O (gases that absorb and emit radiation) contents in the flame region and in the resulting combustion gases volume are quite high, radiation intensities that strike the optical system may be different from those emerging from the wall thus the obtained images would not correspond to the real situation, being not comparable as well.

In the present case this is not a problem once both gases do not have emission/absorption bands for wave lengths below 1600 nm, as shown in Fig. (7) for CO<sub>2</sub>. For steam the lower band is located near the correspondent for CO<sub>2</sub> and the others are located at higher wave lengths. As the radiation crossing the interference filter has wave length close to 900 nm, only this radiation (not interventional with the combustion gases) strikes the camera sensor device (CCD). This fact validates the calculations presented in item 4.



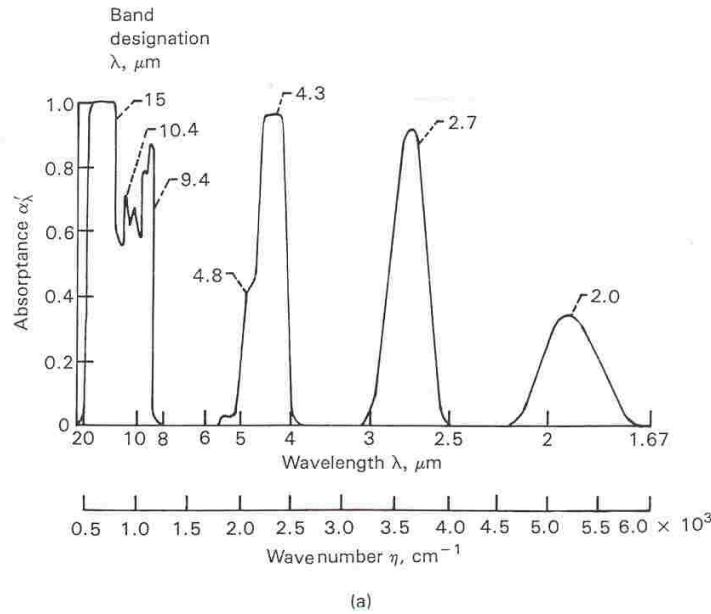


Figure 7 – Emission/absorption bands for CO<sub>2</sub> (Siegel & Howell 1992)

### 3.2.2. Image comparisons

The black and white images obtained correspond to a wave length narrow range around 900 nm and they have 256 gray tons from black (0) to white (255). Each one of these tons, called *threshold*, is proportional to the radiation intensity emerging from the corresponding point of the front wall internal surface, for the considered wave length. This assumption is detailed discussed by Dewitt and Nutter (1989).

It is important to notice that, inside the proportionality constant there are, among others, the effects by attenuation introduced by the interference filter, by the image grabbing time (lower the exposition time, lower is the power striking onto the CCD), by the opening area of the lens obturator (lower the opening lower is the power striking onto the CCD) and the effect of wall emissivity.

The grabbing time is inversely proportional to the acquisition frequency that can be: 60 s<sup>-1</sup>, 125, 250, 500, 1000, 2000, 4000 and 10000 s<sup>-1</sup>, depending on the shutter adjustment, for the camera used.

In this work all images were made with the higher frequency to avoid the saturation of large fraction areas in the images (these areas become completely white, despite their different temperatures, if lower frequencies are used). The obturator was adjusted in a previous experiment also to avoid the saturation.

Obviously the comparisons between images that will be done lately are only valid if the interference filter, the camera, the image acquisition frequency, the lens and the obturator adjustment are the same as well as the emissivity of the surface being observed. Each image is composed by 307200 pixels distributed into 480 rows and 640 columns, having a *threshold* comprised between the before mentioned limits.

### 4. Calculation procedure

Beforehand it is important to notice that this procedure is not a novelty; in fact a procedure, utilizing image acquisition equipment similar to the present one and part of the assumptions made here, was used by Huang (2000) for calculating the temperature distribution in flames inside a test furnace.

Each elemental area of the wall internal surface emits radiation for all directions of a semi-space, as shown schematically in Fig. (8).

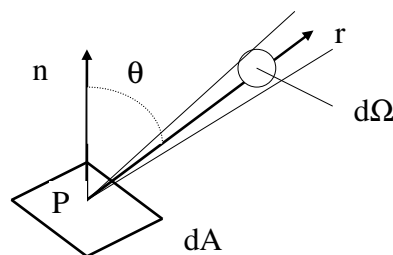


Figure 8 – Radiation emerging from an elemental area, around direction r

The power emerging from  $dA$ , inside the solid angle  $d\Omega$ , centered into the direction  $r$ , with vertex at the point  $P$ , with wave length  $\lambda$ , called  $d^2 q_\lambda$ , may be expressed as:

$$d^2 q_\lambda = I_{\lambda,r} * dA * \cos \theta * d\Omega \quad (1)$$

Thus the radiative power emerging from  $dA$  to all the directions of the semi-space may be calculated as:

$$dq_\lambda = \int_{\Omega=2\pi} I_{\lambda,r} * dA * \cos \theta * d\Omega \quad (2)$$

The radiative power emerging from an area at the wall surface is then:

$$q_\lambda = \int_A dq_\lambda \quad (3)$$

As long as some assumption is made about the  $I_{\lambda,r}$  directional variation the integral in Eq.(2) involves only geometry. If one admits that  $I_{\lambda,r}$  is constant for all directions (isotropic emission) then it can be took outside the integral and it is straight to conclude that  $dq_\lambda$  is proportional to  $I_{\lambda,r}$ .

Considering that the *threshold* of each pixel is proportional to  $I_{\lambda,r}$  of the corresponding point in the wall surface, one can conclude that the power emerging from each elemental area is proportional to its image's corresponding pixel. This conclusion will be extensively used when comparing the images obtained. Additionally the assumption that the wall internal surface is gray is equivalent to impose that the emerging radiation intensity from each of its points, at the wave length  $\lambda$  is proportional to the blackbody one at the same wave length.

$$I_\lambda = \epsilon * I_{\lambda,b} \quad (4)$$

Where  $I_\lambda$  is the emerging radiation intensity of the wall surface (with emissivity  $\epsilon$ ) and  $I_{\lambda,b}$  is the blackbody spectral intensity at the same temperature, expressed by the Planck equation.

$$I_{\lambda,b}(\lambda, T) = \frac{2 * C_1}{\lambda^5 * (e^{C_2/\lambda*T} - 1)} \quad (5)$$

Where

$C_1$  = first Planck constant ( $0,59552197*10^{-16}$  W.m<sup>2</sup>/sr)

$C_2$  = second Planck constant ( $0,01438769$  m\*K)

$\lambda$  = wave length [m]

$T$  = absolute temperature [K]

Thus the gray tons distribution also allows to immediately verifying the temperature distribution on the internal wall surface (contacting the mural flame). As closer to the white, the higher the *threshold*, the higher is the temperature of the corresponding region.

As long as this brief conceptual introduction is made one considers two typical images obtained during the burners hot tests. The interest is to compare both under two aspects: wall surface temperature uniformity and power emerging from them (at the wave length  $\lambda = 900$  nm)

Higher or lower temperature uniformity may be quantified by the application of a tool existing in the program SCIVA, called histogram.

The emerging power from a selected region in the wall, around the burner quarl can be quantified as described on the following, using two images corresponding to two different tests (means of 3600 instant images). Due to space limitations the procedure will be applied to two tests carried out with the type 2 burner for verifying the effect of the air excess on these emerging powers. Tests where numbered as 6B (air excess around 20%) and 6C (air excess around 5%). The mean global images are shown in Fig. (9).

These images show the inner surface of the flue gases channel and the lateral surface of the furnace. In fact, the interest for this work is to compare only the central circle corresponding to the wall in which the burner is mounted and whose front end appears as black (low temperature) in the center of the circle.

For this the program is provided by a tool that allows to separate a definite region, for instance by the squares (in white) in Fig. (9). The sub-images are shown in Fig. (10) (left sides).

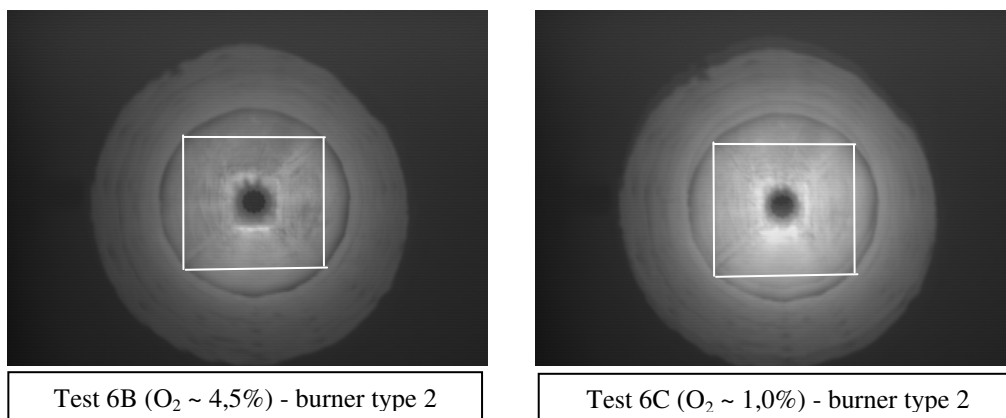


Figure 9 – Mean global images – Tests 6B and 6C – burner type 2

The inspection of these images allows the immediate conclusion that the wall temperature uniformity in the test 6C is slightly worse than that of the test 6B. This quality may be better expressed by the application of the histogram to these sub-images. Its horizontal axis refers to the *thresholds* and over the ordinate axis the heights are proportional to the number of pixels in that *threshold*. The histograms corresponding to those sub-images are shown in Fig. (11) (right).

The inspection of the histograms allows the conclusion that in the test 6C there exist regions on the wall emitting radiation in a broader range of intensities (the base of its histogram – threshold values - is larger) compared to the test 6B.

On the sub-images of Fig. (10) it can be applied another tool, existing into the program SCIVA, called THRESHOLDING. Briefly, given a definite threshold  $I$ , this tool applied to an image does the following: assigns value 0 (zero) to all the pixels which threshold is lower than  $I$  and value 255 to all the pixels which threshold is higher than  $I$ , generating thresholded images as shown in Fig. (11). These images are just an example, they do not correspond to those of Fig. (10).

For each thresholded image it is possible, using another tool from SCIVA, to calculate the white part area – set of pixels which threshold value is higher than that indicated in the label. For instance, referring to the threshold value  $I_1$  one can calculate the areas  $A_{LIM1}$  for both the tests 6B and 6C; for the threshold value  $I_2$  the process can be repeated and so on. For each initial sub-image one can calculate the difference ( $A_{LIM1} - A_{LIM2}$ ) which represents an area (part of the sub-image) corresponding to a emerging radiation intensity comprised between  $I_{1,\lambda}$  and  $I_{2,\lambda}$  (thresholds  $I_1$  e  $I_2$ ).

As was seen early, power emerging from the wall region corresponding to ( $A_{LIM1} - A_{LIM2}$ ) can be calculated as:

$$q_{(ALIM1-ALIM2)} = K * (A_{LIM1} - A_{LIM2}) * THRE_{MEAN,1-2} \quad (6)$$

Where  $THRE_{MEAN,1-2}$  is a mean value between  $I_1$  and  $I_2$  and  $K$  is the proportionality constant (see item 3.2.2). Eq. (6) is a discretized form of the Eq. (3).

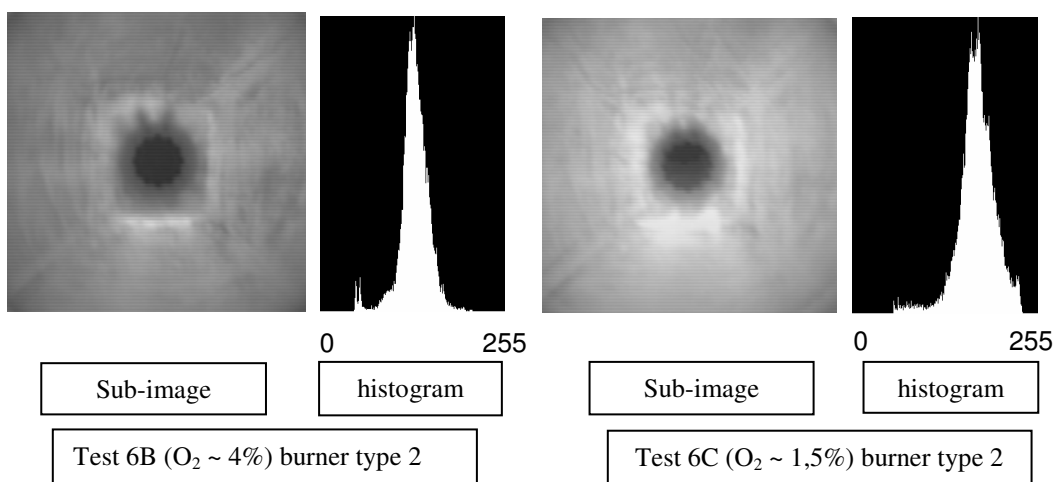


Figure 10 – Sub-images and histograms – Tests 6B and 6C – burner type 2

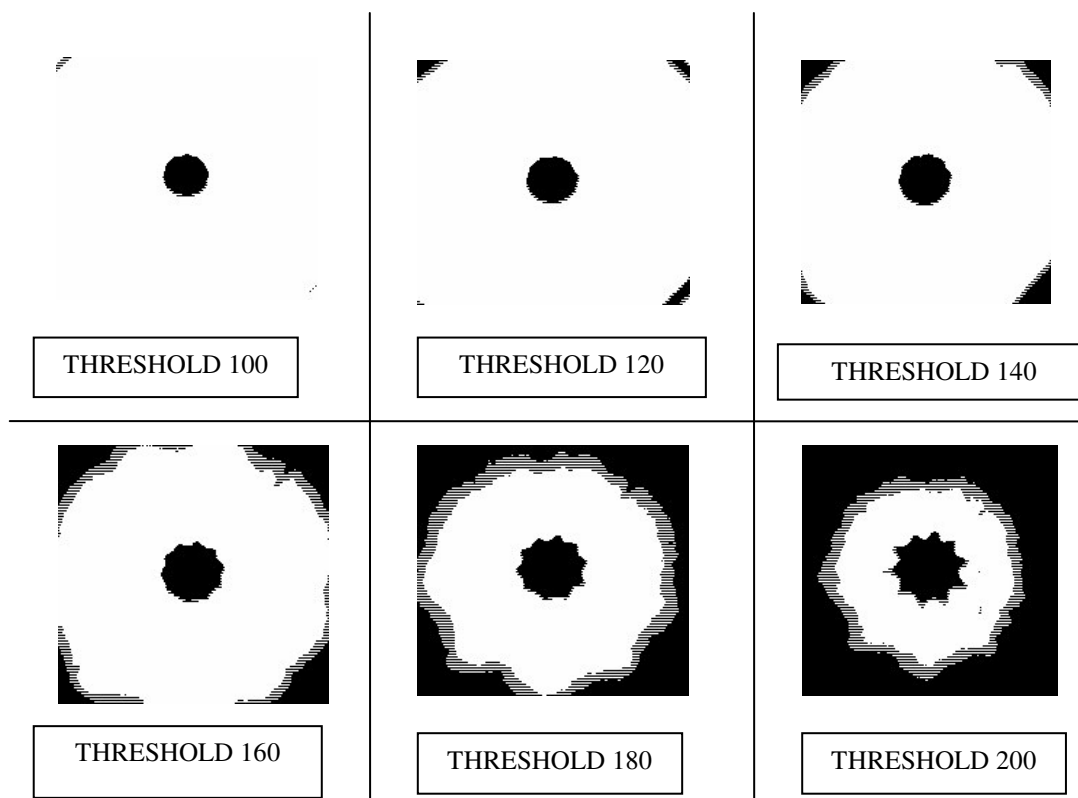


Figure 11 – Appearance of a sub-image after thresholding

Table 1 presents, in a condensed form, the values calculated for the tests 6B and 6C. The values  $SOMA(d(AREA) * THRE_{MEAN})$  are proportional to the emerging powers from the regions inside the squares (sub-areas) of Fig. (10) for the corresponding tests. It is important to notice that these last values are expressed in arbitrary units.

Areas of the thresholded images,  $A_{LIMi}$ , from the table are represented into Fig.(12), being straightforward to conclude that the area under the red curve (corresponding to test 6C), which is equivalent to  $SOMA(d(AREA) * THRE_{MEAN})$ , is considerably higher than that under the blue curve (corresponding to test 6B). In this figure it is possible to appreciate the internal surface wall temperature uniformity. If the curve presents, in its initial region, small values of  $(d(AREA)/d(THRE))$ , the uniformity is high and vice-versa. In the tests being shown the uniformity is lower in both cases.

Table 1 – Effect of the air excess on the wall emerging power – burner type 2

TEST 6B – BURNER TYPE 2					TEST 6C – BURNER TYPE 2				
HIGH AIR EXCESS ( 4,5% O2)					LOW AIR EXCESS ( 1% O2)				
THRE	$A_{LIMi}$	d(AREA)	$THRE_{MEAN}$	$THRE_{MEAN} \times d(AREA)$	THRE	$A_{LIMi}$	d(AREA)	$THRE_{MEAN}$	$THRE_{MEAN} \times d(AREA)$
100	30410	3765	110	414150	100	31893	654	110	71940
120	26645	15216	130	1978080	120	31239	1720	130	223600
140	11429	8911	150	1336650	140	29519	7104	150	1065600
160	2518	2126	170	361420	160	22415	11712	170	1991040
180	392	195	185	36075	180	10703	4081	185	754985
190	197	92	195	17940	190	6622	2745	195	535275
200	105	71	205	14555	200	3877	1725	205	353625
210	34	31	215	6665	210	2152	967	215	207905
220	3	3	225	675	220	1185	607	225	136575
230	0	0	232,5	0	230	578	578	232,5	134385
235	0	0	237,5	0	235	0	0	237,5	0
240	0				240				
SOMA(d(AREA) * $THRE_{MEAN}$ )				<b>4166210</b>	SOMA(d(AREA) * $THRE_{MEAN}$ )				<b>5474930</b>
DIFFERENCE RELATED TO THE LOWER VALUE (%)									<b>31,4</b>

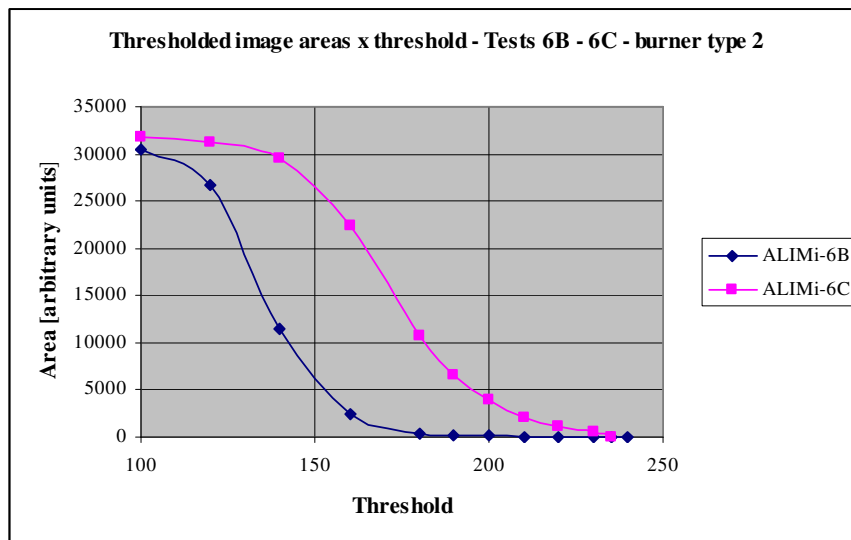


Figure 12 – Thresholded image areas – tests 6B and 6C – burner type 2

### 5. Additional aspects studied by means of images

Beyond the air excess effect, shown in item 4 for the case of type 2 burner, the following additional features were verified:

- Effect of the type 2 burner operation above its upper stoichiometric limit
- Effect of the substitution of type 2 burners by type 1 burners
- Effect of excessive gas jet momentum for the type 3 burners

#### 5.1. Effect of operating the burner above its stoichiometric limit

During the preliminary tests it was verified that the upper stoichiometric limit for the type 2 burner was 17,8 kg/h, which corresponds to the natural gas pressure ( $P_{GN} = 2,6 \text{ kgf/cm}^2$  gauge) ahead the injector nozzle. Nevertheless in each extremity of rows 3 and 4 of the furnace one burner of this burner type was originally installed, operating at gas pressures  $P_{GN} = 3,4 \text{ kgf/cm}^2$ , corresponding to a flow rate of 22,4 kg/h and these burners often presented stability problems. By this motive the burner was operated in the test furnace at both described conditions. At the higher throughput additional air was supplied externally to the burner body, simulating the real furnace operation.

The results of the tests 7A (stoichiometric limit) and 7B (above stoichiometric with tertiary air supply) show clearly the harm derived from this. In fact the power supplied to the burner in the test 7B was 25,8% higher than that supplied in the test 7A, but the emerging power from the wall had an improvement of only 9,5% as shown by a calculation similar to that explained in item 4. The wall sub-images for these tests are shown in Fig. (13) and the thresholded areas versus thresholds are shown in Fig. (14).



Figure 13 – Wall sub-images – tests 7A (left) and 7B (right) –burner type 2

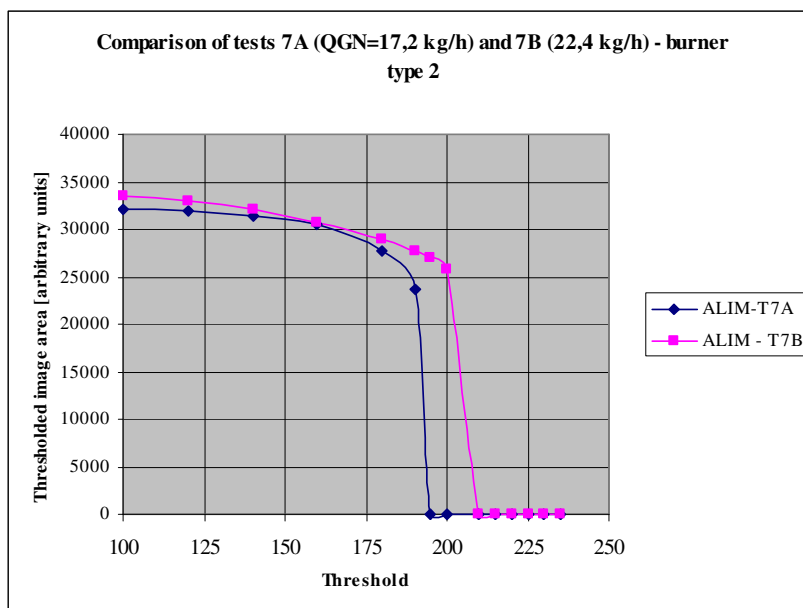


Figure 14 - Thresholded image areas – tests 7A and 7B – burner type 2

**5.2. Replacement of type 2 burners by those of type 1**

The bare visual inspection of the three burner models made at the work beginnings show clearly that the divergent throats and the outlet areas of the burner types 1 and 3 had been well designed but the same had not occurred for the type 2 (it clearly seems an improvisation). In fact the performance of that burner model was worse under several aspects (operation limits – dynamic and stoichiometric – and wall emerging power) when compared with the other two.

By this motive a test was carried out in which it was verified that the type 1 burner could replace the type 2, installed at the furnace row 2, with advantages. In this case the existing burners operate at 1,4 kgf/cm<sup>2</sup> gas pressure with 12,0 kg/h gas flow rate. To obtain the same gas flow rate, the type 1 burner would operate with 0,8 kgf/cm<sup>2</sup> gas pressure. The reference test with type 2 was numbered 6A and that carried out with the type 1 was numbered 2A. Both of them were carried out with the same air excess. Fig. 15 shows wall sub-images for the tests.

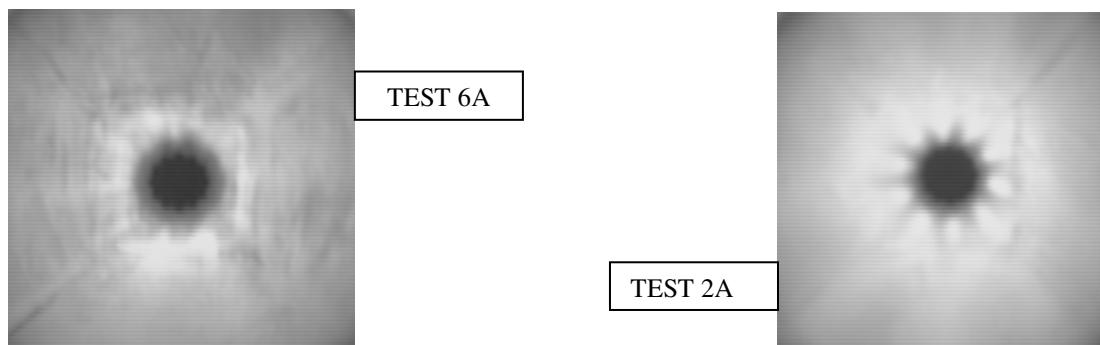


Figure 15 – Effect of replacing the burner type 2 by the type 1 on the refractory wall thresholds

These images show clearly the improvement on the emerging power when the burner type 1 is operated at the same conditions of the burner type 2. Fig. (16) quantifies this qualitative impression.

Using the calculation procedure presented in table 1 it is possible to conclude that the proposed replacement implies an increase of almost 17% on wall's emerging radiative power.

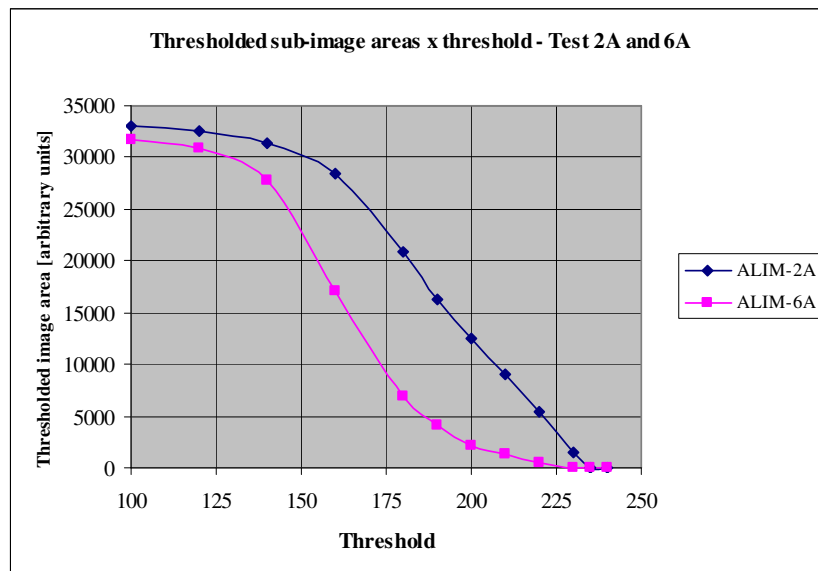


Figura 16 - Effect of the replacement of burner type 2 by the type 1 on the areas of the thresholded sub-images

### 5.3. Effect of the excessive momentum of gas jet

During the field work it was verified that type 3 burners installed at the levels 3 and 4, Fig.(1) were operating under the following conditions:  $PGN = 3,40 \text{ kgf/cm}^2$  (gas flow rate,  $Q_{GN} = 12,4 \text{ kg/h}$ ) and with 10 mm openings of the primary air register. The operators reported serious difficulties in their operation mainly related to flame's instability (blow-out).

For that throughput and taking into account the results of the preliminary tests carried out in the test furnace it became clear that the adjustment originally applied implied high air excess and high propensity to flame blow-out. It must be noticed that in the test furnace the primary air register had to be adjusted for 3,0 mm opening (being the secondary register completely closed) in order to achieve  $O_2$  contents in the flue gases between 1,2 and 1,4% (best condition for economy).

This problem is clearly due to the excessive gas jet momentum implying, additionally to a high air trust rate, a non-symmetric exiting velocity profile for the gas-air mixture as shown in Fig. (17), promoting the trust of large low temperature gases into the flame, thus lowering its temperature and hence decreasing  $Q_{RAD,FLAME,WALL}$  and  $Q_{CONV,FLAME,WALL}$  (see Fig.3).

Due to this problem, a modification was introduced into the gas nozzle consisting in a increasing of its diameter from 2,65 to 3,5 mm. This allowed the gas pressure to be lowered from 3,4 to 1,6  $\text{kgf/cm}^2$  and the primary air register opening to be increased from 3,0 to 10,0 mm, improving its switching. After this the test number 10 was carried whose results are to be compared with those of test 9, made previously the modification, both with the same throughput and same air excess.

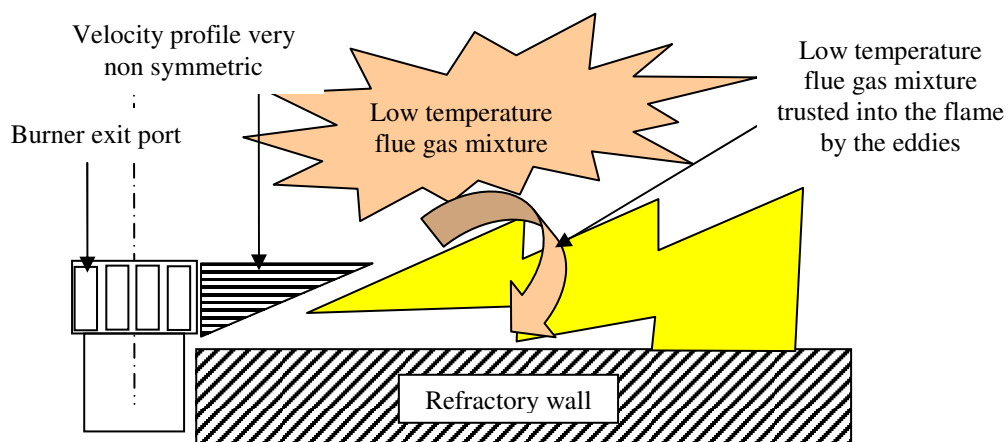


Figure 17 – Effect of excessive gas jet momentum on flame temperature

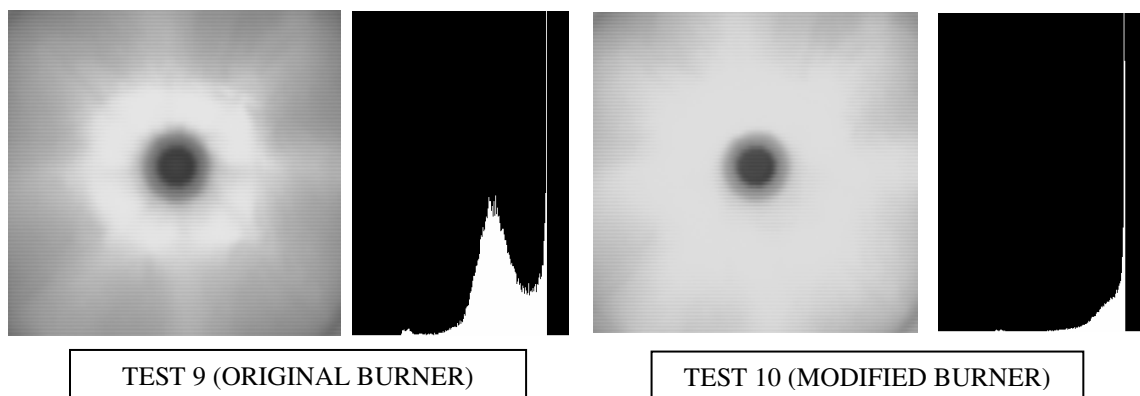


Figure 18 – Wall sub-images and their histograms - tests 9 and 10 – burner type 3

The bare visual inspection of the Fig.(18) sub-images, allows the conclusion that the temperature uniformity was improved due to the modification done. This is quantified by the histogram area reduction. It must be observed that the uniformity enhancement is an important goal of the work as it contributes to uniformize the heat flux striking the furnace coil. Nevertheless the most important improvement was the increase of wall emerging power, as shown in Fig.(19). The application of the calculation procedure shown in table 1 lead to a power increase of 18%.

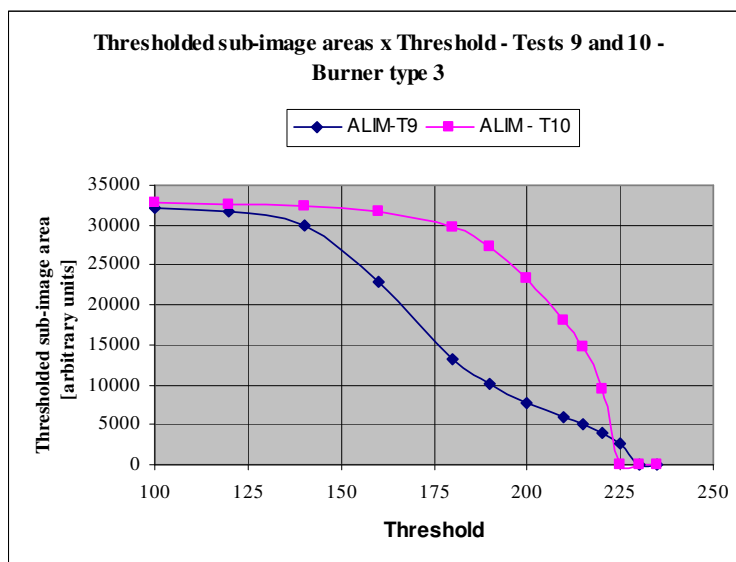


Figure 19 – Effect of the gas jet momentum decrease on the areas of the thresholded wall sub-images – Burner type 3

## 6. Conclusions

Using the proposed technique it was possible to identify and apply considerable improvements either on the burners operational stability or in the wall temperature uniformity with benefic consequences onto the furnace campaign and additionally to increase substantially the radiation zone efficiency. The application of the recommendations shown in Sousa (2005) to the whole furnace lead to a reduction of natural gas consumption around 15%. Finally it is important to stress that a technologic tool was developed, able to be applied for similar cases.

## 7. References

- Dewitt, D.P. and Nutter, G.D., in: Theory and Practice of Radiation Thermometry, Wiley, New York, 1989.
- Huang, Y., Yan, Y. and Riley, G., “Vision-based measurement of temperature distribution in a 500-kW model furnace using the two-colour method”. Measurement, 28, pp.175-183, Elsevier Science Ltd.2000.
- Martins, F.P.R., Lima, P.S.P., Quiroz, L.H.C., Bruna, W. Almeida, R.Z.H. “Sistema de leitura automática de códigos de licença”. In: Brazilian Symposium on Artificial Neural Networks, 2004, São Luis. Proceedings of SBRN 2004, 2004.
- Siegel, R. & Howell, J.R., “Thermal Radiation Heat Transfer”, Third Edition, Taylor & Francis Inc, 1992.
- Sousa, F.D.A. “Modificações em queimadores de fornos petroquímicos visando melhoria de condições operacionais”. Technical Report n° 80.070-205 – Instituto de Pesquisas Tecnológicas do Estado de São Paulo – IPT (2005).



## SIMULAÇÃO NUMÉRICA DOS MEIOS REAGENTES COM USO DA ANÁLISE DE SENSIBILIDADE

### A. P. Spilimbergo

UNIJUI – Universidade Regional do Noroeste do Estado do Rio Grande do Sul, Departamento de Física, Estatística e Matemática  
Caixa Postal 560 - 98700-000, Ijuí – RS, Brasil  
patspi@unijui.tche.br

### V. G. Krioukov

UETK – Universidade Estatal Técnica de Kazan, Departamento de Motores de Automóveis  
Caixa Postal 420111, Rua K. Marx 10, Kazan – Rússia  
vkrujkov@kai.ru

### M. V. Nikandrova

UETK – Universidade Estatal Técnica de Kazan, Departamento de Motores de Automóveis  
Caixa Postal 420111, Rua K. Marx 10, Kazan – Rússia  
magnolia11@mail.ru

*Resumo.* O trabalho enfoca a análise de sensibilidade na modelagem dos processos de combustão em um reator de mistura ideal. O meio reagente gasoso é considerado ao nível da cinética química detalhada. Na pesquisa é utilizada uma nova técnica para o cálculo analítico dos coeficientes de sensibilidade no código RISI. No presente trabalho foram realizadas comparações dos coeficientes de sensibilidade com os dados do código conhecido “Aurora”, do pacote CHEMKIN e foi observada uma concordância satisfatória entre eles. Também foi pesquisado o meio reagente complexo “S + O + H + (N)” e foi estabelecido que o seu mecanismo de reações pode ser classificado em 3 grupos: dois grupos com pequenos coeficientes de sensibilidade (com altas e baixas velocidades das reações) e um grupo de reações “críticas”. É observada também a segurança no cálculo destes coeficientes.

*Palavras chave:* Combustão, Cinética Química, Modelagem Matemática, Análise de Sensibilidade.

## 1. Introdução

A análise de sensibilidade da composição e da temperatura em relação as constantes de velocidade das reações químicas é uma importante ferramenta para modelar os processos de combustão e permite:

- avaliar a influência das constantes nas principais características da combustão;
- revelar as reações para as quais é necessário determinar as constantes  $k_s$  com erros mínimos;
- otimizar os mecanismos das reações.

A elaboração da técnica da análise de sensibilidade foi iniciada já a dezenas de anos atrás e atualmente existem diferentes pesquisas publicadas sobre esta temática (Oran *et al.*, 1987; Rabitz *et al.*, 1983; Glarborg *et al.* 1986; Brown *et al.*, 1995; etc.). Nestas publicações são consideradas várias abordagens para realizar esta análise e uma das mais eficazes entre elas é o modelo de mistura ideal (Alzueta *et al.*, 2001 e Kee *et al.*, 2000).

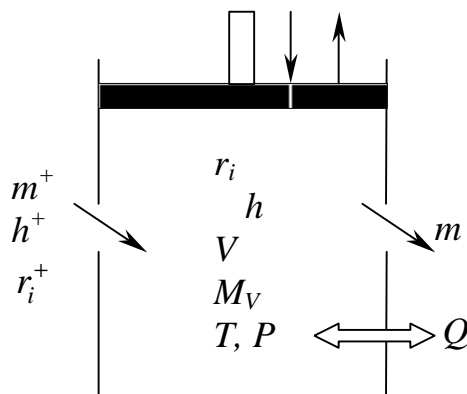


Figura 1. Esquema da combustão no reator R1.

O esquema deste reator (R1) está mostrado na Fig. 1 (onde:  $\hat{D}$  – pressão;  $\hat{O}$  – temperatura;  $m^+$ ,  $m^-$  – fluxo na entrada e na saída;  $r_i^+$ ,  $r_i$  – frações molares do fluxo na entrada e dentro do reator;  $h^+$ ,  $h$  – entalpias mássicas correspondentes;  $\dot{I}_v$ ,  $V$  – massa e volume do meio reagente dentro do reator;  $Q$  – perdas de calor do meio reagente por unidade de massa). No reator R1 se considera que  $m^+ = m^-$  e que inicialmente o meio reagente, com parâmetros  $r_i^o$  e  $T_o$ , está em equilíbrio químico. No andamento da substituição da mistura inicial pelo fluxo de entrada dos reagentes, ocorrem processos de combustão. Estes processos são limitados pelo tempo de permanência ( $\hat{o}_p$ ), fazendo com que o sistema reagente não esteja mais em equilíbrio químico. Quanto menor o  $\hat{o}_p$  maior é o grau do desvio do equilíbrio. A aplicação do esquema R1, devido à propriedade do “desequilíbrio estacionário”, permite mais facilmente (do que, por exemplo, para o reator de deslocamento ideal) determinar a influência de qualquer reação na combustão, nos intervalos pesquisados da temperatura, da pressão e da composição.

A etapa mais importante da análise de sensibilidade é a determinação dos coeficientes de sensibilidade, ou seja, das derivadas:

$$\partial r_i / \partial k_s^+ \text{ e } \partial T / \partial k_s^+ \quad (1)$$

para cada  $s$ -ésima reação no estado estacionário do reator R1 ( $k_s^+$  – constante de velocidade de reação, no sentido direto).

Na técnica tradicional de determinação destes coeficientes são calculados dois estados estacionários do reator R1 com valores diferentes de  $k_s^+$  e logo após são calculadas numericamente as derivadas das Eq. (1) (Alzueta *et al.*, 2001 e Kee *et al.*, 2000). Em Spilimbergo *et al.* (2005) foi proposta outra abordagem de determinação dos coeficientes de sensibilidade, baseada no cálculo analítico das derivadas. Considera-se que a nova técnica é mais econômica e segura pois não envolve o incremento  $\Delta k_s^+$ , que não é de simples determinação, de uma maneira geral, para qualquer reação. No presente trabalho é dada continuidade a pesquisa desta abordagem, verificando e investigando o meio reagente complexo “S + O + H + (N)”.

## 2. Modelo do reator de mistura ideal

O modelo matemático do reator R1 baseia-se nas seguintes admissões:

- as espécies que entram no reator (os reagentes) misturam-se instantaneamente com o meio reagente, dentro do reator;
- a pressão  $P$  no reator durante o andamento da combustão não se altera;
- os fluxos mássicos na entrada e saída de reator são iguais ( $m^+ = m^-$ );
- o meio reagente submete-se às leis de cinética química detalhada;
- o meio reagente inicial está em equilíbrio químico com os parâmetros  $r_i^o$ ,  $T_o$  e  $h_o$ ;
- entre o meio reagente e o meio ambiente ocorre transferência de calor (com fluxo de calor prescrito  $Q$ );
- as entalpias mássicas do fluxo ( $h^+$ ), do meio reagente ( $h$ ) e do estado inicial ( $h_o$ ) são ligados entre si ( $h_o = h = h^+$ ) e não se alteram durante da combustão.

As equações da cinética química deste modelo são utilizadas na forma exponencial (Spilimbergo *et al.*, 2005):

$$\frac{dg_i}{dt} = -e^{g_i} \sum_j n_{ij} \Omega_j + \frac{r_i^+ m_\Sigma}{m^+ t_p} + \sum_q \sum_j n_{qj} \Omega_j + \sum_q \frac{r_q^+ m_\Sigma}{m^+ t_p} \equiv f_{gi} \quad (2)$$

$$\text{onde: } \Omega_j = k_j \left( \frac{P}{R_o T} \right)^{\bar{m}_j} \exp \left( - \sum_p n_{pj} g_p \right); \quad \bar{m}_j = m_j + \sum_p n_{pj} - 1; \quad \tilde{a}_i = -\ln r_i;$$

$$v_{ij} = v_{is}'' - v_{is}' \quad ; \quad n_{ij} = v_{is}' \quad ; \quad j = s \quad ; \quad s = 1, \dots, m_c;$$

$$v_{ij} = v_{is}' - v_{is}'' \quad ; \quad n_{ij} = v_{is}'' \quad ; \quad j = s + m_c \quad ; \quad s = 1, \dots, m_c;$$

$n_{is}'$ ,  $n_{is}''$  – coeficientes estequiométricos no conjunto das reações reversíveis.

$$\sum_i n_{is}' B_i \Leftrightarrow \sum_i n_{is}'' B_i; \quad i = 1, \dots, n_c; \quad s = 1, \dots, m_c; \quad (3)$$

onde:  $\hat{A}_i$  – símbolo da  $i$ -ésima substância;  $m_j$  – índice de participação da partícula catalítica  $M$  na  $j$ -ésima reação ( $m_j = 1$  se a partícula  $M$  participa da  $j$ -ésima reação e caso contrário  $m_j = 0$ );  $m_i$  – massa molecular da  $i$ -ésima espécie;  $n_c$  –

número de substâncias no meio reagente;  $t_p = M_V / m^+$ ;  $m_\Sigma = \sum_i r_i m_i$  – massa molecular média do meio reagente no reator;  $m_c$  – número de reações reversíveis no meio reagente.

Nestas equações o conjunto das constantes de velocidade  $k_j$  ( $j = 1, \dots, 2m_c$ ) inclui as constantes  $k_s^+$  e  $k_s^-$  tanto na direção direta ( $j = 1, \dots, m_c$ ) como na direção inversa ( $j = m_c + 1, \dots, 2m_c$ ) que são ligadas entre si pela fórmula:

$$k_s^- = k_s^+ / K_s \quad s = 1, \dots, m_c. \quad (4)$$

Estas constantes são funções de temperatura e são apresentadas na forma de Arrhenius

$$k_s = A_s T^{n_s} \exp(-E_s / R_o T) \quad (5)$$

onde:  $A_s$ ,  $n_s$  e  $E_s$  são parâmetros constantes.

A dedução das Eq. (2) é apresentada em Spilimbergo *et al.* (2005). A equação de energia é utilizada na forma algébrica (Krioukov *et al.*, 1997) considerando que  $h_o = h$ :

$$F_T \equiv T - T_{rf} - \sum_i \left( h m_i - H_i^{rf} \right) r_i / \sum_i C_{pi}^{rf} r_i = 0 \quad (6)$$

onde

$$h = \frac{\sum_i H_i r_i}{\sum_i m_i r_i} \quad i = 1, \dots, n_c \quad (7)$$

sendo:  $H_i$  a entalpia molar de  $i$ -ésima espécie, que é função de temperatura e habitualmente apresentada na forma polinomial (Gordon *et al.*, 1971). Para diminuir o volume computacional, a entalpia  $H_i$  é apresentada por um conjunto de funções lineares:

$$H_i = H_i^{rf} + C_{pi}^{rf} (T - T_{rf}) \quad (8)$$

onde o índice “ $rf$ ” corresponde aos pontos de referência e  $C_{pi}^{rf}$  é o calor específico molar da  $i$ -ésima substância, com pressão constante.

Assim, o modelo de reator R1 é descrito pelas Eq. (2) – (7) com as incógnitas  $g_i$  e  $T$ , e é necessário determinar a evolução destas incógnitas até o estado estacionário que praticamente ocorre para um tempo  $t_f \approx 10t_p$ .

As Equações (2) são rígidas e para resolvê-las é necessário utilizar um dos métodos numéricos implícitos com uso do Jacobiano. No algoritmo de cálculo é aplicado o método de spline-integração (Durigon *et al.*, 2003) que é mais econômico em comparação com o método conhecido (Oran *et al.*, 1987). De acordo com este algoritmo foi criado um código “RIS1”, que é invariante em relação aos meios reagentes como o código semelhante “Aurora”, do pacote NÁÁIÉIN (Kee *et al.*, 2000).

### 3. Cálculo dos coeficientes de sensibilidade

A análise de sensibilidade para o estado estacionário da mistura reagente é realizada quando as partes direitas das Eq. (2) são zeradas. Os parâmetros para quais se executa esta análise são somente  $k_s^+$  ( $s = 1, \dots, m_c$ ), pois as constantes das direções inversas das reações são calculadas pelas Eq. (4) e não são parâmetros independentes. Neste caso os coeficientes de sensibilidade (Glarborg *et al.*, 1986):

$$R_{is} = \frac{\partial \ln r_i}{\partial \ln k_s^+} = - \frac{k_s^+ \partial g_k}{\partial k_s^+} \quad \text{e} \quad R_{Ts} = \frac{\partial \ln T}{\partial \ln k_s^+} = \frac{k_s^+ \partial T}{T \partial k_s^+} \quad (9)$$

são determinados pela resolução do sistema (Eq. (10)),  $m_c$  vezes:

$$A \cdot X_s = B_s \quad (10)$$

onde

$$A = \begin{Bmatrix} \frac{\partial f_{g_i}}{\partial \mathbf{g}_k} & \frac{\partial f_{g_i}}{\partial T} \\ \frac{\partial F_T}{\partial \mathbf{g}_k} & \frac{\partial F_T}{\partial T} \end{Bmatrix} \quad B_s = \begin{Bmatrix} -k_s^+ \frac{\partial f_{g_i}}{\partial k_s^+} \\ -k_s^+ \frac{\partial F_T}{\partial k_s^+} \end{Bmatrix} \quad i, k = 1, \dots, n_c; \quad s = 1, \dots, m_c \quad (11)$$

com as grandezas incógnitas:  $X_s \equiv [X_{is}, X_{Ts}] \equiv \left[ k_s^+ \frac{\partial \mathbf{g}_k}{\partial k_s^+}, k_s^+ \frac{\partial T}{\partial k_s^+} \right]$ .

Daqui são determinados:

$$R_{is} = -X_{is} \quad \text{e} \quad R_{Ts} = X_{Ts}/T \quad i = 1, \dots, n_c. \quad (12)$$

O principal momento que caracteriza a técnica do cálculo dos coeficientes  $R_{is}$  e  $R_{Ts}$ , é a determinação analítica da matriz  $\hat{A}$  e dos vetores  $\hat{A}_s$ , cuja dedução detalhada é apresentada em Spilimbergo *et al.* (2005), pelas fórmulas

$$\frac{\partial f_{g_i}}{\partial \mathbf{g}_k} = -d_i^k e^{g_i} \left( \sum_j \mathbf{n}_{ij} \Omega_j + \frac{r_i^+ \mathbf{m}_\Sigma}{\mathbf{m}^+ \mathbf{t}_p} \right) + e^{g_i} \left( \sum_j \mathbf{n}_{ij} n_{kj} \Omega_j + \frac{r_i^+ \mathbf{m}_k r_k}{\mathbf{m}^+ \mathbf{t}_p} \right) - \sum_q \left( \sum_j \mathbf{n}_{qj} n_{kj} \Omega_j + \frac{r_q^+ \mathbf{m}_k r_k}{\mathbf{m}^+ \mathbf{t}_p} \right) \quad (13)$$

$$\frac{\partial f_{g_i}}{\partial T} = e^{g_i} \left( \sum_j \mathbf{n}_{ij} \Omega_j \frac{\bar{m}_j}{T} \right) - \sum_q \sum_j \mathbf{n}_{qj} \Omega_j \frac{\bar{m}_j}{T} \quad (14)$$

$$\frac{\partial F_T}{\partial \mathbf{g}_k} = \left[ \left( h \mathbf{m}_k - H_k^{rf} \right) r_k - C_{pk}^{rf} r_k (T - T_{rf}) \right] / \sum_q C_{pq}^{rf} r_q \quad (15)$$

$$\frac{\partial F_T}{\partial T} = 1; \quad \frac{\partial F_T}{\partial k_s^+} = 0 \quad (16)$$

$$B_{is} = (\Omega_s - \Omega_{s+mc}) \cdot \left( e^{g_i} \mathbf{n}_{is} - \sum_q \mathbf{n}_{qs} \right); \quad B_{Ts} = 0. \quad (17)$$

#### 4. Verificação dos coeficientes de sensibilidade

No algoritmo, a verificação do cálculo dos coeficientes  $R_{is}$  e  $R_{Ts}$ , foi realizada pela comparação com os mesmos coeficientes obtidos numericamente (Kee *et al.*, 2000) para as mesmas condições, a saber: o meio reagente “H + O + (N)” descrito por 8 espécies (O, O<sub>2</sub>, H, H<sub>2</sub>, OH, HO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O, H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>) e 19 reações, apresentadas na Tab. 1, onde símbolos e números entre “/ /” (barras) significam a espécie e o seu fator catalítico. Por exemplo, na reação 9 o fragmento “/H<sub>2</sub>O/21/” significa que a espécie H<sub>2</sub>O é 21 vezes mais eficaz do que a partícula comum M. Outros dados iniciais foram:  $r_{O_2}^+ = 0,13051$ ;  $r_{H_2}^+ = 0,31324$ ;  $r_{N_2}^+ = 0,55625$ ; as concentrações das substâncias de entrada restantes foram negligenciadas ( $r_i = 10^{-15}$ ); a temperatura dos reagentes na entrada do reator ( $T^+$ ) foi 298K;  $P = 1$  atm;  $t_p = 0,3 \cdot 10^{-4}$  s. Os resultados do cálculo para o estado estacionário obtidos pelo código “Aurora” (Kee *et al.*, 2000) e RIS1 estão mostrados na Tab. 2.

Observa-se que ambos os códigos possuem resultados bastante próximos se for considerado que:

- os modelos matemáticos usados em “Aurora” e em RIS1 são diferentes. O código “Aurora” utiliza as equações da cinética química na forma tradicional e a equação de energia na forma diferencial. Enquanto que no código RIS1 são aplicadas as Eq. (2)-(7);
- as bases de dados para as espécies também são diferentes. O código RIS1 é apoiado na base de Alemassov *et al.* (1971), e o “Aurora” na base de Gordon *et al.* (1971).

A comparação dos coeficientes de sensibilidade é mostrada na Tab. 3. Os coeficientes  $R_{is}$  e  $R_{Ts}$  com valores  $|R_{is}| < 0,01$  e  $|R_{Ts}| < 0,01$  foram omitidas. Pode-se considerar uma boa concordância entre os dados obtidos por ambos os códigos.

Tabela 1. Mecanismo de reações usado para o meio “H + O + (N)”.

Nº	Reações	lg $A_s$	$n_s$	$E_s$
1	H+O2=O+O1H1	16,707	-0,82	16510
2	H2+O=H+O1H1	10,255	1,00	8830
3	H2+O1H1=H2O1+H	9,079	1,30	3630
4	O1H1+O1H1=H2O1+O	8,778	1,30	0
5	H+O1H1+M=H2O1+M H2O1 / 20	23,875	-2,60	0
6	O2+M=O+O+M	11,279	0,50	95560
7	H2+M=H+H+M H2O1 / 6 / H / 2 / H2 / 3	12,342	0,50	92600
8	H2+O2=O1H1+O1H1	13,230	0,00	47780
9	H+O2+M=H1O2+M H2 / 3 / H2O1 / 21 / O2 / 0 / N2 / 0	18,322	-1,00	0
10	H+O2+O2=H1O2+O2	19,826	-1,42	0
11	H+O2+N2=H1O2+N2	19,826	-1,42	0
12	H1O2+H=H2+O2	13,398	0,00	700
13	H1O2+H=O1H1+O1H1	14,398	0,00	1900
14	H1O2+O=O1H1+O2	13,681	0,00	1000
15	H1O2+O1H1=H2O1+O2	13,699	0,00	1000
16	H1O2+H1O2=H2O2+O2	12,301	0,00	0
17	H2O2+M=O1H1+O1H1+M	17,079	0,00	45500
18	H2O2+H=H1O2+H2	12,230	0,00	3750
19	H2O2+O1H1=H2O1+H1O2	13,000	0,00	1800

Tabela 2. Comparação de estados estacionários calculados pelos códigos “Aurora” e RIS1.

Código	$T_f$	$r_O$	$r_{O2}$	$r_H$	$r_{H2}$	$r_{OH}$	$r_{HO2}$	$r_{H2O}$	$r_{H2O2}$
Aurora	1429	$0,632 \cdot 10^{-2}$	$0,263 \cdot 10^{-1}$	$0,616 \cdot 10^{-1}$	$0,872 \cdot 10^{-1}$	$0,565 \cdot 10^{-2}$	$0,126 \cdot 10^{-4}$	0,2156	$0,192 \cdot 10^{-4}$
RIS1	1426	$0,619 \cdot 10^{-2}$	$0,262 \cdot 10^{-1}$	$0,620 \cdot 10^{-1}$	$0,867 \cdot 10^{-1}$	$0,630 \cdot 10^{-2}$	$0,117 \cdot 10^{-4}$	0,2152	$0,173 \cdot 10^{-4}$

## 5. Determinação dos coeficientes de sensibilidade para o meio reagente “S + O + H + (N)”

Atualmente são publicados numerosos trabalhos sobre a combustão no meio “S + O + H + (N)”, o que mostra a importância deste problema. É estabelecido que o mecanismo de combustão das espécies que contém enxofre (S) é bastante complexo e inclui até 30 substâncias e 130 reações. Este mecanismo se encontra em trabalhos como por exemplo Alzueta *et al.*(2001) e LEEDS (2005). Assim, existe o problema de otimizar este mecanismo, ou seja, “reduzi-lo sem perda considerável da precisão de previsão” e, a aplicação da análise de sensibilidade pode ajudar a resolver este problema.

Mas primeiramente é interessante verificar a possibilidade do código RIS1 dominar um meio tão complexo como o “S + O + H + (N)”, no sentido de segurança na obtenção dos resultados. Para isso usando o mecanismo de LEEDS (2005,) foi realizada uma série de cálculos pelo código “RIS1” considerando 27 espécies e 121 reações.

Os dados iniciais foram:  $r_{O2}^+ = 0,1842$ ;  $r_{H2S}^+ = 0,1228$ ;  $r_{N2}^+ = 0,6930$  (mistura estequiométrica);  $P = 1\text{atm}$ ; a composição inicial no reator foi considerada em equilíbrio químico com as temperaturas no intervalo  $T_o = 1200K, \dots, 2000K$  e com o tempo de permanência  $\delta_p = 10^{-4}s, \dots, 1s$ .

Para todas as variantes do cálculo, o código RIS1 mostrou segurança de obtenção dos coeficientes de sensibilidade exceto nos casos do término da combustão, quando a temperatura do meio reagente foi menor que 400K. Um dos resultados (variante V1 com  $T_o = 1600K$ ;  $\delta_p = 1s$ ;  $T^+ = 298K$ ;  $Q = 670kJ/kg$ ) está mostrado nas Tab. 4, 5a e 5b. Devido a grande quantidade de coeficientes de sensibilidade das Tab. 5a e 5b foram excluídos:

- as colunas das espécies ( $H_2S_2$ ,  $H_2SO$ ,  $H_2O_2S$ ,  $HO_3S$ ,  $H_2O_2$ , N) cujas frações molares foram pequenas ( $r_i < 10^{-8}$ );
- as colunas com os coeficientes  $R_{N2}$  e  $R_{Ts}$  devido aos seus pequenos valores (somente  $R_{T48} = 0,01$ );

- as linhas das reações com  $R_{is} < 10^{-2}$ .

Tabela 3. Comparação dos coeficientes  $R_{is}$  e  $R_{Ts}$ , calculados pelos códigos “Aurora” e RIS1.

Nº	Reações	Código	Coeficientes de Sensibilidade								
			O	O <sub>2</sub>	H	H <sub>2</sub>	OH	HO <sub>2</sub>	H <sub>2</sub> O	H <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	T <sub>f</sub>
1	H+O <sub>2</sub> =O+OH1	RIS1	0,44	-0,32	0,09	-0,18	0,34	-0,34	0,06	0,39	0,02
		Aurora	0,41	-0,29	0,09	-0,17	0,31	-0,31	0,05	0,37	0,02
2	H <sub>2</sub> +O=H+O1H1	RIS1	-0,13	-0,09	0,05	-0,08	0,13	-0,11	0,02	0,11	0,01
		Aurora	-0,14	-0,10	0,06	-0,08	0,14	-0,12	0,03	0,12	0,02
3	H <sub>2</sub> +O1H1=H <sub>2</sub> O1+H	RIS1	0,01	-0,15	0,09	-0,12	-0,06	-0,15	0,04	-0,21	0,01
		Aurora	0,03	-0,15	0,10	-0,13	-0,08	-0,16	0,04	-0,24	0,01
4	O1H1+O1H1=H <sub>2</sub> O1+O	RIS1	-0,03	-0,01	-	-0,01	0,03	-0,01	-	0,03	-
		Aurora	-0,02	-	-	-	0,02	-	-	0,02	-
5	H+O1H1+M=H <sub>2</sub> O1+M	RIS1	-0,05	-0,05	-0,06	-0,01	0,05	-0,13	0,02	-0,07	0,03
		Aurora	-0,04	-0,04	-0,06	-	0,05	-0,11	0,02	-0,08	0,03
7	H <sub>2</sub> +M=H+H+M	RIS1	-0,06	-0,04	-0,09	0,01	0,07	-0,14	0,02	-0,06	0,04
		Aurora	-0,06	-0,04	-0,09	-	0,07	-0,14	0,02	-0,07	0,05
9	H+O <sub>2</sub> +M=H1O <sub>2</sub> +M	RIS1	-	-0,13	-0,05	-0,05	0,18	0,59	0,03	0,06	0,05
		Aurora	-	-0,14	-0,05	-0,06	0,19	0,58	0,04	0,05	0,05
11	H+O <sub>2</sub> +N <sub>2</sub> =H1O <sub>2</sub> +N <sub>2</sub>	RIS1	-	-0,03	-0,01	-0,01	0,03	0,12	0,01	0,01	0,01
		Aurora	-	-0,03	-	-0,01	0,04	0,11	-	-	0,01
12	H1O <sub>2</sub> +H=H <sub>2</sub> +O <sub>2</sub>	RIS1	-0,01	0,01	-0,01	0,01	-0,02	-0,11	-	-0,02	-
		Aurora	-	0,02	-	-	-0,02	-0,11	-	-0,02	-
13	H1O <sub>2</sub> +H=O1H1+O1H1	RIS1	0,01	-0,02	0,01	-0,01	0,02	-0,85	-	0,02	-
		Aurora	0,01	-0,02	-	-0,01	0,02	-0,85	-	0,02	-
14	H1O <sub>2</sub> +O=O1H1+O <sub>2</sub>	RIS1	-	-	-	-	-	-0,02	-	-	-
		Aurora	-	-	-	-	-	-	-	-	-
15	H1O <sub>2</sub> +O1H1=H <sub>2</sub> O1+O <sub>2</sub>	RIS1	-	-	-	-	-	-0,02	-	-	-
		Aurora	-	-	-	-	-	-0,02	-	-	-
17	H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> +M=O1H1+O1H1+M	RIS1	-	-	-	-	-	0,01	-	0,83	-
		Aurora	-	-	-	-	-	-	-	0,82	-
18	H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> +H=H1O <sub>2</sub> +H <sub>2</sub>	RIS1	-	-	-	-	-	-	-	-0,36	-
		Aurora	-	-	-	-	-	-	-	-0,37	-
19	H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> +O1H1=H <sub>2</sub> O1+H1O <sub>2</sub>	RIS1	-	-	-	-	-	-	-	-0,43	-
		Aurora	-	-	-	-	-	-	-	-0,40	-

Obs.: As reações 6, 8, 10 e 16, com valores  $|R_{is}| < 0,01$  e  $|R_{Ts}| < 0,01$ , não são apresentadas.

Tabela 4. Características do estado estacionário no reator (variante V1).

T	S	S <sub>2</sub>	H	H <sub>2</sub>	O	O <sub>2</sub>
1572	0,272.10 <sup>-5</sup>	0,1664.10 <sup>-3</sup>	0,2891.10 <sup>-4</sup>	0,2524.10 <sup>-2</sup>	0,2917.10 <sup>-5</sup>	0,232.10 <sup>-2</sup>
N <sub>2</sub>	H <sub>2</sub> O	OH	HO <sub>2</sub>	HS	H <sub>2</sub> S	SO
0,7369	0,1278	0,7720.10 <sup>-4</sup>	0,221.10 <sup>-6</sup>	0,7538.10 <sup>-4</sup>	0,1923.10 <sup>-3</sup>	0,7096.10 <sup>-3</sup>
SO <sub>2</sub>	HS <sub>2</sub>	SO <sub>3</sub>	HO <sub>2</sub> S	HOS	HSO	H <sub>2</sub> OS
0,1292	0,1216.10 <sup>-6</sup>	0,1015.10 <sup>-5</sup>	0,9052.10 <sup>-6</sup>	0,3771.10 <sup>-6</sup>	0,5194.10 <sup>-5</sup>	0,6833.10 <sup>-7</sup>

Obs.: As substâncias com frações molares  $r_i < 10^{-8}$  não são mostradas.

Analisando as Tabelas 5a e 5b pode-se fazer as seguintes observações:

- os valores pequenos de  $R_{is}$  mostram que a alteração das constantes  $k_s^+$  não influi nas características do meio reagente. Por exemplo, o valor  $R_{is} = 10^{-3}$  significa que a alteração de  $k_s^+$  em 2,73 vezes provoca alteração relativa a  $r_i$  em 0,1%. Isto pode ocorrer em dois casos:
  - quando as velocidades das direções direta ( $W^+$ ) e inversa ( $W^-$ ) da  $s$ -ésima reação são muito pequenas ou então,
  - quando estas velocidades são muito altas;
- em ambos os casos pode-se considerar que na determinação da constante  $k_s^+$  são admitidos erros consideráveis (10,...,100 vezes), mas isto não significa ainda que a  $s$ -ésima reação deva ser excluída do mecanismo. É necessário avaliar também os valores  $W^+$  e  $W^-$ . Se estes valores forem pequenos, a reação pode ser excluída;

- c) os altos valores de  $R_{is}$  e  $R_f$  significam que a  $s$ -ésima reação é “crítica”, ou seja, a alteração  $k_s^+$  influi essencialmente nas características da combustão e então a constante  $k_s^+$  deve ser determinada com erro mínimo;
- d) na variante V1 (Tab. 5a e 5b) somente uma reação influi na temperatura  $T_f$  ( $R_{Ts} = 0,01$  para  $s = 48$ ) o que conduz à avaliação:

$$\frac{\partial \ln T}{\partial \ln k_{48}^+} = 0,01 \rightarrow \frac{\Delta T}{T} = 0,01 \cdot \Delta \ln k_{48}^+ \rightarrow \Delta T = 16K \text{ e } T_f = 1600K \text{ (se } \Delta \ln k_{48}^+ = 1)$$

ou seja, o erro em 2,73 vezes pela constante de velocidade  $k_{48}^+$  provoca o erro na temperatura  $\Delta T = 16K$  ;

Tabela 5a. Coeficientes de sensibilidade  $R_{is}$  (espécies S, S<sub>2</sub>, H, H<sub>2</sub>, O, O<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O, OH, HO<sub>2</sub>) para a variante V1.

Nº	Reações	S	S2	H	H2	O	O2	H2O1	O1H1	H1O2
1	H2S1+M=H2+S+M	-	-	-	-	-	-	-	-	-
2	H2S1+S1O2=H2+S+S1O2	-	-	-	-	-	-	-	-	-
3	H2S1+H2O1=H2+S+H2O1	-	-	-	-	-	-	-	-	-
4	H2S1+H=H1S1+H2	-0,07	0,80	-0,57	-0,03	-0,25	0,10	-	-0,41	-0,01
5	H2S1+O=H1S1+O1H1	-	0,04	-	-	-0,03	-	-	-	-
6	H2S1+O1H1=H1S1+H2O1	-	0,12	-0,08	-0,02	-0,04	-	-	-0,07	-
7	H2S1+S=H1S1+H1S1	0,02	-0,12	-	0,02	0,02	-	-	-	-
8	H2S1+S=H1S2+H	-	-	-	-	-	-	-	-	-
9	S+H2=H1S1+H	0,06	-0,18	-0,15	0,04	-	0,01	-	-0,14	-0,01
10	H1S1+O=S1O1+H	-0,06	-0,06	-	0,05	-0,07	0,01	-	-0,04	0,03
11	H1S1+O1H1=H2O1+S	0,08	-0,16	-0,13	-	-	-	-	-0,13	-0,02
13	H1S1+O2=H1S1O1+O	-	-0,12	0,03	-0,02	0,03	-0,04	-	0,05	-0,04
14	S+O1H1=S1O1+H	-0,02	-	-	0,01	-	-	-	-	-
15	S+O2=S1O1+O	-0,07	-0,17	0,09	-0,02	0,05	-0,05	-	0,09	-0,05
16	2H1S1=S2+H2	-0,06	0,49	0,06	-0,03	0,05	0,03	-	0,08	0,03
17	H1S1+S=S2+H	-	-0,02	-	-	-	-	-	-	-
19	S2+H+M=H1S2+M	-	-0,03	-	-	-	-	-	-	-
20	S2+O=S1O1+S	0,05	-0,46	-0,06	0,04	-0,06	-0,02	-	-0,09	-0,02
21	H1S2+H=S2+H2	-	0,01	-	-	-	-	-	-	-
23	H1S2+O1H1=S2+H2O1	-	-	-	-	-	-	-	-	-
45	S1O1+H+M=H1S1O1+M	-	-	-	-	-	-	-	-	-
47	S1O1+O1H1=S1O2+H	-0,19	0,07	0,02	0,19	-0,08	0,10	-	-0,17	0,17
48	S1O1+O2=S1O2+O	-0,40	-1,42	0,68	-0,24	0,48	-0,51	-	0,82	-0,51
49	2S1O1=S1O2+S	-0,20	-0,29	0,16	0,04	0,07	-0,04	-	0,09	-
52	H1S1O1+H=H2O1+S	0,01	-	-	-	-	-	-	-	-
55	H1S1O1+H=S1O1+H2	-	-	-	-	-	-	-	-	-
57	H1S1O1+O=S1O2+H	-	-	-	-	-	-	-	-	-
59	H1S1O1+O=H1O1S1+O	-	-	-	-	-	-	-	-	-
60	H1S1O1+O=O1H1+S1O1	-	-	-	-	-	-	-	-	-
62	H1S1O1+O1H1=H1O2S1+H	-	-	-	-	-	-	-	-	-
63	H1S1O1+O1H1=S1O1+H2O1	-	-	-	-	-	-	-	-	-
64	H1S1O1+O2=S1O2+O1H1	-	-	-	-	-	-	-	-	-
65	H2O1S1=H1S1+O1H1	-	-	-	-	-	-	-	-	-
66	H2O1S1=H2O1+S	-	-	-	-	-	-	-	-	-
69	H+S1O2+M=H1O2S1+M	-	-	-	-	-	-	-	-	-
71	H1O2S1+H=S1O2+H2	-	-	-	-	-	-	-	-	-
73	H1O2S1+O1H1=S1O2+H2O1	-	-	-	-	-	-	-	-	-
77	H1S1O2+O2=H1O2+S1O2	-	-	-	-	-	-	-	-	0,02
78	S1O2+H+M=H1S1O2+M	-	-	-	-	-	-	-	-	-
90	S+O1H1+H1S1+O	0,06	-0,04	-0,08	-0,01	-0,20	-	-	-0,07	-0,02
91	H1S1+O2=S1O1+O1H1	-0,02	-0,08	0,03	-	-	-0,02	-	0,03	-0,02
94	H+O2=O+O1H1	-0,02	-0,35	0,15	-0,13	0,14	-0,16	-	0,25	-0,18
95	H2+O=H+O1H1	-	0,02	0,01	-	-0,03	-	-	0,01	-
96	H2+O1H1+H2O1+H	0,09	0,01	0,05	-0,12	-	-0,06	-	-0,02	-0,03
97	O1H1+O1H1=H2O1+O	-0,04	0,31	0,12	-0,05	-0,43	-	-	0,17	-
111	H+O2+H2O1=H1O2+H2O1	-	-	-	-	-	-	-	-	0,85
113	H1O2+H=H2+O2	-	-	-	-	-	-	-	-	-0,07
114	H1O2+H=O1H1+O1H1	-	-	-	-	-	-	-	-	-0,47
116	H1O2+O1H1=H2O1+O2	-	-	-	-	-	-	-	-	-0,32

Obs.: Na Tab. 5a os valores onde  $|R_{is}| < 10^{-2}$ , são substituídos por “-”.

e) a mesma reação possui influi consideravelmente nas concentrações dos reagentes ( $H_2S$  e  $O_2$ ) e nas concentrações das substâncias intermediárias (até  $R_{i48} > 1$ ). Por exemplo, tem-se:  $R_{S_2 48} = \frac{\partial \ln r_{S_2}}{\partial \ln k_{48}^+} = -1,42$ , então o aumento da  $k_{48}^+$  em 2,73 vezes ( $\Delta \ln k_{48}^+ = 1$ ) provoca a redução de  $r_{S_2}$  em:  $dr_{S_2} = \Delta \ln r_{S_2} = (\ln r_{S_2}'' - \ln r_{S_2}') = -1,42$ , ou seja, a redução de  $r_{S_2}$  em 4,14 vezes.

Tabela 5b. Coeficientes de sensibilidade  $R_{is}$  (espécies HS,  $H_2S$ , SO,  $SO_2$ ,  $HS_2$ ,  $SO_3$ ,  $HO_2S$ , HOS, HSO,  $H_2OS$ ,  $HSO_2$ ), para a variante V1.

Nº	H1S1	H2S1	S1O1	S1O2	H1S2	S1O3	H1O2S1	H1O1S1	H1S1O1	H2O1S1	H1S1O2
1	-	-	-	-	0,01	-	-	-	-	-	-
2	-	-	-	-	0,01	-	-	-	-	-	-
3	-	-	-	-	0,01	-	-	-	-	-	-
4	0,28	-0,08	-0,04	-	0,54	0,14	0,66	0,62	0,67	-0,05	-0,57
5	0,01	-	-	-	0,01	-	0,02	0,01	0,02	-	-
6	0,04	-0,02	-	-	0,08	0,01	0,08	0,08	0,09	-	-0,08
7	-0,07	0,04	0,01	-	-	-	-0,05	-0,07	-0,07	0,02	-
8	-	-	-	-	-0,14	-	-	-	-	-	-
9	-0,15	0,11	0,03	-	0,17	0,01	-	-0,05	-0,05	0,05	-0,15
10	-0,05	-	-0,01	-	-0,07	-0,05	-0,06	-0,06	-0,05	-0,06	-
11	-0,14	0,08	0,04	-	0,15	-	-0,03	-0,06	-0,06	0,06	-0,12
13	-0,05	-0,05	-	-	-0,10	0,02	0,40	0,55	0,54	-	0,03
14	-	-	-	-	-0,02	-0,01	-0,01	-	-	-0,02	-
15	-0,05	-0,10	-0,02	-	-0,23	0,01	-0,10	-0,12	-0,13	-0,07	0,09
16	-0,08	-0,09	-0,04	-	-	0,02	-0,07	-0,08	-0,09	-0,06	0,06
17	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
19	-	-	-	-	-0,26	-	-	-	-	-	-
20	0,05	0,09	0,04	-	-	-0,03	0,04	0,05	0,07	0,04	-0,06
21	-	-	-	-	-0,11	-	-	-	-	-	-
23	-	-	-	-	-0,02	-	-	-	-	-	-
45	-	-	-	-	-	-	0,02	0,03	0,03	-	-
47	0,05	0,05	-0,14	-	-0,09	-0,20	-0,08	0,03	0,05	-0,17	0,03
48	-0,45	-0,85	-0,32	-	-1,77	0,22	-0,79	-0,99	-1,10	-0,47	0,67
49	-0,08	-0,17	0,04	-	-0,46	-0,07	-0,21	-0,19	-0,20	-0,20	0,16
52	-	-	-	-	0,02	-	-0,27	-0,37	-0,37	-	-
55	-	-	-	-	-	-	-0,07	-0,09	-0,09	-	-
57	-	-	-	-	-	-	-0,02	-0,02	-0,02	-	-
59	-	-	-	-	-	-	-	0,21	-	-	-
60	-	-	-	-	-	-	-0,03	-0,04	-0,03	-	-
62	-	-	-	-	-	-	0,66	-0,04	-0,04	-	-
63	-	-	-	-	-	-	-0,05	-0,07	-0,07	-	-
64	-	-	-	-	-	-	-0,02	-0,03	-0,03	-	-
65	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0,02	-
66	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-0,04	-
69	-	-	-	-	-	-	0,13	-	-	-	-
71	-	-	-	-	-	-	-0,74	-	-	-	-
73	-	-	-	-	-	-	-0,07	-	-	-	-
77	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-0,03
78	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0,04
90	-0,12	0,05	0,03	-	0,13	0,01	-0,02	-0,09	-0,05	0,05	-0,08
91	-0,04	-0,04	-	-	-0,09	-	-0,05	-0,06	-0,06	-0,03	0,03
94	-0,12	-0,21	-0,02	-	-0,36	0,13	-0,15	-0,24	-0,27	-0,04	0,14
95	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0,01
96	-	-0,06	0,06	-	-	-0,07	-0,11	-0,07	-0,07	0,07	0,05
97	0,06	-0,10	-0,04	-	-0,09	0,05	0,04	-0,05	0,04	-0,04	0,12
111	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
113	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
114	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
116	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-

Obs.: Na Tab. 5b os valores onde  $|R_{is}| < 10^{-2}$ , são substituídos por “-”.



## 6. Conclusões

1. No resultado da comparação com os dados do código “Aurora” foi verificada uma nova técnica de cálculo dos coeficientes de sensibilidade (código RIS1). A comparação mostrou uma boa concordância entre os coeficientes determinados por ambos os códigos.
2. Para o meio reagente complexo “S + O + H + (N)” foram determinados pelo código RIS1 os coeficientes  $R_{is}$  e  $R_{T_s}$  (nas condições do reator de mistura ideal) em amplos intervalos de temperatura e tempo de permanência. Os cálculos mostraram alta segurança no cômputo dos coeficientes de sensibilidade.
3. No mecanismo de combustão das espécies do enxofre, do ponto vista da análise de sensibilidade, têm-se três tipos de reações:
  - com pequenos valores  $R_{is}$  e altas velocidades de reações  $W_s^+$  ou  $W_s^-$ , onde as constantes de velocidade podem ser determinadas com erros notáveis;
  - com pequenos valores  $R_{is}$  e baixas velocidades de reações  $W_s^+$  ou  $W_s^-$ , onde as constantes de velocidade também podem ser determinadas com erros notáveis e estas reações podem ser eliminadas do mecanismo;
  - com consideráveis valores  $R_{is}$  (reações críticas), onde as constantes de velocidade necessitam serem determinadas com alta precisão, pois essas reações influem essencialmente nas características da combustão.

## 7. Referências

- Alemassov, V. E., Dregalin, A. F. e Tishin, A. P., 1971, “Propriedades Termodinâmicas e Termofísicas dos Produtos de Combustão”, Guia, Vol. 1, VINITI, Moscou, Rússia.
- Alzueta, M. U., Bilbao, R. e Glarborg, P., 2001, “Inhibition and Sensitization of Fuel Oxidation by SO<sub>2</sub>”, Combustion and Flame, Vol. 127, pp. 2234-2251.
- Brown, R. C., Kolb, C. E., Yetter, R. A. e Dryer, F. L., 1995, “Kinetic Modelling and Sensitivity Analysis for B/H/O/C/F Combination Systems”, Combustion and Flame, Vol. 101, pp. 221-238.
- Durigon, A., Abdulline, A. L., Krioukov, V. G. e Iskhakova, R. L., 2003, “Method of Spline-integration: Application in Chemical Kinetic Equations”, Proceedings of the 17th Brazilian Congress of Mechanical Engineering, Vol.1, São Paulo, Brazil.
- Glarborg, P., Miller, J. A. e Kee, R. J., 1986, “Kinetic Modeling and Sensitivity Analysis of Nitrogen Oxide Formation in Well-Stirred Reactors”, Combustion and Flame, Vol. 65, pp. 177-202.
- Gordon, S., McBride, B. J., 1971, “NASA SP-273 Computer Program for Calculation of Complex Chemical Equilibrium Compositions, Rocket Performance, Incident and Reflected Shocks and Chapman-Jouguet Detonations”, NASA, Washington, 245 p.
- Kee, R. J., Rupley, F. M., Meeks, E. e Miller, J. A., 2000, “CHEMKIN: A Software Package for the Analysis of Gas-Phase Chemical and Plasma Kinetics”, Sandia National Laboratories, Report SAND96-8216, CA.
- Krioukov, V. G., Naoumov, V. I., Abdullin, A. L., Demin, A. V. e Trinos, T. V., 1997, “Combustion and Flow in Propulsion and Power Generation Systems: Modeling, Energy, Ecology”, Yanus, Moscow, Rússia, 304 p.
- “LEEDS Reaction Kinetics Database”, 2005, School of Chemistry, University of Leeds.
- Oran, E. S. e Boris, J. P., 1987, “Numerical Simulation of Reactive Flow”, Ed. Elsevier, New York.
- Rabitz, H., Kramer, M. e Dacol, D., 1983, “Sensitivity Analysis in Chemical Kinetics”, Ann. Rev. Phys. Chem., Vol. 34, pp. 419-461.
- Spilimbergo, A. P., Krioukov, V. G. e Iskhakova, R. L., 2005, “Análise de Sensibilidade do Mecanismo de Reações Usando o Modelo do Reator de Mistura Ideal”, Proceedings of XXVI CILAMCE, Guarapari - ES, Brasil.

## NUMERICAL RESEARCH OF A REACTING MIXTURE WITH USE OF THE SENSITIVITY ANALYSIS

### A. P. Spilimbergo

Regional University of Northwest of the State of Rio Grande do Sul – UNIJUÍ – Department of Physics, Statistics and Mathematics, Mail Box 560 – Ijuí, RS – 98700-000  
[patspi@unijui.tche.br](mailto:patspi@unijui.tche.br)

### V. G. Krioukov

Kazan State University – UETK – Department of Engines of Automobiles, Mail Box 420111, K. Marx Street, 10 - Kazan, Russia  
[vkrujkov@kai.ru](mailto:vkrujkov@kai.ru)

**M. V. Nikandrova**

Kazan State University – UETK – Department of Engines of Automobiles, Mail Box 420111, K. Marx Street, 10 - Kazan, Rússia

[magnolia11@mail.ru](mailto:magnolia11@mail.ru)

**Abstract.** The problem of the sensitivity analysis at combustion modeling processes in reactor of ideal mixture is considered. The reagent gaseous medium is considered at the level of the chemical kinetics. In the research a new technique was used for the analytical calculation of the sensitivity coefficients in the code RIS1. In paper is presented the comparison of sensitivity coefficients with the data of the “Aurora” code of a package CHEMKIN and a satisfactory agreement was observed among the codes. It also was considered complex reacting system  $S + O + H + (N)$  and was established, that mechanism of reactions can be classified in 3 groups: two groups with small sensitivity coefficients (with high and low reactions rate) and one group of “critical” reactions. Besides, is noted safety in the analytical calculation these coefficients.

**Keywords:** Combustion, Chemical Kinetics, Mathematical Modeling, Sensitivity Analysis

## INFLUENCE OF CONCENTRATION AND PARTICLE SIZE ON THE EXPLOSIBILITY OF AIR PINE BARK DUST MIXTURES

**Olga Semenova**

Instituto de Engenharia Mecânica e Gestão Industrial (INEGI), Rua do Barroco, 174, 4465-591 Leça do Balio, Portugal  
[olgasem@hotmail.com](mailto:olgasem@hotmail.com)

**Rosa Pilão**

Centro de Investigação de Engenharia Aplicada (CIEA), Instituto Superior de Engenharia do Porto, Rua Dr. António Bernardino de Almeida, 341 4200-072 Porto, Portugal.  
[rmp@isep.ipp.pt](mailto:rmp@isep.ipp.pt)

**Carlos Pinho**

Departamento de Engenharia Mecânica e Gestão Industrial (DEMEGI), Faculdade de Engenharia da Universidade do Porto, Rua Dr. Roberto Frias s/n, 4200-465 Porto, Portugal.  
[ctp@fe.up.pt](mailto:ctp@fe.up.pt)

**Abstract.** *Studies on the explosibility and ignition characteristics of air and pine bark dust mixtures were carried out in a semi-spherical 22.7 L reactor using 2500 J pyrotechnic ignitors. The uniformity of the dispersion of the pine bark dust particles inside the chamber was detected through optical probes and during the explosion the pressure evolution inside the reactor was measured. Four particle sizes with 51.3  $\mu\text{m}$ , 88.4  $\mu\text{m}$ , 104.2  $\mu\text{m}$  and 180.2  $\mu\text{m}$  of mass median diameters were tested and the covered dust cloud concentration went from 60  $\text{g}/\text{m}^3$  to 600  $\text{g}/\text{m}^3$ . Measured explosions parameters included minimum explosible concentration, maximum explosion pressure and maximum rate of pressure rise.*

*The effect of dust particle size on the explosibility was evaluated and it was found that minimum explosible concentration was relatively independent of particle size below 100  $\mu\text{m}$ . The highest explosion pressures and rates of pressure rise were detected for the finest tested sizes.*

*The limitations on the devolatilization rate of the solid particles are the rate controlling phenomena at high dust loadings and large particle sizes.*

**Keywords.** *Dust explosion, explosion development, two-step dust explosion, pine bark*

### 1. Introduction

Process industries which have in some steps of their production cycles the presence of dusts are risky institutions as far as fire and explosion hazardous are concerned. As such, the knowledge of the menace of the materials involved in the production cycle is fundamental for the industrial safety of the plants. One industrial sector highly dependent on the handling of organic dusts is the wood and wood derivatives segment.

An explosion can be defined as propagation, in a closed vessel, of a flame in a pre mixture of suspended dust in a gaseous oxidant such as air. During the explosion there is a rapid and abrupt energy release which produces a pressure wave. The resulting rapid oxidation of the fuel dust leads to a rapid increase of the overall temperature and pressure. The combustion properties of a dust depend on its chemical and physical characteristics, especially on the particle size distribution (Eckhoff, 1997).

For a two phase mixture of dust in air, the perfect mixture is impossible, and at least one additional variable is required in order to define composition on the macroscopic scale, which determines its combustion behavior. That additional variable is the particle diameter. In other words, a given amount of solid material, suspended in air inside a container presents no explosion hazard; however, the same amount when pulverized into a fine dust of less than 100  $\mu\text{m}$  in diameter and uniformly dispersed in air, inside that same volume, may become an explosive mixture. The thermodynamic states of those two systems are essentially identical, but their dynamic behavior is vastly different. Thus, the state of the heterogeneous system is not uniquely defined by its macroscopic composition, temperature and pressure; the particle diameter is critical in defining the fuel concentration on the microscopic scale that determines its dynamic combustion behavior (Hertzberg et al., 1986).

This paper concerns a small part of the study and definition of explosion characteristics of air pine bark dust mixtures and is oriented towards the analysis of the influence of particle median diameter on the minimum explosible concentration, on the maximum explosion pressure and on the maximum rate of pressure rise, for dust explosions at initial normal pressure and temperature.

The chemical composition of pine bark (*Pinus pinaster*) was investigated by Fradinho et al. (2002). Pine bark is being composed mainly by lignin (33.2%), tannins (10 % w/w), polysaccharides (39 % w/w), formed essentially by cellulose and hemicellulose, 17 % (w/w) of other components (like ethanol, water and dichloromethane) and 1% (w/w) of ashes.

## 2. Experimental set-up

Pine bark dust explosibility results discussed in this paper were obtained in a near-spherical 22.7 L test chamber, as shown in Fig. (1). This chamber is made of stainless steel and is a standard laboratory test chamber (ASTM E1515; ASTM E1226), used extensively for dust explosions studies of carbonaceous and elemental dusts (Hertzberg et al., 1986; Cashdollar et al., 1988 and Cashdollar, 1994). Its dimensional characteristics were provided by the Pittsburg Research Laboratory formerly part of the US Bureau of Mines (USBM) and now at the National Institute for Occupational Safety and Health (NIOSH).

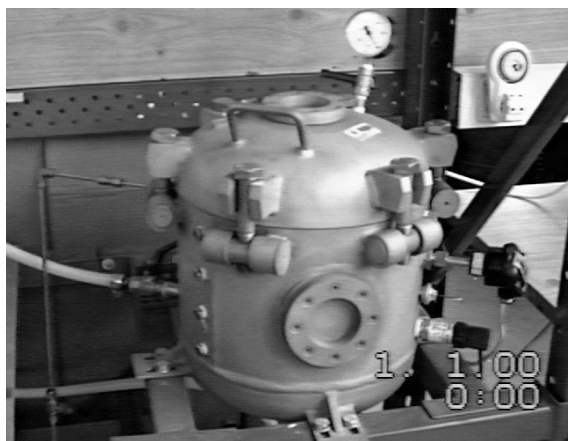


Figure 1. Semi-spherical test chamber of 22.7 L.

One optical dust probe (Conti et al., 1982 and Cashdollar et al., 1981) was used to evaluate the uniformity of the dust dispersion by measuring the light transmission over a 38 mm path length through the dust cloud.

The evolution of the explosion pressure and rate of pressure rise during the explosion was measured with a pressure transducer with internal diaphragm for absolute pressures in the range of 0-10 bar, make IMT, model 3245, with an accuracy of 0.5 % (F.S.), reproducibility  $\leq \pm 0.05\%$  (F.S.) and a response time  $\leq 1$  ms (within 10 to 90 % of F.S.).

The data acquisition system was composed by a personal computer of 66 MHz inside of which it was installed a data acquisition board from Keithley-Metrabyte, model DAS-1601. The experimental dust concentration reported for the chamber is the mass of dust divided by the chamber volume.

## 3. Experimental procedure

After the dust batch and the ignition device have been placed in the chamber, the top lid is bolted on and the chamber is partially evacuated to an absolute pressure of 0.20 bar. Then, a short blast of dry air from a 16 L auxiliary dispersing tank with 0.3 seconds duration disperses the dust and raises the chamber pressure to about 1 bar. The ignitor, located in the centre of the reactor, is activated after an additional delay of 0.1 s resulting in a total ignition delay of 0.4 s, from the start of dispersion until ignition, as suggested by the standard test procedure (ASTM E1515; ASTM E1226). The ignition sources used were electrically activated pyrotechnic ignitors composed of 40% (w/w) zirconium, 30% (w/w) barium nitrate and 30% (w/w) barium peroxide and were supplied by Fr. Sobbe, from Germany. They deliver their energy in about 10 ms and when ignited they produce a dense cloud of very hot particles and little gas (Hertzberg et al., 1986a). The 2500 J ignitors by themselves produce a pressure rise of about 0.27 bar in the chamber, as verified in calibration and set up experiments (Pilão, 2002; Pilão et al. 2002a, 2002b, 2004, 2006).

## 4. Results

In order to study the overall explosibility characteristics of pine bark dust, tests were made over a range of concentrations that went up to  $800 \text{ g/m}^3$  for four different particle diameters. Experiments were carried out with pine bark particles of  $51.3 \mu\text{m}$ ,  $88.4 \mu\text{m}$ ,  $104.2 \mu\text{m}$  e  $180.2 \mu\text{m}$  particle diameters. Particles were screened with ASTM sieves and the particle sizes referred above are the mass median diameters obtained through LASER dispersion. From these tests, traces representing the evolution of explosion pressure as function of time are obtained.

### 4.1. Explosion development

The configuration of the traces of explosion pressure as function of time have shown that pine bark has a normal development of the explosion, with a typical profile of pressure time trace for near spherical flame propagation (Amyotte et al., 1989 and Hertzberg et al., 1987), only for the two smallest particle sizes ( $51.3 \mu\text{m}$  and  $88.4 \mu\text{m}$ ), while

a two-step flame propagation process, in the explosion development, was detected for the particles with 180.2  $\mu\text{m}$  of diameter. The transition between these two explosion processes occurred for the particles with 104.2  $\mu\text{m}$ .

Figure (2) has examples of the evolutions of explosion pressure and rate of pressure rise during the explosion of clouds with particle diameters of 51.3  $\mu\text{m}$ . The explosion pressure increases quickly with the explosion time and higher values are obtained for higher loaded dust concentration. The violence of the explosion, increase with the dust concentration. In this figure, the first 15 ms are concerned with the activation of the ignition source and the creation of an initial fire sphere, whose volume is dependent upon the energy of the ignition source used. This fire ball generates heat and assures the initial flame propagation. Then, the flame speed increases resulting in the rapid increase of pressure inside the reactor. The inhomogeneities in the concentration and dust particles distribution inside the reactor inevitably generate noncontiguous flame fronts, and propagation occurs in streaky filaments or patches of flame that follow those regions that have slightly higher dust concentrations (Hertzberg, 1986).

The results of the explosions obtained during the tests carried out with particles of 104.2  $\mu\text{m}$  do not have a systematic behavior. For some tests, carried out with concentrations near the lower flammability limit, an explosion development in two phases was observed. This two-step flame propagation process is characterized by the appearance of two ramps on the explosion pressure curve and two peaks in the rate of pressure rise curve, Fig. (3). The first step of this process, represented by the first pressure rise after ignition, is associated with small initial burning velocities and with the upward and horizontal direction of flame propagation, while the second step, represented by the subsequent pressure rise, is associated with downward flame propagation at a fast burning velocity (Linnett and Simpson., 1957 and Cashdollar et al., 2000). In Figure (3), results of explosions for clouds of particles of this size with dust concentration of 200  $\text{g}/\text{m}^3$  and 700  $\text{g}/\text{m}^3$  are presented. The explosion development carried out with suspension of 200  $\text{g}/\text{m}^3$  follows a two-step flame propagation process. In this test, the first 100 ms are concerned with the first phase of the process characterized by the first smooth pressure increase and the first peak in the rate of pressure raise trace. The second phase of the process was initially developed at constant rate of pressure rise after which there is a further increase on the flame speed causing a second rise of the explosion pressure and the appearance of the second peak in the trace of the rate of pressure rise. This flame speed acceleration results from the compressing effect promoted by the burned gases from the first phase of the process (Cashdollar et al., 2000). This two-step behavior for the flame propagation process has the tendency to disappear with the rise of dust concentration. For the test with 700  $\text{g}/\text{m}^3$  no clear transition in the flame direction propagation, between ascending and descending displacement, was detected, as can be observed in Fig. (3).

In Figure (4) there are examples of results obtained for the particles with 180.2  $\mu\text{m}$ . The explosion development follows a two-step flame propagation process, for all tested dust concentrations. The traces of explosion pressure have two distinct zones of pressure increase and the traces of rate of pressure rise have two peaks with the second phase of the process characterized by higher flame propagation speeds, associated to the descending flame propagation.

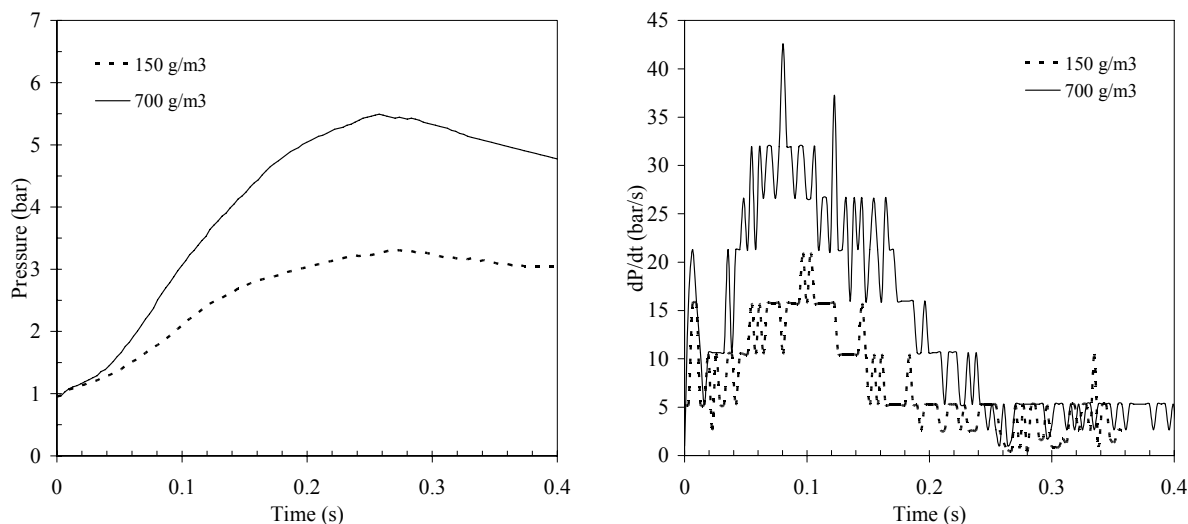


Figure 2. Effect of dust concentration, on the explosibility of bark dust particles, with 51.3  $\mu\text{m}$  of mass median diameter.

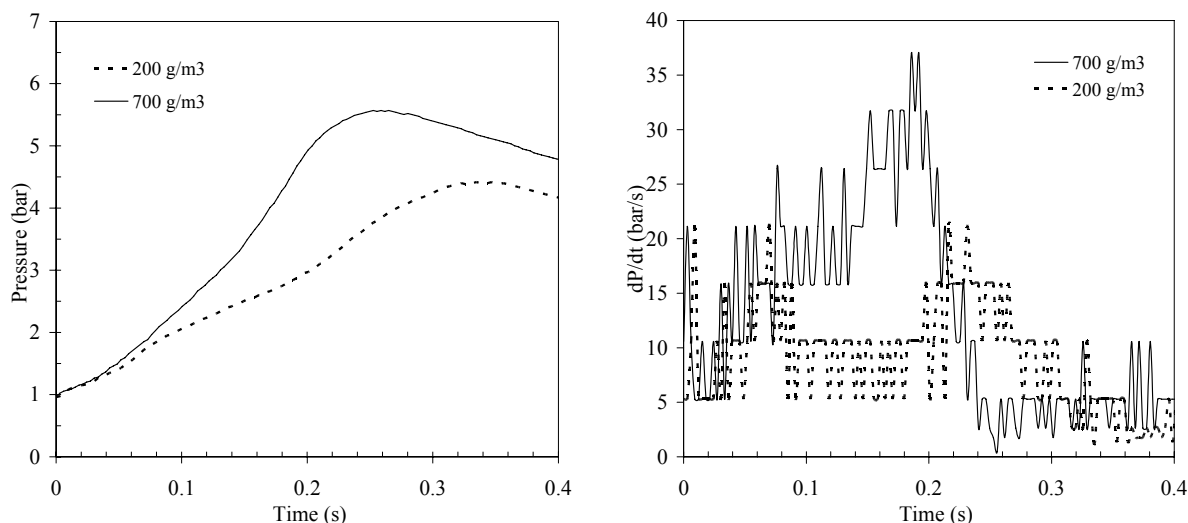


Figure 3. Effect of dust concentration, on the explosibility of bark dust particles, with 104.2 µm of mass median diameter.

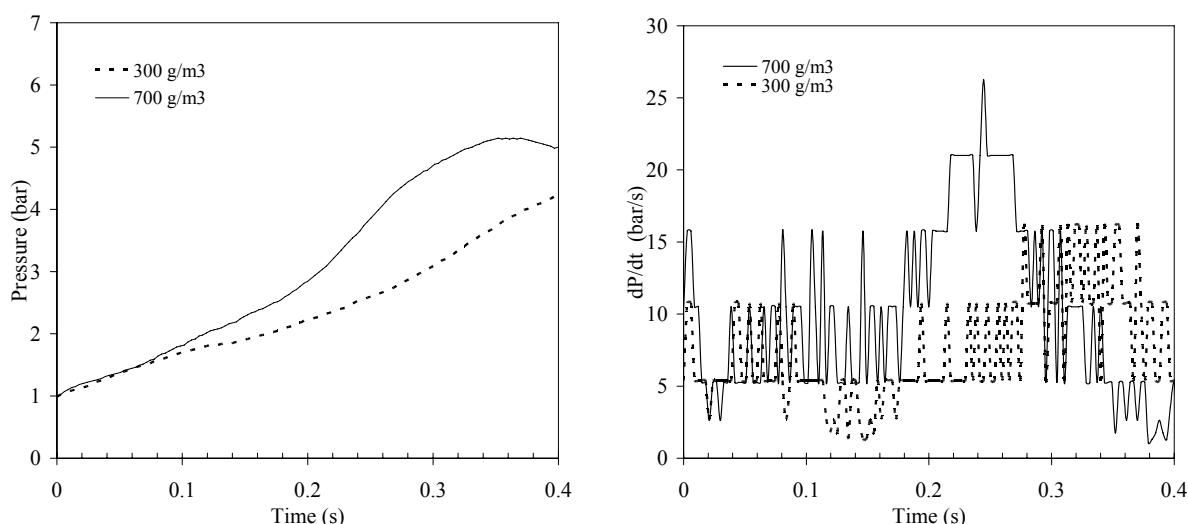


Figure 4. Effect of dust concentration, on the explosibility of bark dust particles, with 180.2 µm of mass median diameter.

#### 4. 2. Explosion parameters

The study of the explosibility of pine bark dust/air mixtures comprises the experimental determination of the minimum explosible dust concentration, the maximum explosion pressure and the maximum rate of pressure rise.

From the traces representing the evolution of explosion pressure as function of time, obtained during the experimental tests, the pressure ratio PR and the steepest slope of the rising portion of the curves (dP/dt) can be both represented as function of concentrations, for each one of the studied particle sizes.

PR is defined as  $PR = (P_{max} - \Delta P_{ign}) / P_i$  where  $\Delta P_{ign}$  is the pressure rise promoted by the activation of the ignition source,  $P_i$  is the initial pressure in the reactor and  $P_{max}$  is the peak of the traces.

The criteria for significant flame propagation were the same as used previously at USBM (Hertzberg et al., 1986b; Cashdollar et al., 1992 and ASTM E1515). These criteria are that the maximum explosion pressure  $PR \geq 2$  bar and that the volume normalized rate of pressure rise  $(dP/dt)V^{1/3} \geq 1.5$  bar.m/s. Applying these criteria to the obtained results, the minimum explosible dust concentration can be determined for each one of the tested particle sizes. Maximum values of explosion pressure PR and rate of pressure rise dP/dt are also obtained from these traces.

Data showing the effect of particle size on the minimum explosible concentration,  $C_{min}$ , of pine bark are shown in Fig. (5), together, with the information concerning cork dust and Pittsburg coal dust.

Figure (5) shows that for fine particles of pine bark, with mass median diameters smaller than 100 µm, the minimum explosible dust concentration is relatively independent of particle size assuming the value of 90 g/m<sup>3</sup>. Above this diameter, defined as the characteristic diameter, the size dependence appears.

According to the flame propagation mechanism proposed by Hertzberg et al. (1982) and Hertzberg et al. (1990), the flame propagation is a sequential process starting by the devolatilization of the particles followed by the mixture of the emitted volatiles with the air, and finally by the combustion, in the gaseous phase, of the resultant air combustible mixture. This theory stated that the reaction time of an explosion is composed by two essential components: the devolatilization time of the particles and the combustion time. The time of devolatilization depends on the particle size, while the combustion time is independent of the dimension of the particles, because the combustion process is a gaseous phase phenomenon. This means that, a process controlled by the reaction rate is independent of the size of the particles, while a process controlled by the devolatilization rate is dependent on the dimensions of the particles. The flat region of the curves in Fig. (5) means that, for particles with sizes smaller than the characteristic diameter, the explosion process is controlled by the chemical reaction rate. However, in the case of pine bark dust, this flat region does not correspond to situations of complete devolatilization of the particles within the flame front, as is commonly admitted for dust of small sizes, (Hertzberg *et al.* 1986b). In fact, it was observed that a significant amount of particles remains unburned in the final of the explosion tests, which can be confirmed by the evolution of the burning efficiency, defined as  $\eta = (m_i - m_f) / m_i$ . In the previous definition  $m_i$  and  $m_f$  are the initial and the final mass of pine bark dust batch. The results have shown that the combustion efficiency increases with the rise of the dust concentration until it attains the maximum value of 67 %. The stabilization of this value is related with the oxygen content inside the reactor, which imposes the maximum burnable volatile content.

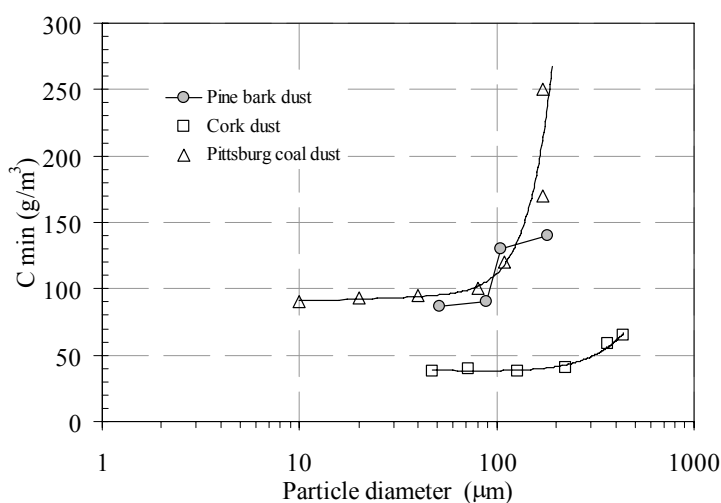


Figure 5. Effect of particle median diameter on minimum explosion concentration of pine bark dust air mixtures.

In conclusion, the flat region of the curve obtained for pine bark dust in Fig. (5) represents situations where the quantity of the volatiles generated is independent of the dimension of the particles and the explosion occurs, if in gaseous phase it will be present a minimum necessary volatile content. For larger particles, only the particle surface is de-volatilized and consequently a higher mass of dust must be loaded to reach, in the gaseous phase, the minimum dust concentration.

The devolatilization of the particles can be confirmed by their observation before and after explosion. Figure (6) shows scanning electron microscope (SEM) photomicrographs of pine bark dust particles with 88.4 µm mass median diameter before and after explosions of a dust cloud with a concentration of 400 g/m³. This figure shows the morphological changes resulting from dust explosions, and it is clear that the structure of the surface of the residues is strongly altered, when compared to the unburned particle. Some particles form cenospheres, and the volatiles are emitted through the holes seen in the residues. These photomicrographs provide evidence that the pyrolysis process proceeds like a devolatilization wave front that is initiated at the exposed surface and then propagates towards the particle interior. This behavior confirms that the flame propagation process during the pine bark dust explosion is preceded by the devolatilization of the particles (Hertzberg et al., 1982 and Hertzberg et al., 1990).

In Figure (7) maximum explosion pressure and maximum rate of pressure rise, as a function of the pine bark dust particle size, are presented. The two curves show that the maximum pressure and rate of pressure rise are found at the smallest tested size and have the maximum values of 5.5 bar and 42 bar/s respectively. Then, with increasing particle size, the pressure values decline slowly, whereas the decrease of the rate of pressure raise is stronger.

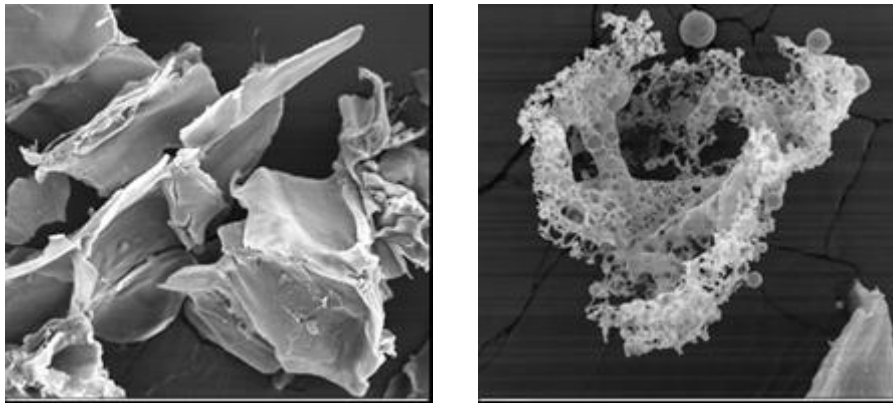


Figure 6. Scanning electron microscope (SEM) photomicrographs of pine bark dust particles of 88.4  $\mu\text{m}$  diameters before and after explosions for a dust cloud concentration of 400  $\text{g}/\text{m}^3$ .

The evolution of the maximum explosion pressure curve with the increase of particle diameter is an indication that there are not significant changes in the volatile concentration of gas phase. At elevated concentrations, at which are obtained the maximum explosion pressure and the maximum rate of pressure rise, the burning velocity is high but the depth of penetration of the combustion wave, which varies inversely with the burning velocity  $S_u$ , decreases and becomes less than the average particle radius (Cashdollar et al., 1988 and Smoot et al., 1976). The excess undevolatilized mass fraction of pine bark plus the residual char, at the higher dust loadings, makes no contribution to the flame propagation process; it begins to absorb a large fraction of the heating flux of the flames (Hertzberg et al., 1982) and the effective heating flux, that drives the fresh pyrolysis wave ahead of the flame front, is diminished. As the particle diameter increases still further, the pyrolysis wave progresses more slowly into each particle, and this effect is accentuated with the increase of particle diameter. As a result, there is a smaller contribution of volatile from each particle that is compensated for by the higher surface area of the particles.

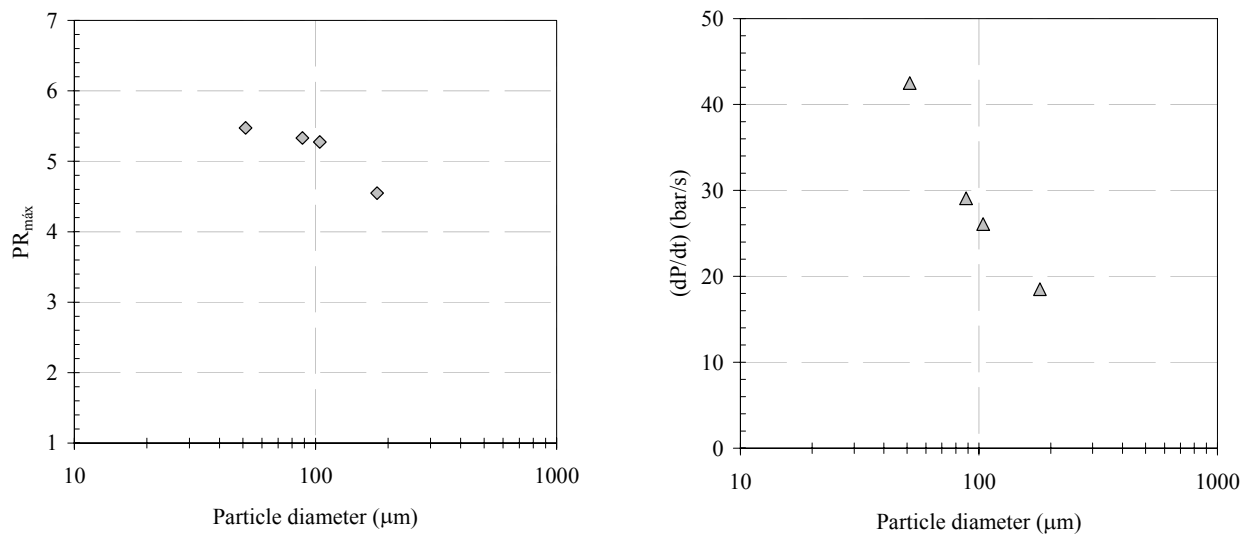


Figure 7. Effect of particle diameter on maximum explosion pressure and maximum rate of pressure rise, for pine bark dust air mixtures.

The strong dependency of the maximum rate of pressure rise relatively to the particle diameter is caused by the accentuated diminution on the velocity of the devolatilization process, when the particle diameter increases. The burning velocity  $S_u$  is strongly dependent on the rate of volatiles generation and decreases with the reduction of the progression of the devolatilization wave through the particles. As the maximum rate of pressure rise is proportional to  $S_u$ ,  $dP/dt$  diminishes drastically with the increase of the particle diameter, as is shown by several models (Bartknecht, 1981 and Nagy and Verakis, 1983).



## 5. Conclusions

Particle size and dust concentration have an important effect on the explosibility behavior of pine bark dust.

Small particles of pine bark dust follow a near spherical flame propagation while larger particles follow a two-step flame propagation process.

The results obtained show that finest particles produce more violent explosions than the larger ones, and the evolution of the explosion parameters with the particle diameter show that the explosion pressure is essential a thermodynamic component, while the maximum rate of pressure rise has a strong kinetic component.

The explosion of pine bark dust follows the propagation flame mechanism proposed by Cashdollar and Hertzberg. In these theories, the flame propagation in the gaseous phase combustion is preceded by the devolatilization process of the dust particles. For the smaller particles, the combustion process is controlled by the combustion velocity, whereas for the bigger particles, the combustion process is controlled by the devolatilization rate.

## 6. References

- Amyotte, P. R., Chippett, S. and Pegg, M. J., 1989, "Effect of turbulence on dust explosion", *Prog. Energy Combust. Sci.*, Vol. 14, pp. 293-310.
- ASTM E1515-96, 1996, "Standard Test Method for Minimum Explosible Concentration of Combustible Dusts", American Society for Testing and Materials, Coshohocken, PA.
- ASTM E1226-94, 1994, "Standard Test Method for Pressure and Rate of Pressure Rise for Combustible Dusts", American Society for Testing and Materials, Coshohocken, PA.
- Bartknecht, W., 1981, "Explosions: Course Prevention Protection", 2<sup>a</sup> Ed., Springer.
- Cashdollar, K. L., Liebman, I. and Conti, R. S., 1981, "Three Bu-reau of Mines Optical Dust Probes", Report of Investigations 8542.
- Cashdollar, K. L., Hertzberg, M. and Zlochower, I. A., 1988, "Ef-fect of Volatility on Dust Flammability Limits for Coals, Gilsonite and Polyethylene", Twenty-Second Symposium (International) on Combustion, The Combustion Institute, pp. 1757-1765.
- Cashdollar, K. L., 1994, "Flammability of Metals and Other Elemental Dust Clouds", *Process Safety Progress*, Vol. 13, No. 3, pp. 139-145.
- Cashdollar, K. L., 1996, "Coal Dust Explosibility", *J. Loss Prev. Process Ind.*, Vol. 9, No 1, pp. 65-76.
- Cashdollar, K.L., Zlochower, I.A., Green, G.M., Thomas, R.A. and Hertzberg, M., 2000, "Flammability of Methane, Propane, and Hidrogen Gases", *J. of Loss Pev. In Process Ind.*, Vol 13, pp. 327-340.
- Conti, R. S., Cashdollar, K. L. and Liebman, I., 1982, "Improved optical probe for monitoring dust explosions", *Rev. Sci. Instrum*, Vol 53, No. 3.
- Eckhoff, 1997, "Dust Explosions in the process industries", 2<sup>a</sup> Ed., Butterworth-Heineman.
- Fradinho, D.M., Pascoal Neto, C., Evtuguin, D., Jorge, F.C., Irle, M.A., Gil, M. and Pedrosa de Jesus, J., 2002, "Chemical characterisation of bark and of alkaline bark extracts from maritime pine grown in Portugal", *Industrial Crops and Products*, Vol. 16, pp. 23-32.
- Hertzberg, M., Cashdollar, K. L., Daniel, L. Ng. and Conti, R.S., 1982, "Domains of Flammability and Thermal Ignitability for Pulverized Coals and Other Dusts. Particle Size Dependencies and Microscopic Residue Analyses", Nineteenth Symposium (International) on Combustion, The Combustion Institute, pp. 1169-1180.
- Hertzberg, M., Cashdollar, K. L. and Zlochower, I. A., 1986, "Flammability Limit Measurements for Dusts and Gases. Ignition Energy requirements and Pressure dependencies", Twenty-First Symposium (International) on Combustion, The Combustion Institute, pp. 303-313.
- Hertzberg, M. and Cashdollar, K. L., 1987, "Introduction to dust explosions, In Cashdollar and Hertzberg (Eds.), *Industrial Dust Explosion*. ASTM STP 958, pp. 5-32.
- Hertzberg, M. and Zlochower, I. A., 1990, "Devolatilization Rates and Interparticle Wave Structures During the Combustion of Pulverized Coals and Polymethylmethacrylate", Twenty-Third Symposium (International) on Combustion, The Combustion Institute, pp. 1247-1255.
- Linnett, J.W. and Simpson, C.J.S.M., 1957, "Limits of Flammability", Sixty Symposium (International) on Combustion, The Combustion Institute, pp. 20-27.
- Nagy, J. and Verakis, H. C., 1983, "Development and Control of Dust Explosions", Marcel Dekker.
- Pilão, R., 2002, Studies on the explosions of cork dust (in Portuguese), PhD Dissertation, Faculty of Engineering, University of Oporto, Portugal
- Pilão, R., Ramalho, E. and Pinho, C., 2002a, "Influence of particle size on the explosibility of air/cork dust mixtures", *Proceedings of 9th Brazilian Congress of Thermal Engineering and Sciences*, (CIT02-0689.pdf), 15<sup>th</sup> to 18<sup>th</sup> October, Caxambu, MG, Brazil.
- Pilão, R., Ramalho, E. and Pinho, C., 2002b, "Influence of Initial Pressure on Cork Dust/Air Mixtures Explosibility", *J. Phys. IV France*, V. 12, pp 7.53-7.63.
- Pilão, R., Ramalho, E. and Pinho, C., 2004, "Influence of Initial Pressure on Cork Dust/Air Mixtures Explosibility", *Journal of Loss Prev. in the Process Industries*, N. 17, pp 87-96.

- Pilão, R., Ramalho, E. and Pinho, C., 2006, “Overall characterization of cork dust explosion”, *Journal of Hazardous Materials*, B 133, pp 183-195.
- Smoot, L.D., Horton, M. D. and Williams, G., 1976, “Propagation of Laminar Pulverized Coal-air Flames”, *Sixteenth Symposium (International) on Combustion*, The Combustion Institute, pp. 375-387.

## FORMAÇÃO DE NO<sub>x</sub> EM FORNOS ROTATIVOS DE PRODUÇÃO DE CLÍNQUER DA INDÚSTRIA DO CIMENTO

### Valdir Tesche Signoretti

Universidade Federal de Itajubá Campus Prof. José Rodrigues Seabra, Av. BPS, 1303 –CEP: 37500-903 - Itajubá– MG – Brasil  
Telefone: (0xx-35) 3629-1000 – Fax: (0xx-35)3622-3596  
E-mail: valdirsg@unifei.edu.br

### Rogério José da Silva

Universidade Federal de Itajubá Campus Prof. José Rodrigues Seabra, Av. BPS, 1303 –CEP: 37500-903 - Itajubá– MG – Brasil  
Telefone: (0xx-35) 3629-1000 – Fax: (0xx-35)3622-3596  
Email: rogeriojs@unifei.edu.br

**Resumo.** Este trabalho estima a concentração do poluente NO<sub>x</sub> gerado no processo de combustão do coque de petróleo e pneus em fornos rotativos para produção de clínquer na indústria de cimento. Utilizando uma mistura de coque de petróleo e pneus no processo de queima, serão avaliadas as concentrações de NO<sub>x</sub> e de CO em fornos dotados de precalcinador com ar terciário. Serão analisadas as emissões neste tipo de instalação considerando ainda a combustão escalonada como forma de redução das emissões de NO<sub>x</sub>. O modelo proposto fundamenta-se no conhecimento das concentrações das espécies químicas envolvidas no equilíbrio químico e também no conhecimento da cinética das reações de formação de NO<sub>x</sub> e de CO no processo de combustão. Também é feito neste trabalho uma revisão sobre o NO<sub>x</sub>, SO<sub>x</sub> e CO, abordando questões relacionadas a sua formação e apresentando as principais tecnologias de controle destes poluentes utilizadas na indústria cimenteira.

*Palavras chave:* NO<sub>x</sub>, SO<sub>x</sub>, combustão, fornos rotativos, indústria do cimento

### 1. Introdução

O clínquer, principal constituinte do cimento, é produzido por transformação térmica a elevada temperatura em fornos rotativos, a partir de uma mistura de material rochoso contendo aproximadamente 80% de carbonato de cálcio (CaCO<sub>3</sub>), 15% de dióxido de silício (SiO<sub>2</sub>), 3% de óxido de alumínio (Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>) e quantidades menores de outros constituintes, como o ferro, o enxofre, etc. Estes materiais são normalmente extraídos em pedreiras de calcário, ou margas, localizadas nas proximidades dos fornos de produção do clínquer.

Existem basicamente dois tipos de processos de produção de clínquer, o processo por via úmida, e processo por via seca. No processo por via úmida, a carga do forno rotativo é uma pasta com, aproximadamente, 40 % de água; no processo por via seca, a carga é seca ou com baixíssima porcentagem de água. O processo por via úmida tem sido pouco utilizado nos dias atuais, devido ao maior consumo energético necessário para a evaporação da umidade na matéria-prima. No entanto, ambos os processos, passam pelas seguintes operações unitárias: etapa de moagem, mistura e aquecimento das matérias-primas – calcário, argila e outros materiais contendo silício, alumínio e óxidos de ferro – a aproximadamente 1450 °C para formar clínquer, que é, então, resfriado rapidamente e misturado ao gesso para formar o cimento.

O sistema de produção de cimento necessita de uma grande quantidade de energia térmica sendo suprida pela queima de combustíveis fósseis, sendo os principais o carvão mineral, óleo combustível, gás natural. A substituição de parte dos combustíveis tradicionais por combustíveis alternativos derivados de resíduos industriais na indústria cimenteira mundial, tem chamado muita atenção da comunidade científica e industriais do setor, pelas contribuições que se verificam. A utilização de combustíveis alternativos além de vantagens econômicas, pela redução de custos, pode se ressaltar o fato de que a maioria dos subprodutos sólidos resultantes da queima acabam incorporados ao clínquer, minimizando as suas emissões.

A indústria cimenteira pode apresentar altas taxas de emissões de NO<sub>x</sub> e SO<sub>x</sub> nos gases de exaustão dos fornos rotativos sob determinadas condições. O grau dessas emissões depende do tipo de combustível utilizado e do processo produtivo (Silva, 1994). As altas temperaturas necessárias ao processo de produção do clínquer favorecem a formação de NO<sub>x</sub>. Por sua vez, as emissões de SO<sub>x</sub> estão associadas à presença de enxofre nas matérias-primas e no combustível utilizado no processo de queima. As emissões de SO<sub>x</sub> nos fornos para produção de clínquer na indústria do cimento consistem principalmente de SO<sub>2</sub>.

Este trabalho apresenta uma revisão sobre a formação e as principais tecnologias de controle dos poluentes NO<sub>x</sub>, SO<sub>x</sub> e de CO nos fornos de produção de clínquer. Propõe uma modelagem para o cálculo da concentração do poluente NO<sub>x</sub> gerado no processo de combustão do coque de petróleo e pneus em fornos de produção de clínquer, utilizando o equilíbrio e a cinética química das reações envolvidas, assim como, avalia a contribuição da combustão escalonada pela geração de CO no processo de queima como forma de redução da formação do NO<sub>x</sub>.

### 1.1 Formação e controle das emissões de NO<sub>x</sub>

O óxido de nitrogênio é formado durante a combustão, onde há a formação de NO térmico, a partir da reação entre o nitrogênio atmosférico e o oxigênio atômico, em temperaturas acima de 1500 °C (Hill e Smoot, 2000), bem como, a partir do nitrogênio contido no combustível (NO<sub>comb</sub>), o qual pode ocorrer mesmo em temperaturas relativamente baixas. O NO térmico é a principal rota do mecanismo de formação das emissões de NO<sub>x</sub> na fabricação do cimento, devido às altas temperaturas envolvidas na queima ou nas etapas de formação do clínquer, juntamente com a atmosfera oxidante no forno, contribuindo assim para a formação de grande quantidade de NO<sub>x</sub>.

Nas zonas de baixa temperatura do forno, ocorre a oxidação do NO em NO<sub>2</sub>, contudo, o NO<sub>2</sub> normalmente aparece em porcentagens menores que 10% do NO<sub>x</sub> emitido por um sistema de exaustão de um forno rotativo (U.S. EPA, 2000). Altas temperaturas e alta concentração de O<sub>2</sub> são fatores que favorecem a formação do NO térmico e prevenir estes fatores é basicamente a melhor tecnologia de controle. Entre os fatores que influenciam a formação do NO do combustível estão: a geometria do queimador, técnicas de contato entre o combustível e o ar, altas taxas de misturas, concentração de nitrogênio no combustível, ritmo de volatilização e queima do combustível e temperatura da fase gasosa.

Os fatores que determinam a concentração de NO nos gases de combustão do forno de produção de clínquer são: a temperatura de chama, o tipo de chama, a relação de excesso de ar na combustão e o tempo de residência do gás e do material na zona de queima em altas temperaturas.

As principais tecnologias de controle das emissões de NO<sub>x</sub> estão apresentadas na Tab.1.

Tabela 1 - Técnicas de controle de NO<sub>x</sub> aplicáveis aos fornos da indústria do cimento.

Técnica	Sistema de Forno Aplicabilidade	Eficiência de Redução	Emissão Relatada	
			mg/Nm <sup>3</sup> <sup>a</sup>	kg/ton <sup>b</sup>
Resfriamento da chama	todos	0 a 50%	400	0,8
Queimador de baixa emissão de NO <sub>x</sub> (LNB)	todos	0 a 30%	-	-
Combustão escalonada ou em etapas	Preaquecedor e Precalcinador	10 a 50%	< 500 a 1000	< 1,0 a 2,0
Redução seletiva não catalítica (SNCR)	Preaquecedor e Precalcinador	10 a 85%	200 a 800	0,4 a 1,6
Redução catalítica seletiva (SCR) Apenas para planta piloto	Possivelmente todos	85 a 95%	100 a 200	0,2 a 0,4

<sup>a</sup> Normalmente referido a média diária, gás seco 273 K, 101,3 kPa e 10% de O<sub>2</sub>.

<sup>b</sup> kg/ton de clínquer é baseado em 2000 m<sup>3</sup>/ ton de clínquer.

Fonte: U.S. EPA (Environmental Protection Agency).2000

### 1.2. Formação e controle das emissões de SO<sub>x</sub>

Devido à crescente preocupação com a não agressão ao meio ambiente, o estudo sobre as emissões dos óxidos de enxofre (SO<sub>x</sub>) nos fornos rotativos da indústria de cimento tem ganhado maior importância, principalmente devido a atual tendência de se utilizar combustíveis com baixo conteúdo calorífico e altos teores de enxofre. Dependendo da temperatura, o nível de excesso de oxigênio (O<sub>2</sub>), nível de álcalis, nível de cloro, presença de monóxido de carbono (CO) e outros elementos menores, a formação de óxidos de enxofre no forno de cimento pode sofrer uma grande variação. A formação do enxofre no forno de cimento também é determinada por considerações termodinâmicas e pela cinética das reações químicas envolvidas de acordo com Seebach et al. (2001).

A Figura 1 apresenta o mecanismo de formação do dióxido de enxofre no forno de cimento. A formação desses óxidos nesse processo deve-se à presença de sulfatos e de sulfetos no material usado na pasta, e também devido ao uso de combustíveis com altos teores de enxofre. O enxofre é absorvido em grande parte pelos materiais dentro do processo, e sai do sistema como um componente do clínquer, como emissão de material particulado do resfriador de clínquer, material particulado do forno (CKD) ou como emissão de material particulado pela chaminé do forno. Parte do enxofre é retido dentro do sistema na forma de incrustações ou como parte de um ciclo volátil. A quantidade de enxofre introduzida é usualmente absorvida dentro da faixa de 50 a 90% da quantidade inicial. Na combustão, praticamente todo o enxofre presente no combustível será oxidado a SO<sub>2</sub>.

As principais tecnologias de controle das emissões de SO<sub>x</sub> estão apresentadas na Tab. 2.

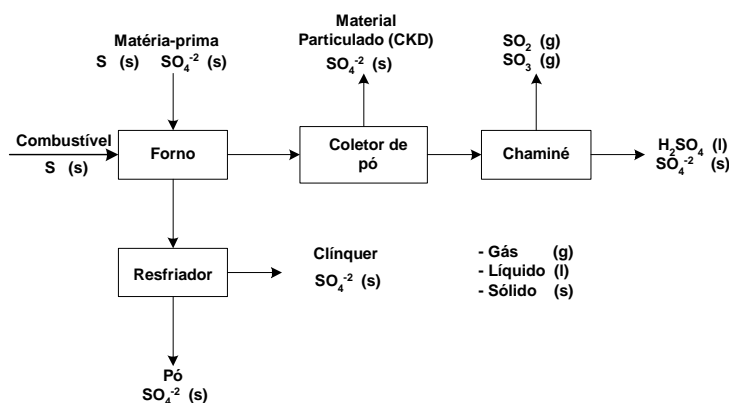


Figura 1. Mecanismo de formação do SO<sub>2</sub> (Greer, 1989)

Tabela 2 - Tecnologias de controle de emissão de SO<sub>x</sub>

Tecnologia de Controle	Princípio do Método	Eficiência de Remoção de SO <sub>2</sub>
Mudança de matéria-prima	Mudando a fonte de aditivos secundários da mistura crua ou extraindo calcário de minas seletivas	-
Ciclone de remoção de SO <sub>x</sub>	Utiliza o óxido de cálcio(CaO) livre formado no calcinador. Cerca de 5% do gás de exaustão do calcinador é desviado do duto de saída do calcinador e sobe para o ciclone de D-SO <sub>x</sub> <sup>(1)</sup> que separa a maioria do material particulado em suspensão no gás. O material particulado capturado é alimentado no duto de saída do ciclone onde ocorre a conversão do enxofre pirítico(FeS <sub>2</sub> ) em SO <sub>2</sub> que é parcialmente absorvido pela cal livre (CaO).	25-30 %
Adição de cal hidratada (Ca(OH) <sub>2</sub> )	Injetar a cal hidratada no duto de saída do estágio do preaquecedor onde o enxofre pirítico está sendo convertido a SO <sub>2</sub> . A quantidade de cal hidratada injetada varia ente 3.0 - 5.0 moles de cal (CaO) por mol de dióxido de enxofre (SO <sub>2</sub> ) a ser absorvido.	45-70 %
Lavador úmido (Wet scrubber)	O SO <sub>2</sub> entra no fundo do lavador em direção ao topo sendo “lavado” em contracorrente com lama de calcário pulverizado. O gás passa por um separador de umidade e já sai limpo do lavador. O sulfeto de cálcio precipitado no fundo do lavador reage com o O <sub>2</sub> fornecido por uma corrente de ar formando gesso (CaSO <sub>4</sub> ), que é removido do processo.	90-95 %
Combustíveis com baixo teor de enxofre	Uma alternativa de reduzir as emissões de SO <sub>2</sub> é a utilização de combustíveis com baixo conteúdo de enxofre na sua composição.	-

(1) – Ciclone D-SO<sub>x</sub> é o 2º estágio da torre de ciclones de 4 e de 5 estágios de preaquecedores ou no 3º estágio de uma torre de ciclones com seis estágios.

Fonte: (Miller e Hansen, 2004)

### 1.3 Formação e controle das emissões de monóxido de carbono (CO)

Atualmente nos modernos sistemas de queima as emissões de CO são geradas a partir de duas possíveis fontes: do carbono orgânico na matéria-prima e da combustão incompleta no calcinador ou forno rotativo. De acordo com Bech e Gundtoft (1998) freqüentemente a emissão de CO é relacionada com a granulometria do combustível pulverizado, o sistema de alimentação do combustível, o queimador ou ao tempo de retenção no calcinador. Uma razão muito comum para a formação de CO na entrada do forno é a granulometria do combustível e este problema deve ser corrigido na moagem do combustível.

O formato da linha de alimentação ou o fluxo insuficiente de ar podem também contribuir para a formação de CO. Estes fatores farão freqüentemente o combustível entrar no forno em um fluxo oscilante. Isto faz o sistema de forno oscilar entre uma situação de uma mistura ar-combustível muito rica em combustível, gerando CO e uma situação de mistura muito pobre em combustível que produz um excesso de oxigênio. Freqüentemente pode ser observado que os fornos de

produção de clínquer tende a operar com um nível mais alto de O<sub>2</sub> (excesso de ar) que o necessário para evitar a formação de CO.

Dentre as tecnologias de redução das emissões de CO dos novos sistemas de queima destacam-se as seguintes: a mudança de matéria-prima, o tipo de calcinador, o tempo de retenção, a alimentação do componente da mistura crua com alto teor de carbono diretamente no calcinador e o oxidante térmico regenerativo. Além disso, boas práticas de combustão devem ser usadas durante a operação em conjunto com qualquer método de redução de CO empregado.

## 2. Combustíveis utilizados nos fornos de produção de clínquer

Na busca da redução do custo do combustível em seu processo de produção, a indústria cimenteira nos últimos anos vem utilizando a queima de combustíveis alternativos em seus fornos rotativos em substituição aos combustíveis tradicionalmente usados destacando-se entre eles, o coque de petróleo e pneus.

A indústria do cimento pode contribuir significativamente para a solução de um problema que afeta a maioria dos países industrializados, que é o crescimento contínuo de resíduos que devem ser dispostos adequadamente, e dentre eles destacam-se os pneus. A Resolução N° 258 (CONAMA), de 26 de Agosto de 1999, estabelece a obrigatoriedade do recolhimento dos pneus usados pelos fabricantes ou importadores os quais são obrigados a dar-lhes uma destinação final adequada. Por outro lado a Resolução N° 264 (CONAMA), de 26 de Agosto de 1999, estabelece as condições para o co-processamento de resíduos em fornos de clínquer. O co-processamento de pneus nos fornos das fábricas de cimento é uma alternativa viável tanto para as indústrias de pneus quanto as cimenteiras.

### 2.1. Coque de petróleo

Quando o óleo cru é refinado, as frações mais leves são retiradas, restando um óleo residual de menor valor. Em algumas refinarias, este óleo residual é processado novamente, a fim de se produzir maior quantidade de produtos leves, gerando o coque de petróleo como resíduo. A produção de coque de petróleo tem aumentado em função do aumento do processamento de petróleos pesados e da necessidade de maior quantidade de frações leves. Dependendo do petróleo que foi processado o coque de petróleo pode apresentar teores de enxofre de 0,7 a 7,5 % influenciando o seu valor de mercado tornando atrativo o seu uso. O coque de petróleo é usado principalmente como combustível em sistemas de geração de vapor e nas indústrias cimenteiras. Para o uso como combustível em fornos de produção de clínquer utiliza-se principalmente o coque verde de petróleo. Em indústrias de cimento o coque de petróleo vem sendo usado unicamente ou em misturas com carvão mineral, carvão vegetal, gás natural, óleo combustível ou pneus como combustível no forno rotativo.

### 2.2. Pneus

Os pneus usados, embora sendo um material residual especial, são excelentes fontes de energia, principalmente quando utilizados como combustíveis secundários. A alta temperatura, o elevado tempo de residência, o alto efeito de absorção da matéria-prima no pré-aquecimento e a incorporação das cinzas geradas ao clínquer, são condições favoráveis para que a queima de pneus em fornos de produção de clínquer seja uma forma de disposição final ideal para estes resíduos. Além disso, devido ao alto poder calorífico do pneu seu co-processamento contribui para a diminuição do consumo de combustíveis não renováveis (carvão e óleo), poupando assim os recursos naturais (Souza, 2000). Os pneus podem ser introduzidos no sistema de alimentação de combustível do forno inteiro, picado, ou em raspas. Neste trabalho usou-se como combustível uma mistura de 80% de coque de petróleo e 20% de pneus (40% de coque queimado no queimador primário do forno rotativo e o restante queimado no queimador secundário do precalcinador juntamente com os pneus), cujas principais características estão apresentadas na Tab. 3.

Tabela 3 – Características dos combustíveis usados na indústria cimenteira.

Composição elementar do combustível	Coque de Petróleo (%)	Pneu (%)
C	88,4	72,15
H	3,7	6,74
O	0	9,67
S	1,56	1,23
N	1,56	0,36
PCI (kJ/kg)	34350	32580

## 3. Sistemas de fornos utilizados no processo de produção de clínquer

### 3.1 Forno com preaquecedores em suspensão com queima em duto de elevação

Nos fornos rotativos dotados com sistemas de preaquecedores em suspensão (SP) até 25% do calor necessário ao processo pode vir da queima de pneus introduzidos no duto de elevação, reduzindo as emissões de NO<sub>x</sub>. Esta redução está associada possivelmente à atmosfera redutora criada pela introdução direta do combustível na região de entrada do

material no forno rotativo, na extremidade oposta ao queimador primário, no qual, o  $\text{NO}_x$  formado na zona primária é reduzido. Entretanto, quando as partículas de combustível finamente triturado é queimado no duto de elevação do forno, a concentração de  $\text{NO}_x$  nos gases de exaustão que passam por este duto poderão aumentar. A taxa de excesso de ar também contribui para um pequeno aumento das emissões de  $\text{NO}_x$  no sistema do forno (U.S. EPA, 2000).

Um esquema de forno rotativo dotado de preaquecedor de 4 estágios é apresentado na Fig. 2.

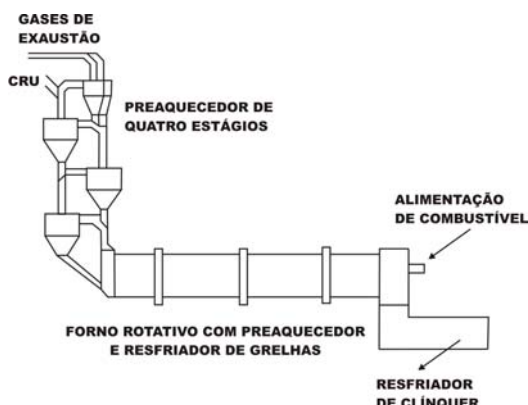


Figura 2. Esquema de uma instalação de um forno rotativo com preaquecedor de 4 estágios.

### 3.2. Fornos com precalcinator - queima secundária

O precalcinator usa cerca de 60% da demanda total de calor necessário para produção de clínquer, em um sistema de queima secundária, reduzindo os requerimentos do queimador primário no forno rotativo para cerca de 40%. A combustão do combustível na zona de queima secundária fornece o calor necessário para a calcinação endotérmica do carbonato de cálcio ( $\text{CaCO}_3$ ) dado pela Eq.(1).



O cru já calcinado é levado pelo fluxo de gás ao último ciclone onde é descarregado. Em um forno com precalcinator com duto de ar terciário, consome-se cerca de 40-50% do calor total requerido no processo e a quantidade de gases de combustão da zona de queima do forno é reduzida proporcionalmente. Por outro lado, as concentrações de  $\text{NO}_x$  nos gases vindos do forno rotativo podem ser significativamente maiores que as concentrações de  $\text{NO}_x$  nos preaquecedores do forno. A explicação para este fato é provavelmente atribuída a pouca quantidade de material e ao tempo de retenção dos gases na zona de queima do precalcinator, combinada com a alta temperatura do ar secundário. Um esquema de forno rotativo dotado de preaquecedor de 4 estágios com precalcinator é apresentado na Fig. 3.

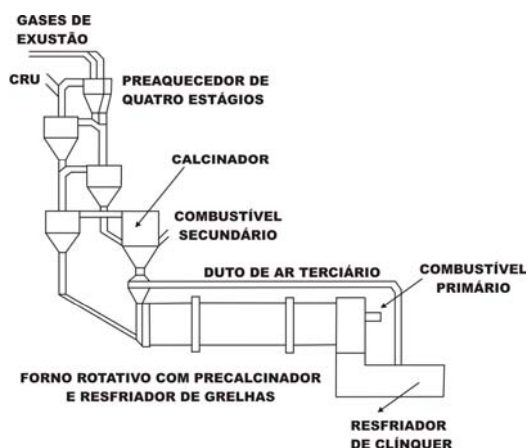


Figura 3. Esquema de uma instalação de um forno rotativo com preaquecedor de 4 estágios e precalcinator.

### 4. Combustão escalonada como forma de redução das emissões de $\text{NO}_x$

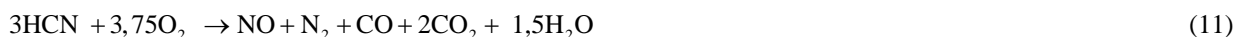
Neste método além da combustão primária no forno rotativo (formação do clínquer 1200-1480°C), ocorre uma combustão secundária no precalcinator, a uma temperatura mais baixa (600 - 900°C) com um suprimento de ar terciário de combustão através de um duto externo ao forno rotativo, com a finalidade de completar o pré-aquecimento e calcinação do material cru. Normalmente nesta queima são usados retalhos ou raspas de pneu, borra oleosa, resíduos de solventes, etc,

como combustíveis complementares. Na zona secundária ocorre a combustão do combustível secundário (uma mistura contendo 20% de pneus e 40% de coque de petróleo), numa atmosfera constituída pelos gases de exaustão do forno rotativo e o ar terciário quente a 964 K (691°C) vindo do resfriador de clínquer. O mecanismo principal deste tipo de reação de acordo com Thomsen e Jensen (2006) é descrito pela a formação do radical  $\text{CHi}\bullet$  proveniente da combustão escalonada do combustível. O  $\text{NO}_x$  formado no combustor primário no forno rotativo reage rapidamente com radical  $\text{CHi}\bullet$ , convertendo-o a HCN,  $\text{NH}_3$  ou  $\text{N}_2$ , como visto a seguir nas reações representadas pelas Eq. (2) a (15):

Inicialmente o NO é reduzido por radicais de hidrocarboneto ( $\text{CHi}\bullet$ ) ou pela reação entre o CO ou  $\text{H}_2$  e NO que é catalisado pela farinha crua ou pelo char (parte sólida do combustível carbonizado após a remoção dos voláteis):



A reação representada pela Eq. 2 é favorecida pela alta temperatura e necessita de uma pequena concentração de oxigênio para continuar a formação do radical  $\text{CHi}\bullet$ . Como mencionado anteriormente as reações representadas pelas Eq. (3), (4) e (5) são catalisadas pela farinha crua, e também são inibidas pelo oxigênio; a reação (3) é completamente inibida se houver um excesso de oxigênio. Os compostos HCN e  $\text{NH}_3$  são formados das pirólises e da degradação do NO. O  $\text{NH}_3$  ou o HCN reagem catalisados pelo óxido de ferro normalmente presente na farinha crua (Syverud e Tomassen, 1994) de acordo com reações representadas pelas Eq. (6) e (7); ou reagem com NO ou  $\text{O}_2$ , ou ainda, através das reações em fase gasosa. Desta maneira o  $\text{NO}_x$  é eliminado ou formado de acordo com as reações simplificadas apresentadas a seguir.



Os mecanismos de reação para as espécies nitrogenadas na fase gasosa estão resumidos na Fig. 4. As reações (10) e (11) continuarão ocorrendo na parte inferior da região oxidante do calcinador, enquanto o  $\text{NO}_x$  é formado nas proximidades. A combustão do char e do nitrogênio do char (N-char) começa na zona de redução, mas ocorrerão principalmente na zona oxidante do calcinador.

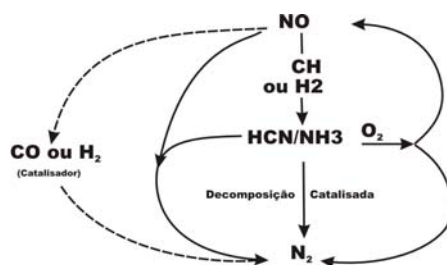
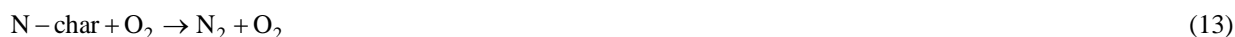


Figura 4 – Possíveis rotas de reação das espécies nitrogenadas em fase gasosa.  
 Linha cheia — reação do HCN/ $\text{NH}_3$   
 Linha tracejada ---- reação do NO com compostos sem nitrogênio  
 Fonte: (Thomsen e Jensen, 2006)



Porém, só uma parte do N-char forma  $\text{NO}_x$  durante a combustão o restante forma  $\text{N}_2$ . Isto pode ser visualizado como duas reações competitivas; uma formando  $\text{NO}_x$  e a outra formando  $\text{N}_2$ :



A reação entre o N-char e o NO, também pode ocorrer no mecanismo competitivo de formação e eliminação do NO conforme apresentado na Eq. (14) (Shenk e Salmento, 2004).



A conversão do N-char a NO depende fortemente do tipo de combustível e das condições da combustão podendo variar entre 10 a 80%. Além disso, o C-char pode reagir com o NO formando  $\text{N}_2$ , CO e  $\text{CO}_2$  (Thomsen e Jensen, 2006).



N-fuligem e C-fuligem reagem pelas mesmas reações globais como mostrado nas reações (12 a 15) do char.

### 5. Modelagem do cálculo da concentração de $\text{NO}_x$ utilizando o equilíbrio químico e cinética das reações

Com a finalidade de avaliar comportamento da queima de pneus e coque de petróleo no processo de formação de  $\text{NO}_x$  no interior do forno para produção de clínquer, foram calculados através dos parâmetros cinéticos das reações químicas envolvidas, e da análise do equilíbrio químico a concentração de  $\text{NO}_x$ , CO e valores da temperatura de chama, para um determinado forno rotativo que produz 34,72 kg/s de clínquer e considerando a composição química elementar destes combustíveis, cujos os dados foram apresentados na Tab. 3. Os valores para a temperatura de chama foram obtidos utilizando-se a Eq. (16) (Van Wylene e Sontag, 2003).

$$H_r = H_p \quad (16)$$

onde:

$$H_r = \sum_r n_e \times (h_r^0 + \Delta h)_e \quad (17)$$

$$H_p = \sum_p n_s \times (h_p^0 + \Delta h)_s \quad (18)$$

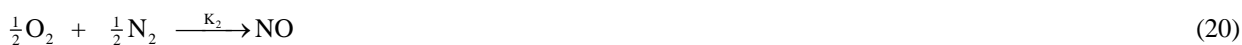
Onde:  $H_r$  e  $H_p$  referem-se as entalpias dos reagentes e produtos respectivamente;  $n_e$  e  $n_s$  o número de kmol de cada componente dos reagentes e dos produtos. Os parâmetros operacionais usados nos cálculos do processo de queima estão apresentados na Tab. 4.

Tabela 4 - Parâmetros operacionais no forno de produção de clínquer.

Constituinte	Valor	Unidade
Consumo energético no forno rotativo	1240	kJ/kg
Consumo energético no precalcinador	1860	kJ/kg
Produção de clínquer	34,72	kg/s
Coque de Petróleo <sup>1</sup>	1,25	kg/s
Coque de Petróleo <sup>2</sup>	1,25	kg/s
Pneu <sup>2</sup>	0,66	kg/s
Fluxo ar primário	2,19	kg/s
Fluxo ar secundário	13,91	kg/s
Fluxo ar terciário <sup>2</sup>	88,81	kg/s
Temp. ar primário	298	K
Temp. ar secundário	1053	K
Temp. ar terciário <sup>2</sup>	964	K
Pressão do sistema	1	atm

1 Forno rotativo, 2 Precalcinador

Com o propósito de avaliar a contribuição da dissociação do CO<sub>2</sub> e a formação de NO pela reação simultânea dada pela Eq. (19) e (20), no mecanismo de formação de NO<sub>x</sub> no forno rotativo foi calculada com base na temperatura adiabática de chama a energia livre de Gibbs e a constante de equilíbrio termodinâmico relacionada pela Eq. (21) e (22).



$$\Delta G(T) = \Delta H - T\Delta S \quad (21)$$

$$K = \exp\left(\frac{-\Delta G}{RT}\right) \quad (22)$$

Sendo: ΔG-variação da energia livre de Gibbs; ΔH e ΔS-variação da entalpia e entropia respectivamente; K-constante de equilíbrio termodinâmico; R-constante universal dos gases; e T-temperatura do sistema (K). Posteriormente foram calculadas partindo-se dos coeficientes da equação de combustão corrigida para porcentual de O<sub>2</sub> livre as respectivas frações molares no equilíbrio químico dos constituintes da Eq. (19) e (20), os resultados são apresentados na Tab. 5, calculando-se em seguida o grau de avanço da reação representado pelas incógnitas x (concentração de CO) e y (concentração de NO) na Eq. (23). O NO e CO gerados no forno rotativo, determinados pela Eq. (23) seguem com a corrente gasosa dos produtos da combustão no queimador primário para o precalcinador, adicionando-se aos produtos da combustão da queima secundária (40% coque de petróleo e 20% pneus) onde mais CO é gerado pela combustão escalonada, ocorrendo a redução do NO via a reação catalítica NO/CO apresentado pela Eq. (3).

Tabela 5. - Balanço de massa para a Equação (19) e (20).

Espécie (kmol/s)	Início	Equilíbrio	Fração molar
CO <sub>2</sub>	0,092	0,092-x	(0,092-x)/(0,545+0,5x)
CO	0	x	x/(0,545+0,5x)
O <sub>2</sub>	0,011	0,011+0,5x-0,5y	(0,011+0,5x-0,5y)/(0,545+0,5x)
N <sub>2</sub>	0,442	0,442-0,5y	(0,442-0,5y)/(0,545+0,5x)
NO	0	y	Y/(0,545+0,5x)
Total		0,545+0,5x	

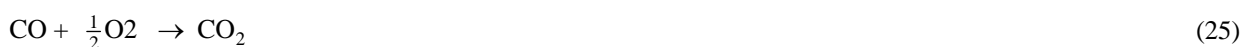
$$K_1 = \frac{\left(\frac{x}{0,545+0,5x}\right)\left(\frac{0,011+0,5x-0,5y}{0,545+0,5x}\right)^{0,5}}{\left(\frac{0,092-x}{0,545+0,5x}\right)}$$

$$K_2 = \frac{\left(\frac{y}{0,545+0,5x}\right)}{\left(\frac{0,011+0,5x-0,5y}{0,545+0,5x}\right)^{0,5}\left(\frac{0,442-0,5y}{0,545+0,5x}\right)^{0,5}} \quad (23)$$

Os parâmetros para constante cinética da Eq. (3) são apresentados na Eq. (24), e os parâmetros da Eq. (25) são apresentados na Eq. (26) Zhou *et. al.* (2004). O CO gerado em todo processo é oxidado a CO<sub>2</sub> como apresentado na Eq. (25). A concentração final de CO é determinada pela Eq. (26) e (27) respectivamente.

$$k = 5,67 \times 10^3 T \exp\left(\frac{-13952}{T}\right) \quad (24)$$

Onde: k-a constante cinética (s<sup>-1</sup>), T-temperatura do sistema (K).



$$k = 1,254 \times 10^{10} \Phi \left( \frac{C_{O_2}}{2} \right)^{0,25} C_{H_2O}^{0,5} \exp \left( \frac{-20130}{T} \right) \quad (26)$$

$$\Phi = 7,93 \exp \left( \frac{-2,48 C_{CO_{inicial}}}{C_{O_2}} \right)$$

Onde: k - a constante cinética (s-1)  $C_{O_2}$   $C_{H_2O}$  e  $C_{CO_{inicial}}$  concentrações de oxigênio, água e monóxido de carbono respectivamente em (mol/m<sup>3</sup>); T-temperatura do sistema (K).

$$C_{CO} = C_{CO_{inicial}} \exp(-kt) \quad (27)$$

A concentração final de NO formado no processo de produção de clínquer é calculado pela Eq. (28).

$$C_{NO} = C_{NO_{inicial}} \exp(-kt) \quad (28)$$

Onde: t na Equação (28) representa o tempo de retenção dos gases no precalcador, que neste trabalho foi em torno de 3s.

## 6. Resultados e discussão

A Figura 5 apresenta os resultados das emissões de NO<sub>x</sub> expresso como [g NO<sub>2</sub>/kg clínquer] em um sistema de forno dotado de precalcador com ar terciário, utilizando uma mistura de combustíveis no processo de queima, dentre eles: carvão mineral, coque de petróleo, pneus e outros combustíveis alternativos.

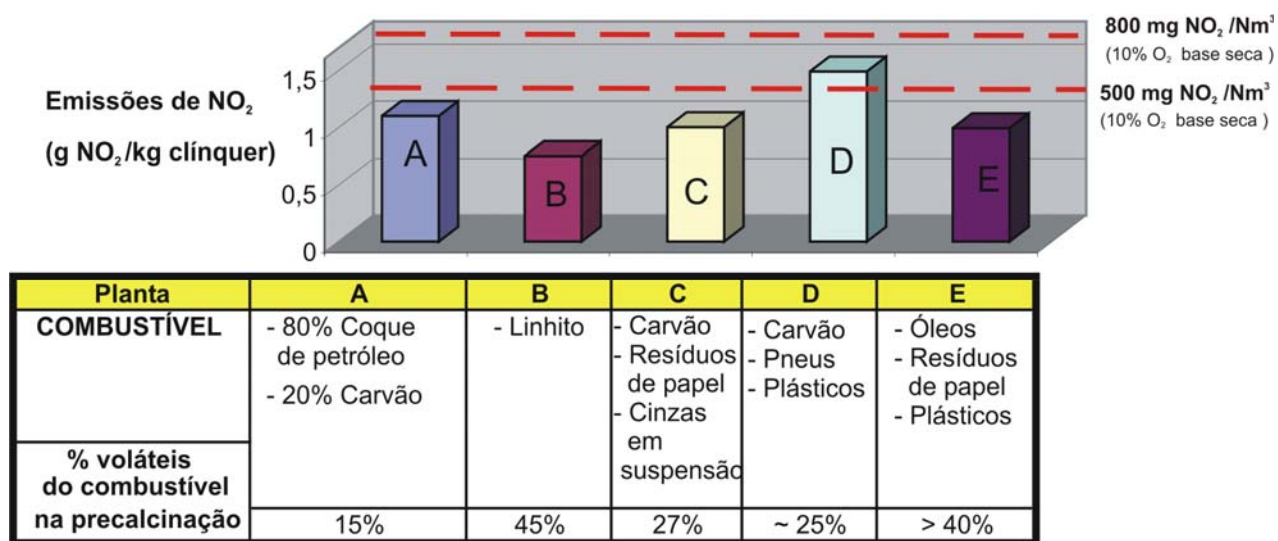


Figura 5. Emissões de NO<sub>x</sub> em função do tipo de combustível utilizado no processo de queima em forno precalcador com duto de ar terciário (Michaelsen, 2000).

Um combustível de alta reatividade reage ao começar a combustão tão rapidamente que, apesar de ter excesso de O<sub>2</sub> suficiente para realizar a combustão, geram zonas redutoras parciais por falta de O<sub>2</sub> e isto se nota na produção intensiva de monóxido de carbono (CO). As zonas redutoras impedem a formação de NO<sub>x</sub> e podem até reduzir as concentrações de NO<sub>x</sub> já existentes. Como mencionado anteriormente, as emissões de CO podem originar-se do carbono orgânico da matéria-prima na alimentação do cru e da combustão incompleta. Resultados de medições na indústria cimenteira indicam que existe uma correlação linear entre conteúdo de carbono na alimentação do cru e a emissão de CO, como pode ser observado na Fig. 6. O carbono orgânico na matéria-prima pode também ser decomposto em dois tipos distintos de carbono: carbono volátil e o carbono fixo, a maioria do carbono das matérias-primas é do tipo volátil. As matérias-primas típicas que podem conter quantidades significativas de carbono são: calcário de baixo grau, xisto, argila, minério de ferro (Miller, 2002).

O carbono volátil normalmente queimará entre 300-600°C nos estágios medianos do preaquecedor. Nesta área não há oxigênio e temperatura suficiente para queimar completamente o carbono, ou seja; ocorre uma combustão incompleta,

favorecendo a formação do monóxido de carbono (CO). Como a combustão do carbono (ou combustão parcial do CO) é uma reação exotérmica, a combustão do carbono no preaquecedor elevará o perfil de temperatura no preaquecedor.

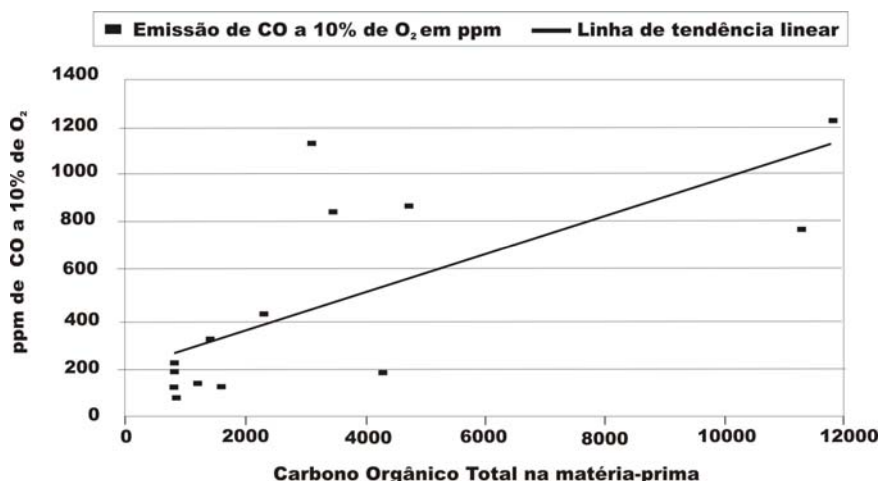


Figura 6 – Emissão de CO em função do teor de carbono na matéria-prima (Bech e Gundtoft, 1998)

A queima de carbono no primeiro estágio do preaquecedor aumentará a temperatura de saída do gás. O carbono fixo normalmente não queimará até que esteja dentro ou próximo do calcinador onde as condições são mais adequadas para a combustão, conseqüentemente, o carbono fixo não contribuirá significativamente para as emissões de CO (Miller, 2002). A redução nas emissões de NO<sub>x</sub> quando se co-processam pneus em fornos de produção de clínquer é possivelmente atribuída a combustão escalonada, onde parte do combustível no precalcinador é queimado na entrada do forno rotativo em contra corrente aos gases de exaustão, gerando CO que converte o NO<sub>x</sub> formado no queimador primário do forno rotativo a N<sub>2</sub>. A porção restante do combustível é queimada com excesso de oxigênio garantindo assim, que o excesso de CO gerado no processo seja oxidado a CO<sub>2</sub> para ser liberado na atmosfera.

No processo de formação e eliminação do NO<sub>x</sub> nos sistemas com queima secundária a reação representada pela Eq. (12) indica que um maior conteúdo de nitrogênio do combustível e de oxigênio tende a aumentar a formação de NO. A reação representada pela Eq. (14) também indica que o NO tende a ser reduzido pelo nitrogênio do combustível. De acordo com Shenk e Salmento (2004), no mecanismo competitivo de formação e eliminação do NO representado pelas reações das Eq. (12) e (14) respectivamente, a reação predominante no processo dependerá dos seguintes fatores: temperatura no calcinador, especialmente durante combustão inicial, tipo de combustível e seu conteúdo de voláteis e nitrogênio, conteúdo de NO<sub>x</sub> nos gases que entram no calcinador e excesso/falta de ar, especialmente durante combustão inicial.

A reação (14) ocorre mais rapidamente com o aumento da temperatura do que a reação (12), assim, aumentando a temperatura da zona de queima secundária tende a eliminar o NO, se a concentração de oxigênio for baixa.

Nos calcinadores em linha de baixa emissão de NO<sub>x</sub>, nos quais se utilizam essa técnica, empregam-se deficiência de oxigênio e zona de alta temperatura para redução do NO<sub>x</sub>, através das fortes zonas redutoras e oxidantes criadas. A Fig. 7 ilustra um modelo de calcinador em linha de baixa emissão de NO<sub>x</sub>.

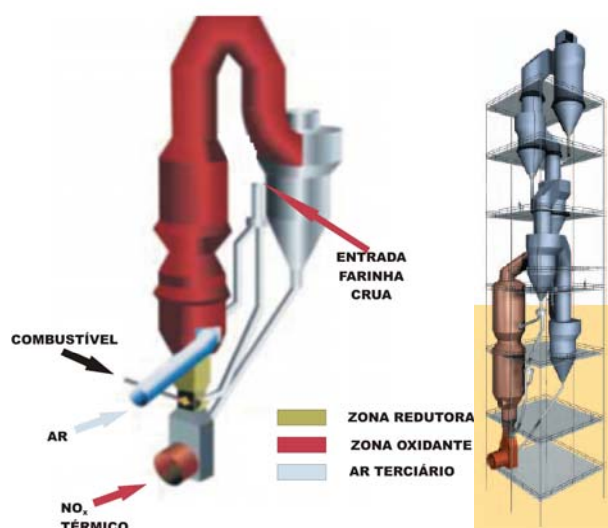


Figura 7 Calcinador em linha de baixa emissão de NO<sub>x</sub> (Low NO<sub>x</sub> ILC). Fonte: (Knies e Miller, 2006)

Observou-se que combustível com alto teor de volátil tende a eliminar o NO (Michaelsen, 2000; Shenk e Salmento, 2004). Combustíveis com alto teor de voláteis tendem a queimar mais rapidamente produzindo altas temperaturas de chama formando CO e radicais de hidrocarbonetos. A alta temperatura tende a reduzir o NO<sub>x</sub>, via reação (14), já que é mais rápida que a reação (12).

Foi observado que para as condições de queima acima, a Eq. (23), juntamente com as reações representadas pelas Eq. (27) e (28), envolvendo a cinética química, fornecem uma boa previsão na formação do NO<sub>x</sub> no processo de produção de clínquer em forno rotativo na indústria do cimento, e também, confirma a contribuição da reação de oxi-redução apresentada na Eq. (3), ou seja, o NO sendo reduzido a nitrogênio molecular e o CO por sua vez oxidado a CO<sub>2</sub>, na redução da formação de NO<sub>x</sub> estando de acordo com os argumentos discutidos neste texto. Os principais resultados obtidos neste trabalho estão apresentados na Tabela 6.

Tabela 6 – Resultados obtidos

	K	% O <sub>2</sub>
T adiabática chama <sup>Forno rotativo</sup>	2194	2
T chama <sup>Precalcinador</sup>	1144	1,7
C <sub>NO<sub>x</sub></sub> (mg/Nm <sup>3</sup> )	347	2
% conversão de CO a CO <sub>2</sub>	99,7	-

Como pode ser observado na Tabela 6 a concentração final de NO calculada em torno de 347 mg/Nm<sup>3</sup> para 2% de O<sub>2</sub>, está, portanto de acordo com as medições realizadas por Baumhardt (2004), verificando a redução das emissões de NO<sub>x</sub> quando se co-processam pneus em fornos de clínquer. As medições revelaram reduções de emissões em torno de 900 mg/Nm<sup>3</sup> a 11% de O<sub>2</sub> livre para valores pouco acima de 300 mg/Nm<sup>3</sup>.

## 7. Conclusão

Em sistemas com preaquecedores e precalcinaidores, o uso de matéria prima com alto grau de sulfetos pode permitir elevadas taxas de emissões de SO<sub>2</sub>, demandando tratamento dos gases nos estágios superiores do preaquecedor. O enxofre no combustível raramente afeta as emissões de SO<sub>2</sub> porque os combustíveis são queimados na zona de queima ou na zona de calcinação. O SO<sub>2</sub> gerado na zona de queima do forno pode ser rapidamente absorvido na zona de calcinação pela reação com o CaO ou reagir com os álcalis durante a queima. Desta maneira, quase todo o SO<sub>2</sub> formado é absorvido pelo cru sendo novamente introduzido no forno. O conjunto de considerações feitas mostra que a emissão de NO<sub>x</sub> por um forno de produção de clínquer esta intimamente relacionado com processo de combustão que nele ocorre. A quantidade de NO<sub>x</sub> que se mede em um forno na indústria do cimento é o resultado de reações muito complexas. Situações redutoras e anti-oxidantes impedem a oxidação do N<sub>2</sub> a NO<sub>x</sub>. O uso de estágios múltiplos ou de queimadores de baixa emissão de NO<sub>x</sub> aliado a uma combustão escalonada na região de queima secundária, pode contribuir para uma redução de até 50% nas emissões de NO<sub>x</sub>.

Um sistema de alimentação e moagem de combustível bem projetado pode contribuir para um baixo nível de formação de CO ao mesmo tempo em que o nível de excesso O<sub>2</sub> é mantido baixo para evitar a formação excessiva de NO<sub>x</sub>.

Um sistema de combustão escalonada que incorpora um calcinador de baixa emissão de NO<sub>x</sub>, permite o uso de combustíveis com alto potencial de emissão. O maior tempo de retenção e a alta temperatura permitirão que as reações de combustão sejam completas.

Acredita-se que as reações de combustão escalonada é o mecanismo principal para a redução de NO<sub>x</sub> quando se co-processam pneus em fornos para produção de clínquer. A queima de pneus inservíveis além de favorecer a formação de CO que contribui para a redução de formação do NO<sub>x</sub>, também auxilia na minimização do impacto ambiental pela diminuição do acúmulo irregular no meio ambiente. A substituição parcial dos combustíveis fósseis usados na indústria cimenteira mundial pelos pneus, entretanto tem o seu nível máximo de substituição limitados pela possibilidade de emissões de metais pesados presentes na sua constituição.

Foi calculada uma concentração final de NO em torno de 347 mg/Nm<sup>3</sup> para 2% de O<sub>2</sub> livre e uma conversão de CO a CO<sub>2</sub> de aproximadamente 99,7 %. O valor calculado neste trabalho para as emissões de NO<sub>x</sub> fornecem uma boa estimativa para comparação com resultados das medições nas fábricas de produção de cimento, estando ainda dentro dos limites de emissão segundo os padrões das indústrias cimenteiras da Alemanha e Europa (500 mg/Nm<sup>3</sup> a 10% de O<sub>2</sub> livre para fornos novos).

## 8. Referências

Baumhardt, E., 2004, “Co-processamento de Pneus Inservíveis em Fornos de Cimento”, Seminário de Co-processamento Destinação Final de Resíduos em Fornos de Cimento Uma solução Inteligente, Novembro, São Paulo, Brasil.

- Bech C., Gundtoft L., 1998, "Study of NO<sub>x</sub>, SO<sub>x</sub>, and CO mechanisms based on actual plant data", IEEE /PCA Cement Industry Technical Conference, Rapid City, South Dakota USA, May 17-21.
- Greer, W.L., 1989, "SO<sub>2</sub>/NO<sub>x</sub> Control Compliance with Environmental Regulations" 30th IEEE Cement Industry Technical Conference, Vol. 25, n° 3, pp. 251-259.
- Hill, S. C., Smoot, D. L., 2000, "Modeling of Nitrogen Oxides Formation and Destruction in Combustion Systems", Progress in Energy and Combustion Science, Vol. 26, pp. 417-458.
- Knies S., Miller S., "Environmental Constraints" disponível em <http://www.flsmidth.com/flsmidth/english/contact/brochures+and+info/reviews/reviewno148.pdf#Page=6> acessado em 20/05/2006.
- Michaelsen, D., 2000, "Reduccion de las Emisiones de Óxidos de Nitrogeno (NO<sub>x</sub>) com el Calcinador Prepol MSC", Cemento Hormigon, Novembre, n° 816, pp. 1234-1240.
- Miller S. W., 2002, "Environmental Considerations for Preheaters", IEEE-IAS /PCA 44th Cement Industry Technical Conference, May 5-9, pp. 169-186.
- Miller, S. W., Hansen, J. P., 2004, "Methods for Reducing SO<sub>2</sub> Emissions", Cement Industry Technical Conference, IEEE-IAS/PCA, 25-30 April, pp. 79-92.
- Seebach, V., Young, G. L., Miller, F. M., 2001, "Formation and Techniques for Control of Sulfur Dioxide and Other Sulfur Compounds in Portland Cement Kiln Systems", Research Development Information, PCA R&D n° 2460.
- Silva, R. J., 1994, "Análise Energética de Plantas de Produção de Cimento Portland", Tese de Doutorado, Universidade Estadual de Campinas, Faculdade de Engenharia Mecânica, Campinas-SP, Brasil.
- Shenk, R. E., Salmento J. S., 2004, "Accurately Predicting Cement Plant Emissions", Cement Industry Technical Conference, IEEE-IAS/PCA, 25-30 April, pp. 79-92.
- Souza, F. A., 2000, "Utilização de Pneus Pós-Consumo como Combustível em Fornos de Cimento", Seminário Nacional Sobre Reuso/Reciclagem de Resíduos Sólidos Industriais – CETESB.
- Syverud, T., Thomassen, A., Gautestad, T., 1994, "Utilization of Chipped Car Tyres for Reducing NO<sub>x</sub> Emissions in a Precalciner Kiln", Word Cement, November, pp. 39-42.
- Thomsen K., Jensen L. S., "FLS-Fuller ILC-Low NO<sub>x</sub> Calciner Commissioning and Operation at Lone Star St. Cruz in Califórnia" disponível em <http://www.flsmidth.com/flsmidth/english/contact/brochures+and+info/reviews/reviewno119.pdf> acessado em 20/05/2006.
- U.S. EPA (Environmental Protection Agency), 2000, "NO<sub>x</sub> Control Technologies For The Cement Industry Final Report", Sanders, D., disponível em [http://www.epa.gov/ttn/naaqs/ozone/ozonetech/cement\\_nox\\_update\\_09152000.pdf](http://www.epa.gov/ttn/naaqs/ozone/ozonetech/cement_nox_update_09152000.pdf) acessado em 02/04/2006.
- Van Wylen, G. J., Sonntag, R. E., 2003, "Fundamentos da Termodinâmica", Ed. Edgard Blücher, S.Paulo, Brasil, 577 p.
- Zhou, H., Flamant, G., Gauthier D., 2004, "Dem-les Simulation of Coal Combustion in a Bubbling Fluidized Bed". Chemical. Engineerind. Science. Vol. 59, pp. 4205-4215.

## NO<sub>x</sub> FORMATION IN CEMENT INDUSTRY CLINKER KILNS

Valdir Tesche Signoretti  
Federal University of Itajubá – Avenida BPS, 1303 – CEP – 37500-000 – Itajubá - MG  
valdirsg@unifei.edu.br

Rogério José da Silva  
Federal University of Itajubá – Avenida BPS, 1303 – CEP – 37500-000 – Itajubá - MG  
rogeriojs@unifei.edu.br

### Abstract

This work estimates the concentration of pollutant NO<sub>x</sub> generated in the process of combustion of petroleum coke and tires in rotary kiln for clinker production in the cement industry. Using a mixture of petroleum coke and tires in the burning process, the NO<sub>x</sub> and CO emissions will be evaluated in kilns with precalciner with tertiary air. The emissions will be analyzed in this installation type still considering the staging combustion as a form of reduction of the NO<sub>x</sub> emissions. The proposed model is based on the knowledge of the chemical species concentrations involved in the chemical equilibrium and also in the knowledge of the reaction kinetics of NO<sub>x</sub> and CO formation in the combustion process. It is also done in this work a revision on NO<sub>x</sub>, SO<sub>x</sub> and CO concerning issues related to their formation and presenting the main controlling technologies of these pollutants used in the cement industry.

Keywords: NO<sub>x</sub>, SO<sub>x</sub>, combustion, rotary kiln, cement industry

## ÓLEO DE FRITURA TRANSFORMADO EM BIODIESEL

### **Nei Hansen de Almeida.**

Pontifícia Universidade Católica do Paraná – PUC/PR. Rua Imaculada Conceição, 1155, Prado Velho, Curitiba/PR.  
nei.almeida@pucpr.br

### **Nicole Marques Hoff.**

Pontifícia Universidade Católica do Paraná – PUC/PR. Rua Imaculada Conceição, 1155, Prado Velho, Curitiba/PR.  
nicole.hoff@ufpr.br

### **Lucas Leone Zulim.**

Pontifícia Universidade Católica do Paraná – PUC/PR. Rua Imaculada Conceição, 1155, Prado Velho, Curitiba/PR.  
Lucas.zulim@zipmail.com.br

**Resumo.** *Os óleos vegetais obtidos de culturas renováveis, tais como os óleos de soja, de girassol e do nabo forrageiro, podem ser transformados em biodiesel pelas reações reversíveis de transesterificação e de esterificação com etanol na presença de catalisadores, formando ésteres etílicos (biodiesel) e glicerina.*

*A maioria dos processos comerciais utiliza o metanol como reagente.*

*Em função da maior presença de ácidos graxos livres nos óleos gastos em frituras comparados com os óleos vegetais, foram necessárias duas reações, uma de transesterificação e outra de esterificação para a obtenção de ésteres etílicos com alto rendimento.*

*A alta temperatura utilizada em óleos vegetais, durante a fritura de alimentos, oxida o óleo e formam ácidos graxos livres, que são transformados em biodiesel usando tipo e quantidades de catalisadores apropriados na reação, visto que a umidade presente no óleo de fritura também aumenta o índice de acidez do óleo.*

*A tecnologia utilizada pelo curso de engenharia química da PUC-PR, Laboratório de Operações Unitárias, produz 30 litros de ésteres etílicos com rendimentos acima de 98%. Testes no motor estacionário Diesel para uma mistura B10, resultaram em valores mais altos se comparados com 100% do diesel convencional, com relação a torque e potência.*

*Palavras chave: biodiesel, óleo de fritura, transesterificação, esterificação, motor Diesel.*

### **1. Introdução**

A maior parte da necessidade mundial de energia é suprida por fontes petroquímicas: carvão e gás natural. Com exceção das energias hidroelétrica e nuclear, todas as fontes petroquímicas são finitas e as próximas gerações terão racionamento de combustível fóssil. Com a alta demanda de energia no mundo industrializado, bem como no setor doméstico, os problemas de poluição causados devido ao uso de combustíveis fósseis, tornam necessário desenvolver fontes de energia renovável e com menor impacto ambiental.

O biodiesel é um combustível alternativo obtido de matéria-prima renovável: gorduras animal e/ou vegetal.

A norma americana ASTM define o combustível biodiesel como mono alquil-éster de ácidos graxos derivados de fonte renovável de lipídios, tais como óleo vegetal ou gordura animal (Zhang et al.2003).

O biodiesel, como combustível alternativo tem muitos méritos: é biodegradável e não tóxico. Se comparado com o diesel de petróleo, o biodiesel tem um perfil mais favorável de gases de emissão, tal como baixa emissão de monóxido de carbono, material particulado e hidrocarbonetos residuais.

O dióxido de carbono produzido pela combustão do biodiesel pode ser reciclado pela fotossíntese, minimizando o impacto da combustão no efeito estufa. As plantas podem capturar todo o gás carbônico emitido da queima dos combustíveis renováveis. As plantas separam o dióxido de carbono em carbono e oxigênio, fixam o carbono com o hidrogênio formando os hidrocarbonetos das plantas e liberam o oxigênio para a atmosfera.

Segundo Tickell (2000) em 1800 o teor de dióxido de carbono na atmosfera era de 280 partes por bilhão. No ano de 2000 este teor elevou-se para 355 partes por bilhão.

Todo o CO<sub>2</sub> gerado por combustível fóssil é absorvido pelas plantas e, principalmente, pelas algas dos oceanos. Como esta quantidade de CO<sub>2</sub> é muito grande, a capacidade de absorção é limitada e o CO<sub>2</sub> permanece na atmosfera gerando o efeito estufa.

Segundo o Protocolo de Kyoto os cientistas advertem que para estabilizar os crescentes níveis de CO<sub>2</sub> na atmosfera seria necessário reduzir as emissões de 1990 em 60%.

Uma plantação de soja que produz um litro de óleo vegetal, absorve a quantidade de dióxido de carbono que é formada pela combustão do mesmo litro de óleo de soja queimado no motor na forma de biodiesel (Tickell, 2000). O biodiesel tem seu ponto de vaporização (150°C) alto, o que o torna menos volátil e mais seguro para transportar do que

o diesel de petróleo. Ele fornece as propriedades lubrificantes que podem reduzir os desgastes do motor e aumentar a vida do motor (Von Wedel, 1999).

O componente principal do óleo vegetal é o triglicerídeo, que consiste de três longas cadeias de ácidos graxos esterificados em uma estrutura de triacil-glicerol. Estes ácidos graxos diferem, pelo comprimento das cadeias de carbono, número de carbonos, orientação e posições das duplas ligações.

O meio mais comum para produzir o biodiesel é pela transesterificação, a qual é uma reação química catalisada envolvendo um óleo vegetal e um álcool para produzir alquil ésteres de ácidos graxos e glicerina.

Os alquil ésteres além de serem sintetizados por transesterificação com álcoois, são também resultado da esterificação dos ácidos graxos presentes.

As desvantagens do uso do biodiesel a serem considerados são:

- a) o excesso de glicerina resultante do processo de fabricação. Os pesquisadores deverão procurar alternativas para seu uso, como transformá-la em produtos que também possam ser utilizados como combustível, por exemplo.
- b) As terras agricultáveis poderão se tornar escassas no futuro devido ao seu uso para a produção essencial de alimentos.

### 1.1. Biodiesel como combustível

Os óleos vegetais contêm ácidos graxos livres, fosfolipídios, esteróis, águas, produtos odoríferos e outras impurezas. Em função destes componentes, o óleo não pode ser usado diretamente como combustível e requer modificação química como a transesterificação e a esterificação (Meher et al. 2004).

O biodiesel é o monoalquil éster de ácidos graxos de longa cadeia derivado de matéria-prima renovável, tais como óleos vegetais ou gordura animal. O biodiesel é um produto quimicamente estável e com ação de lubricidade nos motores diesel.

### 1.2. Óleos vegetais como combustível

O uso dos óleos vegetais como combustível alternativo é conhecido desde 100 anos, quando o inventor do motor diesel, Rodolph Diesel, testou o óleo de amendoim no seu motor de ignição por compressão.

Os óleos vegetais ocupam uma posição de destaque no desenvolvimento de combustíveis alternativos, entretanto existem problemas associados com o seu uso direto nos motores diesel: alta viscosidade, baixa volatilidade, baixa reatividade das cadeias insaturadas e hidrocarbonetos, presença de ácidos graxos livres, formação de gomos por processo de oxidação e polimerização durante a estocagem e combustão (Hoff Lis, 2004), além de problemas de lubrificação.

Os óleos vegetais não são quimicamente estáveis e não tem ação de lubricidade nos motores diesel.

## 2. Reações envolvidas na produção de biodiesel

### 2.1. Transesterificação ou alcoolise é a reação que envolve a substituição do grupo alquila de um éster por outro, através da reação de um éster com um álcool.

A transesterificação de triglicerídeo produz alquil éster de ácido graxo e o glicerol (Figura 2). Os diglicerídeos e monoglicerídeos são intermediários neste processo.

As reações do processo são reversíveis sendo usado um excesso de álcool para deslocar o equilíbrio na direção da formação de ésteres, sendo a reação direta de pseudoprimeira ordem e a reação inversa é de segunda ordem (Figura 1).

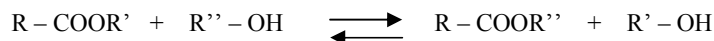


Figura 1: Equação geral de transesterificação.



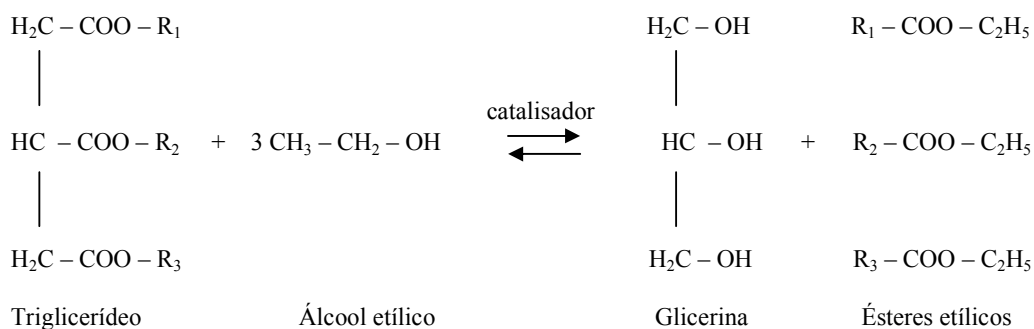
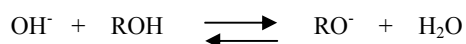


Figura 2: Equação de transesterificação de triglicerídeo.

## 2.2. Mecanismo da transesterificação da catálise básica.

O mecanismo da catálise alcalina está fundamentado na presença do íon etóxido  $\text{RO}^-$ , que deve estar presente no catalisador. A literatura indica duas possibilidades:

a) Formação do íon alcoóxido a partir da reação de um álcali (NaOH ou KOH, por exemplo) com um álcool formando o etóxido de sódio ou de potássio e água:



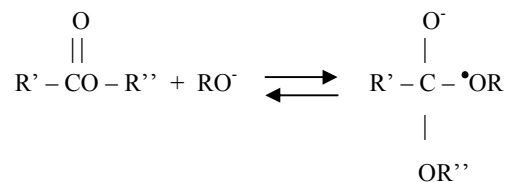
b) Formação do íon alcoóxido a partir da reação de um metal (sódio metálico, por exemplo) com álcool anidro:



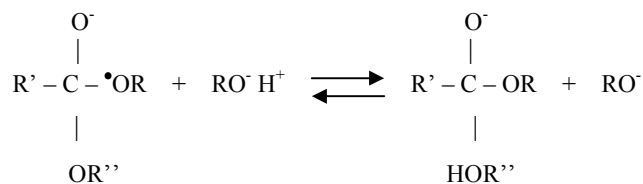
Pesquisadores contestam a primeira possibilidade (Gonçalves, 1980) com a argumentação de que uma base mais fraca não pode gerar outra mais forte.

Etapas do mecanismo da transesterificação com catalisador básico:

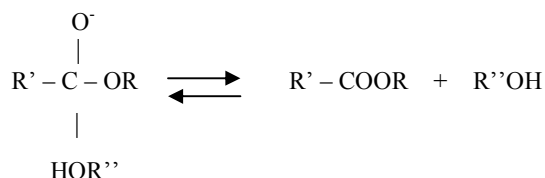
**1ª etapa:** O ataque do íon alcoóxido do catalisador no carbonil da molécula do triglicerídeo, resultando num produto intermediário tetraédrico.



**2ª etapa:** A reação do intermediário tetraédrico com o álcool reconstitui o íon alcoóxido do catalisador que é substituído pelo íon  $\text{RO}^-$  do álcool e a introdução do íon  $\text{H}^+$  no intermediário tetraédrico.



**3ª etapa:** Nesta última etapa o rearranjo do composto intermediário produz um éster de ácido graxo e um diglicerídeo.



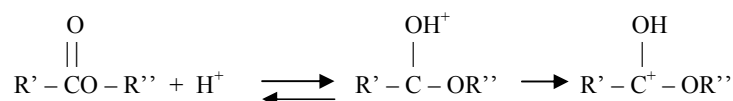
Onde R'' corresponde a uma molécula de diglicerídeo, R' corresponde à estrutura do ácido graxo e R o grupo alquil do álcool.

### 2.3. Mecanismo de transesterificação da catálise ácida.

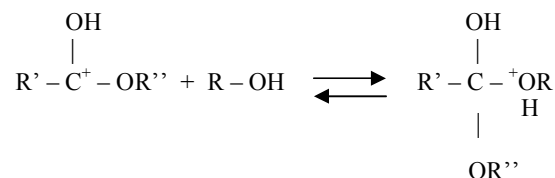
A transesterificação pode ser catalisada por ácidos inorgânicos tais como ácido clorídrico, ácido sulfúrico e ácido sulfônico.

O mecanismo da transesterificação para um monoglicerídeo pode ser também usada para diglicerídeos e triglicerídeos.

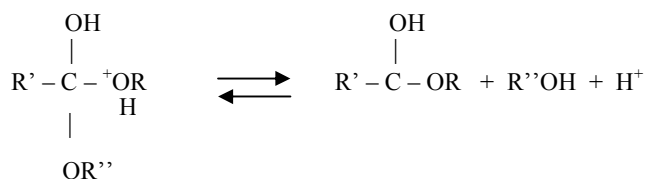
**1ª etapa:** O íon H<sup>+</sup> do catalisador ácido acarreta a protonação do grupo carbonila e a formação do carbocátion.



**2ª etapa:** O etanol promove um ataque nucleofílico no carbocátion, produzindo um composto intermediário tetraédrico.



Este intermediário tetraédrico elimina o glicerol, forma novo éster e regenera o catalisador:



### 3. Tecnologia desenvolvida pelo curso de Engenharia Química da Pontifícia Universidade Católica do Paraná

A matéria-prima utilizada na obtenção do biodiesel é o óleo de soja usado em frituras, cedido por uma confeitaria de Curitiba. O álcool selecionado para as reações de transesterificação e esterificação foi o etanol, por ser matéria-prima nacional e abundante. As reações são realizadas em duas etapas, sendo que na primeira usa-se um catalisador alcalino, o hidróxido de sódio ou o etóxido de sódio, e na segunda etapa usa-se um catalisador ácido, o ácido sulfúrico.

A reação efetuada em duas etapas é necessária porque o óleo usado em fritura ao ser submetido a temperaturas elevadas e na presença de água dos alimentos ocasiona a formação de ácidos graxos que interferem na reação catalisada por álcali.

Na primeira etapa a presença do catalisador alcalino dos ácidos graxos causa a formação de sabões orgânicos na forma de emulsão, dificultando a separação das fases dos produtos da reação (as fases éster e glicerina), além do excesso de álcool, que interfere no rendimento da reação.

Na segunda etapa, o catalisador ácido em excesso reconstitui os ácidos graxos eliminando o sabão do meio reacional.

A etanolise é então realizada pela reação entre os ácidos graxos e o álcool etílico na presença do catalisador ácido:



A água formada se agrega na fase glicerina com excesso de álcool.

A reação de formação do etil éster de ácidos graxos na segunda etapa atinge um rendimento alto em torno de 98%.

### 3.1 Primeira etapa – reação alcalina

As duas etapas das reações são efetuadas no mesmo equipamento, um reator em batelada, equipado com agitador tipo hélice, construídos em aço inoxidável 316.

Usa-se a relação molar 6:1 entre o álcool etílico e o óleo de soja, indicada na literatura para metanol (Freedman et. Al., 1984). Salienta-se que o álcool etílico pode ser tanto anidro quanto hidratado. A concentração do catalisador pode ser de 1% de NaOH ou 0,5% de etóxido de sódio, valores estes recomendados para a reação alcalina (Zhang et. Al., 2002).

A reação é feita à temperatura ambiente e o tempo de reação é de 30 minutos.

Não há separação das fases do término da primeira reação, assim como não é realizada nenhuma lavagem no produto formado.

### 3.2 Segunda etapa – reação ácida

As reações de transesterificação e esterificação são finalizadas em uma 2ª etapa, realizada no mesmo reator.

As condições da reação para a transesterificação do óleo de soja proposta por Freedman et. al. (1984) com 1% em massa de ácido sulfúrico em relação ao óleo vegetal e com relação molar de 30:1 de álcool etílico hidratado e óleo de soja são adequados para a 2ª etapa da reação.

O tempo de reação para esta etapa é de 60 minutos, com a velocidade de agitação de 400 rpm.

Terminada a reação, após 15 minutos de repouso as fases se separam. A fase superior é uma mistura de álcool etílico, água e glicerina, e a fase inferior é o biodiesel, constituído de etil ésteres de ácidos graxos que podem então ser separados por decantação.

O biodiesel é neutralizado pela adição de óxido de cálcio e, posteriormente, filtrado.

A fase composta por glicerina, álcool e água são separadas por destilação.

## 4. Resultados

### 4.1 Comprovação do rendimento em ésteres etílicos

Após cada etapa de reação, é coletada uma amostra de 10 mL do produto formado. Este, por sua vez é submetido a três lavagens com água e acrescido de uma solução contendo padrão interno (palmitato de etila) e hexano. A fase orgânica superior é então submetida à análise em cromatógrafo à gás (CG-FID CP-3800, marca Varian).

As condições operacionais que forneceram a melhor resolução para este tipo de análise foram:

- ✓ gás de arraste na coluna: hélio, pressão: 15 psi;
- ✓ detector: FID, temperatura: 275°C, sensibilidade:  $32 \times 10^{-12}$ , alimentação: hidrogênio (30ml/min), ar (300ml/min) e nitrogênio (25ml/min);
- ✓ injetor: 220°C, razão de split: 20:1;
- ✓ coluna: 50 m x 0.25 mm de WCOT sílica fundida com 0.20 micron de poli-etilenoglicol, especificada como CP-SIL 88 para ácidos graxos de ésteres metílicos (FAME) da Chrompack Capillary Column;
- ✓ programa de temperatura: 100°C por 3 minutos, rampa de 30 graus/min até 190°C, patamar de 20 minutos, rampa de 20 graus/min até 240°C e patamar de 2 minutos;
- ✓ tempo total de análise: 30,50 minutos;
- ✓ injeção: manual.

Por estequiometria da reação, concentração de reagentes utilizados e áreas relativas ao padrão interno, são calculadas as concentrações em ésteres etílicos provenientes do óleo de soja de fritura.

A Figura 3 demonstra os seguintes ésteres na ordem do tempo de retenção na coluna cromatográfica: padrão palmitato de isopropila, palmitato de etila, estearato de etila, oleato de etila, linoleato de etila e linolenato de etila, respectivamente.

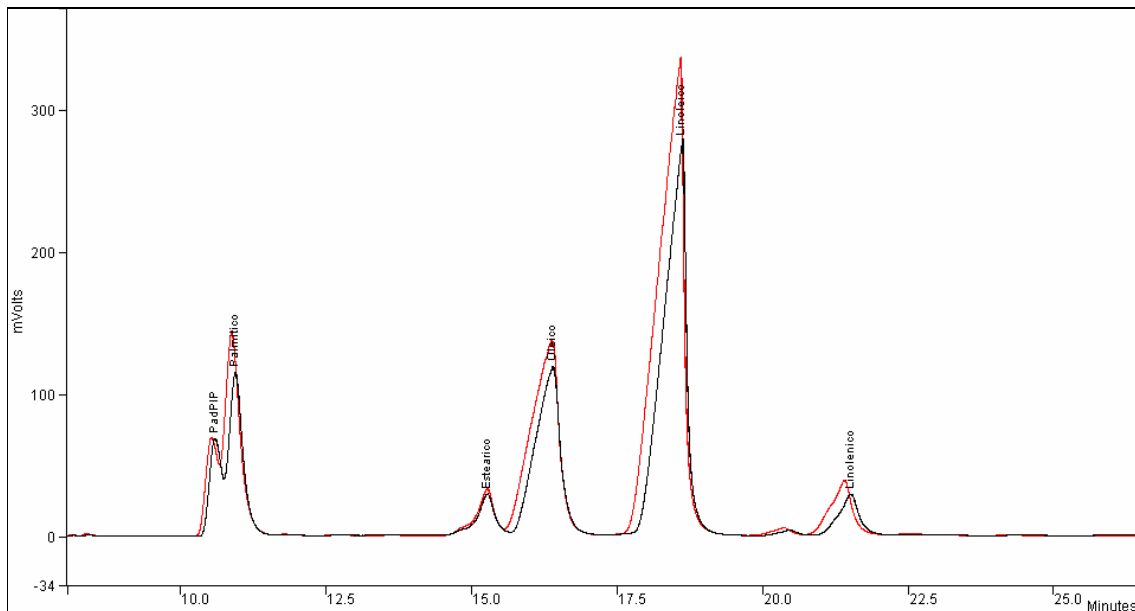


Figura 3: Cromatogramas dos ésteres encontrados na 1ª etapa de reação (catálise alcalina – em preto) e dos ésteres encontrados na 2ª etapa de reação (catálise ácida – em vermelho).

Percebe-se nitidamente o acréscimo na concentração de ésteres devido à 2ª reação ácida, de 86% de concentração de ésteres obtida na 1ª reação alcalina, há um aumento para 99,46% em ésteres etílicos ao final de todo o processo de fabricação do biodiesel.

#### 4.2 Testes de desempenho de mistura de biodiesel em óleo diesel

Foram efetuados testes de desempenho de uma mistura de 10% de biodiesel, produzido no Laboratório de Operações Unitárias do Curso de Engenharia Química da PUC/PR, em diesel de petróleo comercial. Os testes foram realizados no Laboratório de Termodinâmica Aplicada do Curso de Engenharia Mecânica da PUC/PR.

A mistura denominada B10, foi testada em motor diesel MWM 6.07 T GM T 400 de quatro tempos. A rotação máxima livre deste motor é de 4340 rpm, sendo a potência máxima segundo a norma ISO 1585 é de 160 cv (123 kW) a 3400 rpm e o torque máximo é de 375 N.m (383 kgf.m) a 2000 rpm. O dinamômetro Zollner, modelo ALFA 160 com capacidade máxima de 160 KW de potência, 400 N.m de torque, rotação máxima de 10000 rpm integrado ao equipamento PUMA COMPACT 5 que faz o controle do dinamômetro e processa a aquisição de dados, fazem parte dos equipamentos de teste. O motor é controlado pela carga nele aplicado pelo dinamômetro (Pianovski, 2001).

As curvas comparativas de desempenho da mistura B10 com óleo diesel e diesel puro, para as medições de potência (kW) e torque (N.m) variando a rotação (rpm) do motor estacionário estão mostradas nas figuras 4 e 5.

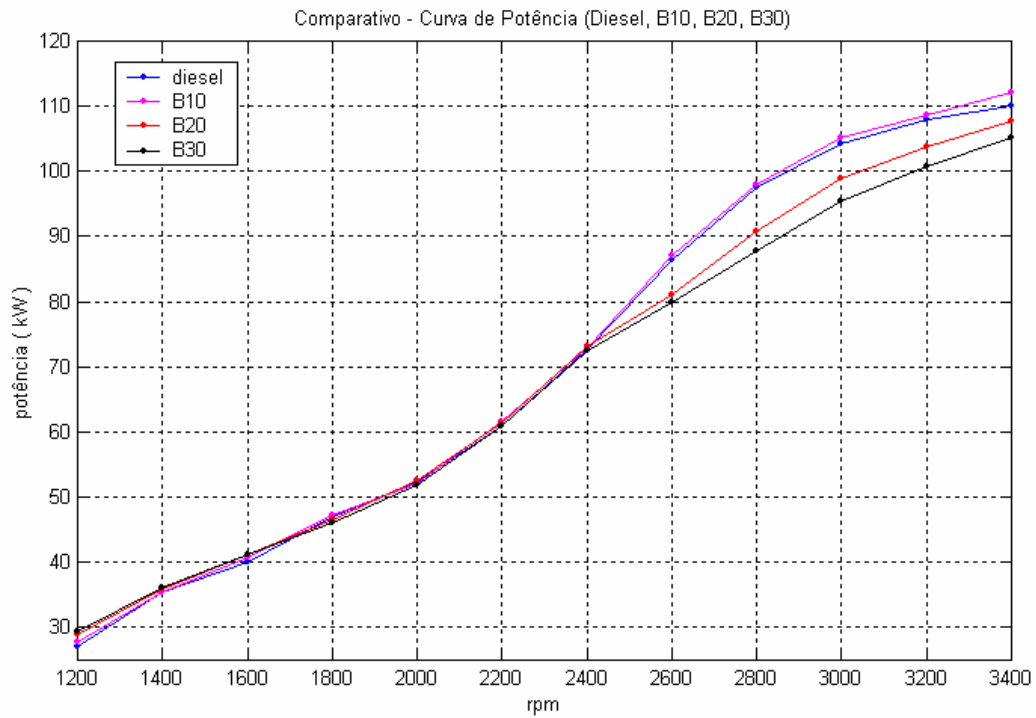


Figura 4: Comparativo – Curva de Potência (Diesel, B10, B20 e B30).

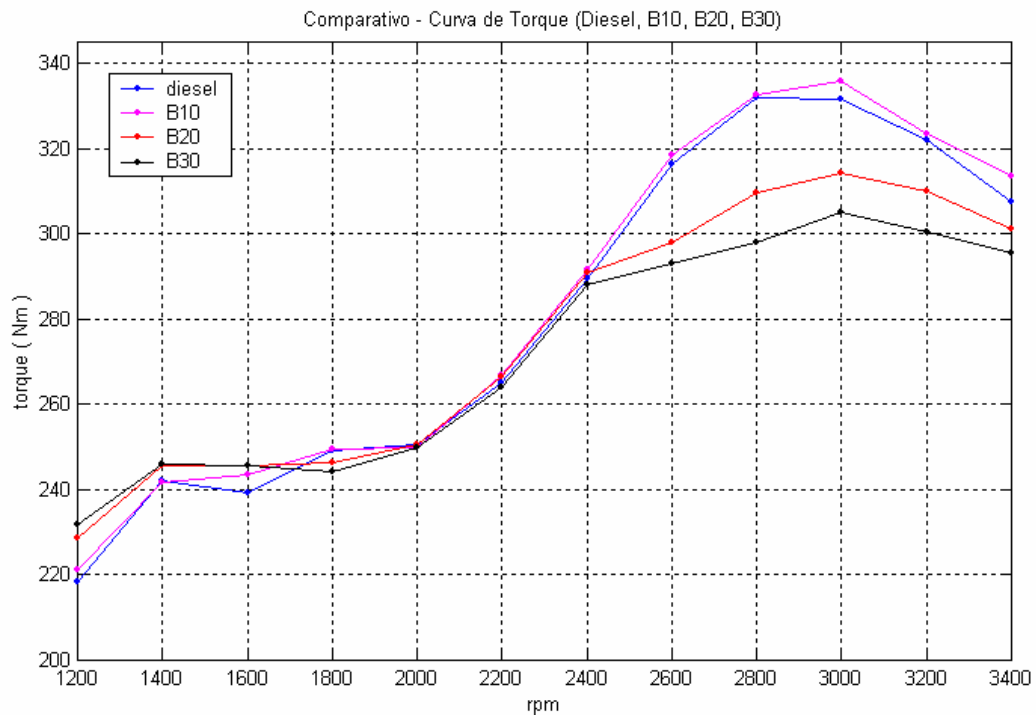


Figura 5: Comparativo – Curva de Torque (Diesel, B10, B20 e B30).

Os testes realizados tiveram a duração de 1 hora, segundo a norma NBR ISO 1585, para a mistura B10 e 30 minutos para as misturas B20 e B30.

O desempenho da mistura B10 com óleo diesel foi superior ao do óleo diesel em toda a faixa de rotação do motor, como demonstrado nas Figuras 4 e 5, respectivamente. Para as misturas B20 e B30, deve ser realizado uma maior

pesquisa quanto ao seu desempenho no motor Diesel, visto que até 2400 rpm, essas misturas apresentaram desempenho semelhante ao óleo diesel convencional.

O aluno de mestrado Luciano Souza Ribeiro Bueno repetirá os testes realizados até mesmo com outros óleos vegetais, de diversas oleaginosas.

## 5. Conclusão

A tecnologia para a fabricação de biodiesel a partir de óleo de soja usado em frituras e álcool etílico, desenvolvida na PUC/PR está consolidada pelos testes realizados.

Apenas serão confirmados, pela tese de mestrado do aluno Luciano Souza Ribeiro Bueno, do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica da PUC/PR, os testes das misturas B20 e B30 em motor estacionário Diesel, uma vez que na dissertação publicada por Pianovski Jr. (2001) estas diferenças para B20 e B30 não foram observadas nas 120 curvas de desempenho para torque e potência realizadas, também conforme norma NBR ISO 1585.

O uso do álcool etílico é a matéria-prima mais adequada para a fabricação de biodiesel no Brasil, pois ele não é tóxico e seu resíduo no biodiesel pode existir sem prejudicar o meio ambiente ou o desempenho e durabilidade no motor. As normas brasileiras para o biodiesel de álcool etílico deveriam levar em conta esta flexibilidade, simplificando o processo de fabricação. Esta fiscalização seria uma vantagem em relação ao metanol, que sendo tóxico as normas internacionais não permitem resíduos.

Apesar do domínio das reações para a fabricação do biodiesel com álcool etílico, é necessário a construção de uma unidade piloto para processamento 1000 L/dia de óleo vegetal, para a otimização dos equipamentos de processo e para recuperar o excesso de etanol da glicerina.

## 6. Agradecimentos

Agradecemos à Confeitaria Lancaster de Curitiba por ter fornecido o óleo de fritura aos nossos estudos.

## 7. Referências

- Almeida, N. H. de, Hoff, N. M., Gonçalves, D., Hass, B., “Produção de Ésteres Etílicos, Biodiesel, a partir de Óleos Vegetais e Álcool Etílico”, Patente PI0104107-0, Curitiba-Paraná, Brasil, 2001.
- Gonçalves, D., 1980, “Química Fina em Óleos Vegetais (Ésteres e Ácidos Graxos)”, Curitiba-Paraná, Brasil. 5 p.
- Encinar\*, J. M., González, J. F., Rodríguez, J. J., Tejedor, A., 2002, “Biodiesel Fuels from Vegetable Oils: Transesterification of *Cynara cardunculus* L. Oils with Ethanol”, *Energy & Fuel*, V. 16, pp. 443-450.
- Hoff Lis, N. M., 2004, “Levantamento de dados para a esterificação e transesterificação etílica do óleo de soja para projeto de uma unidade piloto”, Dissertação de Mestrado, Curitiba-Paraná, Brasil, 142 p.
- Meher, L. C., Sagar, D. V., Naik\*, S. N., 2004, “Technical aspects of biodiesel production by transesterification – a review”, *Renewable & Sustainable Energy Reviews*, New Delhi, India. 21 p.
- Pianovski Júnior, G., 2001, “Utilização de misturas de óleo diesel e ésteres etílicos de óleo de soja como combustíveis alternativos: análise do desempenho e processo de combustão no motor diesel”, Dissertação de Mestrado, Curitiba-Paraná, Brasil, 146 p.
- Tickell, J., 2000, “From the Fryer to the Fuel Tank: The Complete Guide to Using Vegetable Oil as an Alternative Fuel” Tickell Energy Consulting, Tallahassee, FL, 162 p.
- Zhang, Y., Dubé, M. A., McLean\*, D. D., Kates, M., 2003, “Biodiesel production from waste cooking oil: 1. Process design and technological assessment”, *Bioresource Technology* 89, Canada. 16 p.

## WASTE COOKING OIL TRANSFORMED INTO BIODIESEL

Nei Hansen de Almeida.

Pontifícia Universidade Católica do Paraná, Rua Imaculada Conceição, 1155, Prado Velho, Curitiba/PR, Brazil.  
nei.almeida@pucpr.br

Nicole Marques Hoff.

Pontifícia Universidade Católica do Paraná, Rua Imaculada Conceição, 1155, Prado Velho, Curitiba/PR, Brazil.  
nicole.hoff@ufpr.br

Lucas Leone Zulim.

Pontifícia Universidade Católica do Paraná, Rua Imaculada Conceição, 1155, Prado Velho, Curitiba/PR, Brazil.  
lucas.zulim@zipmail.com.br

**Abstract**

Vegetable oils obtained from renewable cultures like soybean oil, sunflower oil and forage turnip oil, they can be transformed into biodiesel by reversible transesterification and esterification reactions with ethanol in presence of catalysts, forming ethyl esters (biodiesel) and glycerol.

Most of the biodiesel fabrication commercial process uses methanol as reagent.

Due the great amount of free fatty acids in the spent cooking oil compared with vegetable oil, was necessary the performance of two reactions, one of transesterification and another of esterification to obtain ethyl ester at high level.

The biodiesel used as fuel produce dioxide emission due the explosion reactions with compressed air in the diesel engine. This gas can be recycled by photosynthesis fixing carbon on soil and liberating oxygen to the atmosphere. The carbon dioxide liberated by fossil fuel are not absorbed by plants remaining in the atmosphere causing the greenhouse effect.

The high temperature used in vegetal oils, frying vegetable oil of foods, oxidates the oil and forms free fatty acids, that are transformed into biodiesel using type and amounts of appropriated catalysts in the reaction, since the present humidity in the waste cooking oil increases the acid value of the oil too.

The technology developed by Unit Operation laboratory PUC-PR Chemical Engineering course, produces 30 liters by each batch whit ethyl esters yields above 98%.

Testes in stationary Diesel motor for mix B10, had resulted in increased values of torque and power for all speed motor if compared with 100% conventional diesel.

Keywords: biodiesel, waste cooking oil, transesterification, esterification, Diesel engine.

# ANALYSIS AND COMPARISON OF TWO DETAILED KINETIC MODELS FOR THE THERMAL OXIDATION OF ETHANOL-OXYGEN MIXTURES IN HIGH TEMPERATURES

## Leonel Rincon Cancino

Universidade Federal de Santa Catarina  
Campus Universitário, Trindade.  
CEP 88040-900, Florianópolis, SC, Brasil.  
leonel@labcet.ufsc.br

## Amir Antônio Martins Oliveira Jr

Universidade Federal de Santa Catarina  
Campus Universitário, Trindade.  
CEP 88040-900, Florianópolis, SC, Brasil.  
amirol@emc.ufsc.br

*Abstract.* This work shows the comparison of two kinetic models, highly recognized in the literature for the thermal oxidation of hydrocarbons. One, the Marinov's mechanism, was developed specifically for the ethanol, an oxygenate hydrocarbon, and this mechanism was tested numerically and was compared with results of several experimental setups, obtaining good results Marinov (1998). The Konnov's mechanism, was developed for hydrocarbons with up to three carbons in the molecular structure, this mechanism also was validated for several hydrocarbons with different experimental setups Konnov (2002 b). The Konnov's mechanism has not been validated for oxygenate hydrocarbons, however, with an accurate kinetic database for the ethanol, it can reproduce the experimental results satisfactorily Konnov (2005).

The Marinov's mechanism is composed of four chemical elements, 57 chemical species and 383 elementary reactions, this mechanism does not have the kinetics for the nitrogen oxidation. The Konnov's mechanism is composed of five chemical elements, 127 chemical species and 1207 elementary reactions, this mechanism has a full kinetic database for the nitrogen oxidation. In this work, the kinetic database for the nitrogen oxidation in the Konnov's mechanism was eliminated, this fact to permit simplify and reduce the number of variables in the data post-processing. The Konnov's mechanism without the database for the nitrogen oxidation is composed of five chemical elements, 93 chemical species and 777 elementary reactions.

Preliminary results show that the Konnov's mechanism indicates a small induction period in relation to the Marinov's mechanism.

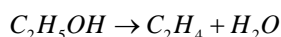
**Keywords.** Ethanol, Detailed Kinetic Mechanism. Thermal Oxidation.

## 1. Introduction

Ethanol ( $C_2H_5OH$ ) is a very important energy carrier that can be produced from renewable energy resources. It can be used as a fuel extender, octane enhancer and oxygen-additive in, or as alternative, neat fuel to replace reformulated gasoline. Ethanol also has potential as a hydrogen carrier for fuel cell applications. Figueroa (2006) has been developed a numerical model for the steam reforming of ethanol, and Figueroa and Oliveira (2005) has reported a thermodynamic analysis of the steam reforming of ethanol for fuel cell applications.

## 2. High temperature ethanol oxidation.

A small quantity of works in the thermal oxidation of ethanol is actually reported in the literature. The work of Marinov (1998) is one of these works. His work emphasized the high sensitivity of experimentally measured ignition delay during shock induced decomposition of rich ethanol-oxygen mixtures to the rate constants of ethanol decomposition reactions. Marinov considers the two major ways of branching of ethanol oxidation: Molecular dissociation and H-Abstraction. Li (2004) was reported a numerical and experimental study of the decomposition of ethanol, Li encountered that several parameters in the Marinov's mechanism are underestimating one of the channels in the molecular dissociation of ethanol. The channel of dissociation described for the reaction:



producing  $C_2H_4$  and  $H_2O$  is pointed for Li (2004) as the major channel in the thermal decomposition of ethanol. The target in this work is to validate numerically the performance of the Konnov's mechanism for the thermal oxidation of mixtures of ethanol-oxygen. The Konnov's mechanism has a full kinetic database for high temperature oxidation



for hydrocarbons with up tree carbons, this kinetic database is including several reactions for the thermal oxidation of ethanol, and consider the two principals decomposition routes described for Marinov (1998) and Li (2004). The Figure 1 compare the number of reactions involved in the two detailed models analyzed in this work for the thermal oxidation.

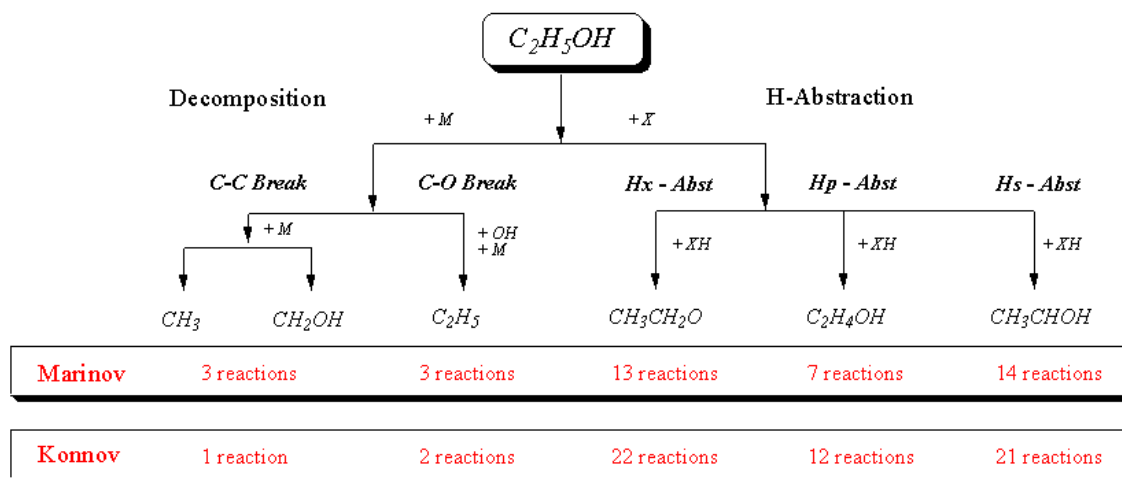


Figure 1 Main ethanol high-temperature oxidation routes.

The response of temperature for the two kinetics models is showed in the Figure 2

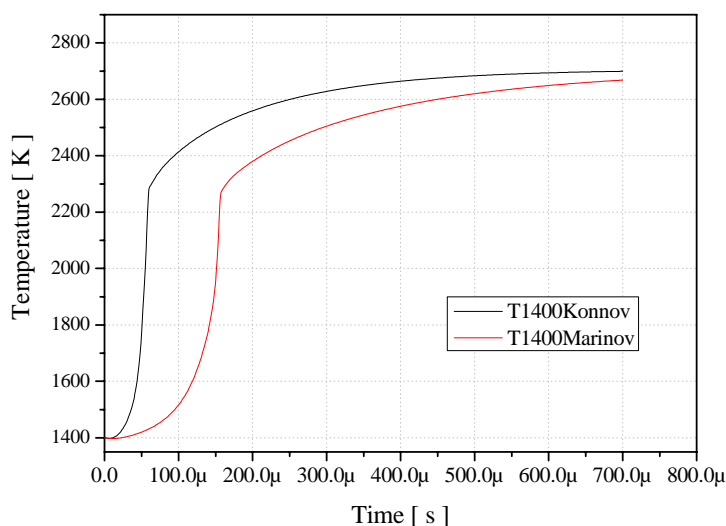
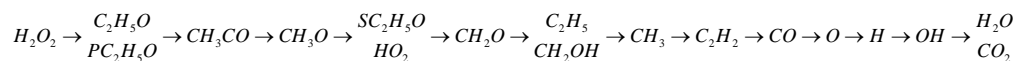


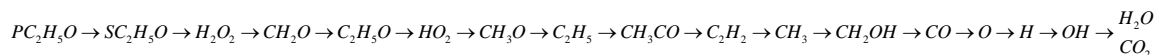
Figure 2 Temperature evolution for the two detailed models for the ethanol-oxygen mixture.

The Figure 2 shows that the prediction for the induction period for the thermal ignition in the two models is different. The Konnov’s mechanism have a kinetics advanced in the time (100 μs Approx.) in relation to Marinov’s mechanism, for the same initial temperature, the prediction for the final temperature is equal in the two kinetics models, this fact indicate that the thermodynamic database is consistent in the two mechanisms.

We have observed a difference in the species evolution predicted in the two mechanisms for the oxidation of ethanol in stoichiometric conditions. The formation and posterior destruction of chemical species in the Konnov’s mechanism is



in the Marinov’s mechanism is



This chemical species are selected as the major relevance in the chemical process. The Konnov's mechanism is starting the formation/destruction with the hydrogen peroxide ( $H_2O_2$ ), and the Marinov's mechanism is starting the formation/destruction with an anion ( $HOC_2H_4O_2$ ) followed by  $PC_2H_5O$ . Last studies of thermal oxidation in hydrocarbons show that the hydrogen peroxide is the first chemical specie in starting the process of formation/destruction, Cancino (2004), Cancino and Oliveira (2004, 2005, 2005b). The sequence of formation/destruction is the same from carbon monoxide to water and carbon dioxide. The Marinov's mechanism is starting with the isomers  $PC_2H_5O$  and  $SC_2H_5O$  followed by hydrogen peroxide. We have encountered that the production of hydroxyl radical is equal from the two kinetics models. The Konnov's mechanism overestimate the production of acetylene, underestimate the production of hydrogen peroxide, overestimate the production of hydroperoxy radical ( $HO_2$ ) and overestimate the production of ethyl radical ( $C_2H_5$ ). Two important aspects, the fact of overestimate the production of acetylene and ethyl radical is influencing in the induction period, the kinetic of the oxidation of the acetylene is quick in relation to other hydrocarbons, and this effect is yield for the influence of the in saturation of atoms of hydrogen in the molecular structure of acetylene, Cancino and Oliveira (2005). The overestimation in the production of ethyl radical also can to agree a contribution to the global effect of overestimate the induction period, this radical have a great capacity of oxidation, in relation to methyl and others radicals. Great easy oxidations in the chemical species involved in the process reflect an overestimation in the induction period for the thermal ignition.

### 2.1. Sensitivity Analysis.

Sensitivity analysis of a problem solution allows quantitative understanding of how the solutions depend on the various parameters contained in the model. A first order sensitivity analysis was applied in the two detailed models used in this work. The software Chemkin 3.7.1 was used for this proposes. We are selected two parameters to obtain the sensitivity analysis, Temperature and Hydroxyl radical  $OH$ . We believe that these two parameters can explain the difference in the induction period for the two models.

The Figure 3 show the sensitivity coefficients of temperature for the major, or representative, elementary reactions in the Konnov's mechanism, and the figure 4 show the sensitivity coefficients for the hydroxyl radical.

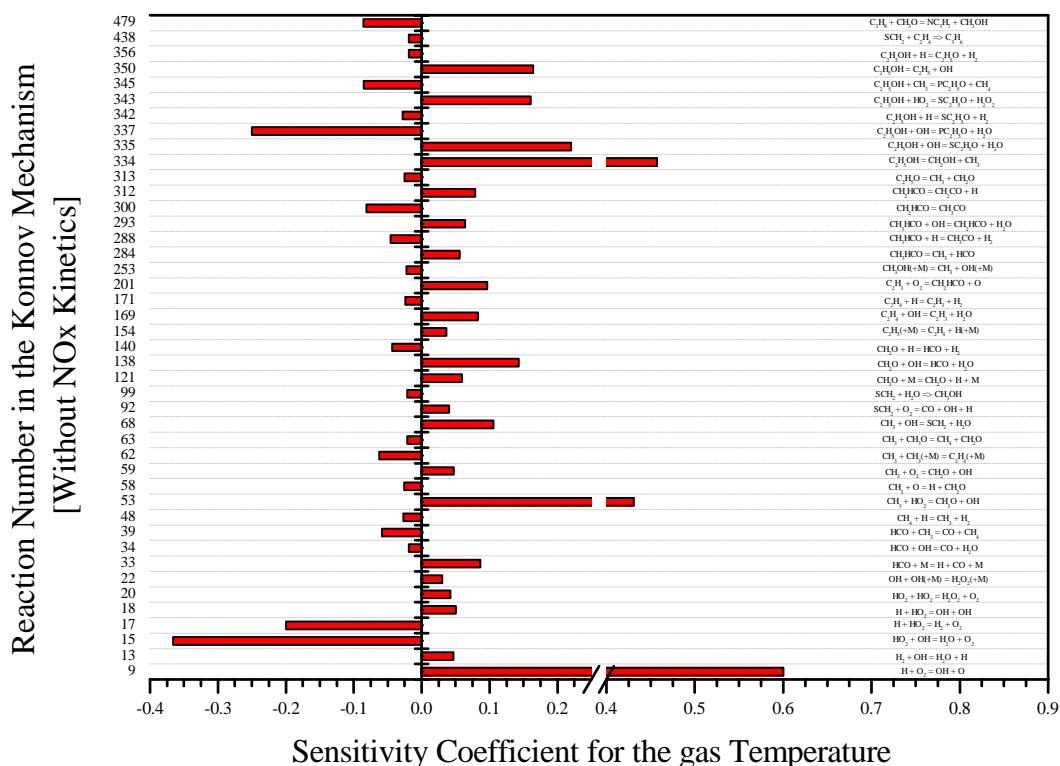


Figure 3 Sensitivity Coefficient for the gas temperature in the Konnov's Mechanism.

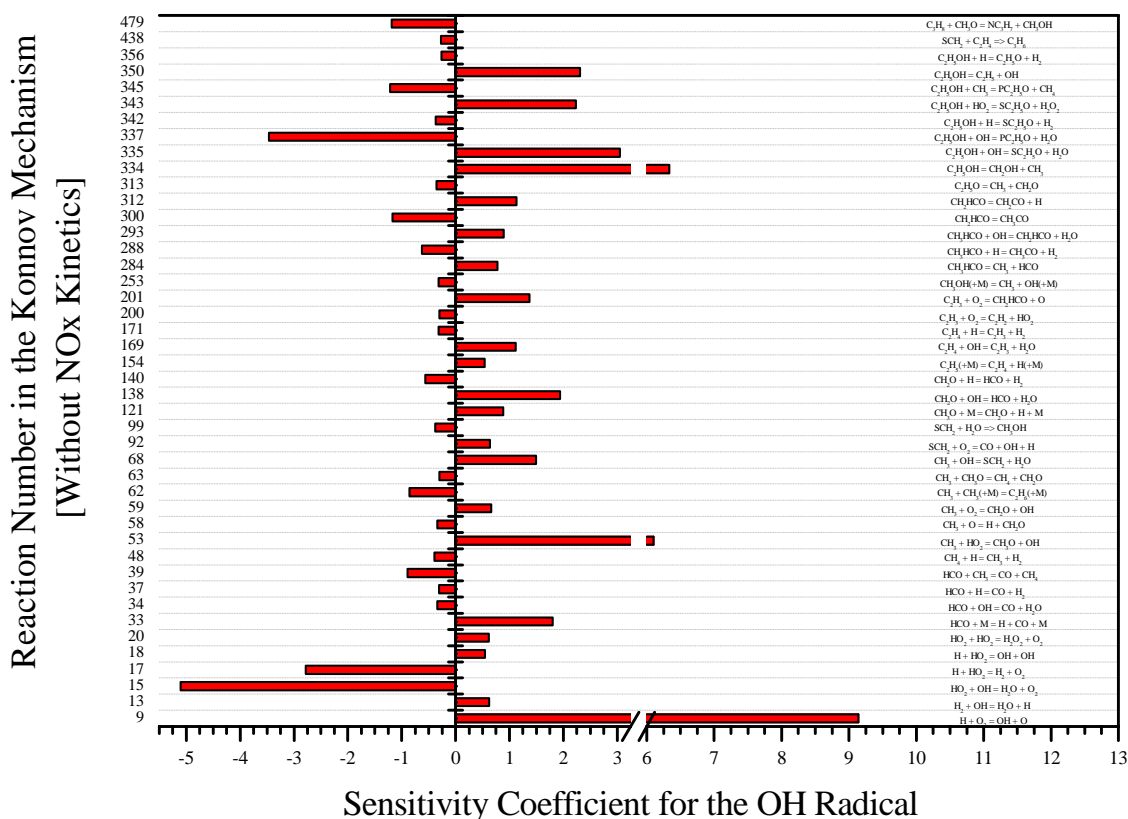
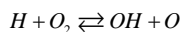


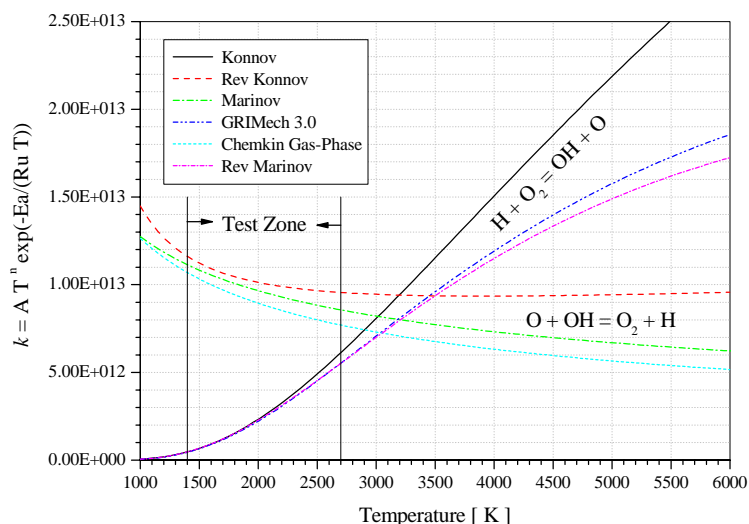
Figure 4 Sensitivity Coefficient for the Hydroxyl radical in the Konnov's Mechanism.

The sensitivity analysis indicates several elementary reactions as being representatives in the kinetic structure for the temperature response. These same sets of reactions are pointed for the sensitivity analysis as being the principals for the hydroxyl radical. This set of reactions is formed of several elementary reactions of the  $H_2 - O_2$  system and all reactions involving the primary degradation of the ethanol in the thermal oxidation, in other words, the reactions of molecular dissociation and the H-Abstraction of ethanol. A similar methodology applied to Marinov's mechanism yield a set of elementary reactions with the same characteristics.

Salvi (1975) indicates that the most important reaction in the  $H_2 - O_2$  system in high temperatures is:



We compare this principal reaction of the  $H_2 - O_2$  system in the two models, this reaction is written in the two models, but in the Marinov's Mechanism this reaction is written in the back form. The Chemkin program compute the forward reactions rates with the Arrhenius parameters listed in the mechanism, and the back rates is calculated from chemical equilibrium. The CHEMRev program of Rolland and Simmie (2004) was used for calculate the reverse Arrhenius of the reaction to compare the reaction rates in two mechanisms. The Figure 5 shows the comparison.

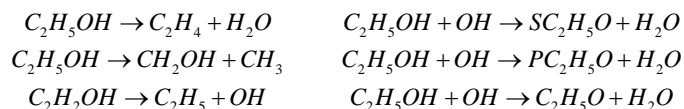


**Figure 5 Comparison of the several reference data of the reaction  $H + O_2 \Rightarrow OH + O$**

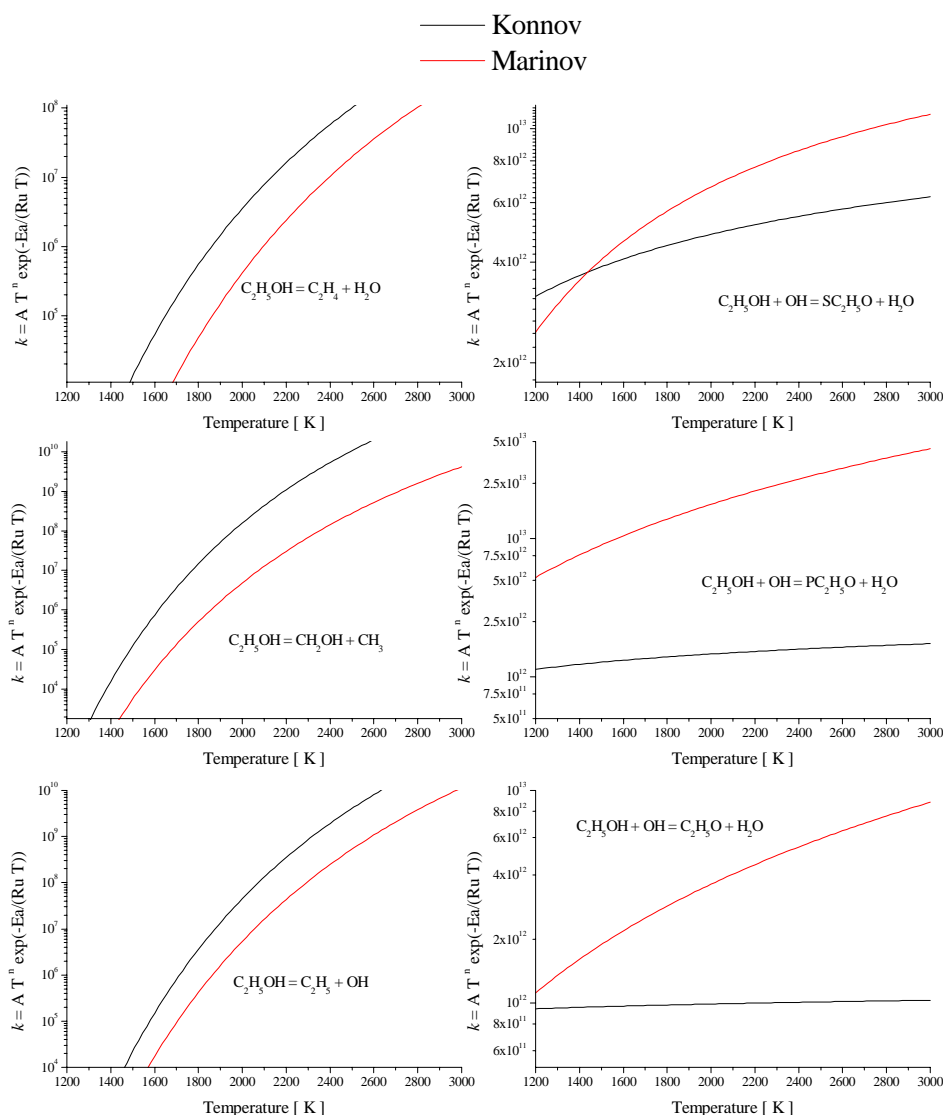
The Figure 5 presents a relative coherence in the several set of parameters for the reaction rates, forward and backward for the reaction  $H + O_2 \Rightarrow OH + O$  in the test zone. This test zone is the range of numerical application in this work.

The Figure 5 indicate that the kernel kinetic of the system  $H_2 - O_2$  in the Konnov's and Marinov's mechanisms are consistent.

The other part of the set of reactions indicates for the sensitivity analysis is the set of reactions relating the starting of the degradation of the ethanol. We have encountered several differences in the Arrhenius parameters in the two mechanisms for these reactions. A set of six reactions are reported for several authors in the literature, Marinov (1998), Li (2004). Three reactions involving the break of the C-C and C-O chemical bond in the molecular structure of ethanol, and three reactions involving abstractions of atoms of hydrogen of the molecular structure, see Figure 1. The reactions are:



The figure 6 show the comparison of the reaction rate in the test zone for these six reactions.



**Figure 6 Comparison of the reaction rates of the major elementary reactions for the primary degradation of the ethanol, in the two kinetics models**

The Figure 6 show that the Konnov’s mechanism is underestimating the break of bonds C-C and C-O and is overestimate the H-abstraction channels in relation to Marinov’s mechanism.

Li (2004) indicates that the methodology of calculation, employed for Marinov, in the determination of Arrhenius parameters of reactions of C-C and C-O break (Molecular Dissociation), is not adequate. The fact of separate the two channels in independents calculations can allow errors in the results for the reaction rates.

Li (2004) suggest others Arrhenius parameters for two of tree channels of dissociation for a pressure of 1 atm:

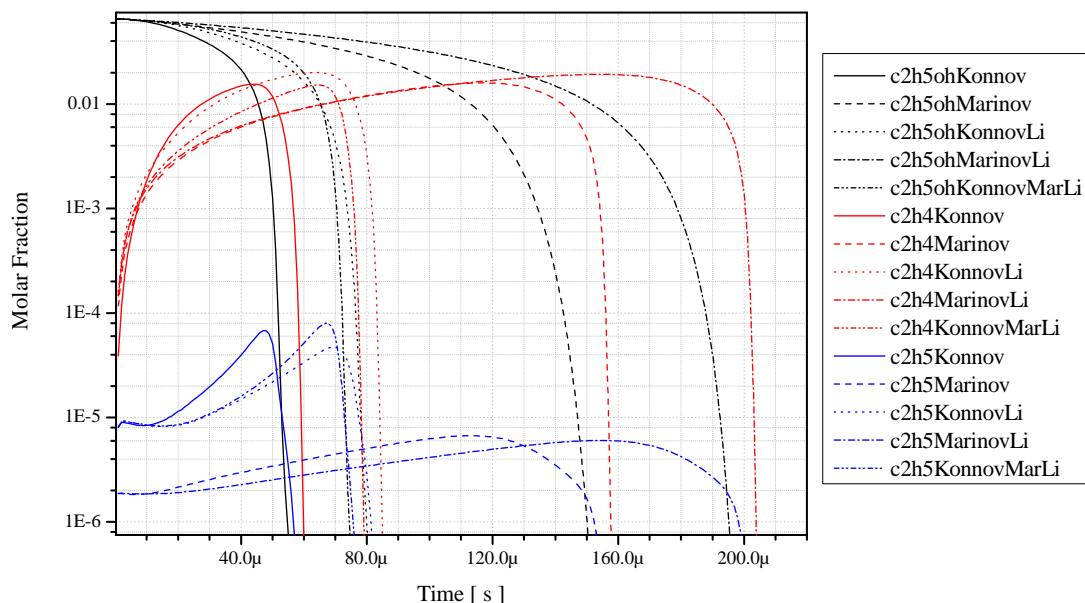
$$C_2H_5OH \rightarrow C_2H_4 + H_2O$$

$$A_o = 8.80 \cdot 10^{25} \quad n = -3.68 \quad E_a = 70798.0$$

$$C_2H_5OH \rightarrow CH_2OH + CH_3$$

$$A_o = 1.26 \cdot 10^{51} \quad n = -10.59 \quad E_a = 100868.28$$

We have taken these parameters and replaced in the Marinov's mechanism and also in the Konnov's mechanism. We have taken the Arrhenius parameters of the *H*-Abstraction routes of the Marinov's mechanism and replaced in the Konnov's mechanism. The Figure 7 shows the results of these different alterations in the two detailed models.



**Figure 7 Time-evolution of ethanol, ethylene and ethyl radical in the kinetics models with the alterations in the Arrhenius parameters.**

The Figure 7 shows that the fact of including the Arrhenius parameters suggested for Li (2004), the consumption rate of ethanol is diminished for all combinations of alteration of parameters. In the Konnov's mechanism, the two set of parameters for the molecular dissociation of ethanol yield a great amount of ethylene, and diminish the amount of ethyl radical, but, increase the permanence time of these two species, adding the set of parameters for the *H*-abstraction of Marinov, in junction with the Li parameters, the productions of ethylene and ethyl radical is the same in relation to original Konnov's mechanism, also increase the permanence time of these two species.

In the Marinov's mechanism the inclusion of the set of Arrhenius parameters of Li (2004), cause a strongly variation in the permanence time of ethylene and the ethyl radical.

## 2.2. Conclusions

Two kinetics models was analyzed for the thermal oxidation of ethanol, the Konnov's mechanism, and the Marinov's mechanism. We have tested the two models with an initial temperature of 1400 K and 1 atm, in stoichiometric compositions for the reactants.

The Konnov model is a good and widely know kinetic model for several hydrocarbons, but is not reported experimental validations for oxygenate hydrocarbons, however, this kinetics mechanism shows a good performance and it is able to reproduce qualitatively the primary degradation of ethanol. The kinetics of the Konnov's mechanism is defaced in the time, but, is able to reproduce the same final temperature of the Marinov's mechanism.

The Li (2004) set of parameters for the molecular dissociation of ethanol produce a variation of in the prediction of the induction period for the thermal ignition of ethanol in the two kinetic models.

## 3. Acknowledgements

The authors gratefully acknowledge the Graduate Program in Mechanical Engineering at UFSC – POSMEC and the CNPq, for the support given in the development of this work.

#### 4. References

- Cancino, L. R. and Oliveira, A. A. M., 2005 b, “Analysis of the thermal ignition and induction time of premixed ethanol and air combustion”. Proceedings of the 18th International Congress of Mechanical Engineering. COBEM 2005. Brazil.
- Konnov, A., 2000, “Alexander Konnov’s Combustion Mechanism”, available in <http://homepages.vub.ac.be/~akonnov/>.
- Konnov (2002 b) “Performance of the mechanism.” disponível em: <http://homepages.vub.ac.be/~akonnov/science/mechanism/test.html>.
- Marinov, N. M. 1998. “A detailed chemical kinetic model for high temperatura etanol oxidation”. Lawrence Livermore Nartional Laboratory. USA.
- Cancino, L. R. and Oliveira, A. A. M., 2004, “Análise de equilíbrio químico, cinética química da ignição térmica e propagação de chama plana laminar de misturas de hidrocarbonetos leves com ar”. Proceedings of the ENCIT 2004, Rio de Janeiro, Oct. 2004, 11 pp.
- Cancino, L. R. and Oliveira, A. A. M., “Influência da insaturação do carbono sobre o equilíbrio químico e ignição térmica de hidrocarbonetos alifáticos em ar”. Proceedings of the X Latinamerican Congress of Heat and Mass Transfer. 2005, Caracas, Venezuela.
- Cancino, L. R., 2004, “Análise de equilíbrio químico, cinética química da ignição térmica e propagação de chama plana laminar de misturas de hidrocarbonetos leves com ar”. Dissertation of Master degree at the Federal University of Santa Catarina, 2004, in Portuguese, 245 pp.
- Konnov, A., 2005, “Personal Communication”.
- Gardiner, W.C., “Gas-Phase Combustion Chemistry”. 2000 Springer-Verlag, New York.
- Figuroa, P. R. F. “Análise e desenvolvimento de reformador compacto de etanol para obtenção de hidrogênio para a célula a combustível” Dissertation of Master degree at the Federal University of Santa Catarina, 2005, in Portuguese. 145 pp.
- Figuroa, P. R. F. and Oliveira, A. A. M. “Analise termodinâmica da reforma a vapor de etanol” Proceedings of the X Latinamerican Congress of Heat and Mass Transfer. 2005, Caracas, Venezuela.
- Salvi, G. “La Combustión, teoría y aplicaciones” editorial Dossat, S. A. 1975, España.
- Rolland, S. and Simmie, J. M (2004) Available in <http://www.nuigalway.ie/chem/combust.htm#downloads>
- Li, J., Kazakov, A., Dryer, F. L. “Experimental and numerical studies of ethanol decomposition reactions” Department of Mechanical & Aerospace Engineering, Princeton University, 2004. Available in: [http://www.princeton.edu/~combust/research/publications/Ethanol%20Decomposition%20\(Li%20et%20al%20J%20Phys%20Chem%20A.In%20Press%202004\).pdf](http://www.princeton.edu/~combust/research/publications/Ethanol%20Decomposition%20(Li%20et%20al%20J%20Phys%20Chem%20A.In%20Press%202004).pdf)

#### 5. Copyright Notice

The author is the only responsible for the printed material included in his paper.

## MODELO MATEMÁTICO PARA PREVER A VAPORIZAÇÃO EM ANTECÂMARAS DE COMBUSTÃO

### Marcos Freitas de Moraes

Departamento de Matemática – Unioeste – Caixa Postal 520, Cep 85903-000 – Toledo – Paraná - Brasil  
mfreitas@unicentro.br

### Liliana Madalena Gramani Cumin

Departamento de Matemática – UFPR – Caixa Postal 19044, Cep 81531-990 – Curitiba – Paraná - Brasil  
gramani@mat.ufpr.br

**Resumo.** Adulterações profundas nos combustíveis atualmente utilizados, alteram os resultados e as previsões quanto ao desempenho, rendimento e emissões de poluentes. A qualidade dos combustíveis tem sido muito questionada, de forma que o refino do petróleo assume um perfil extremamente importante para desenvolver novas tecnologias. A pesquisa destes novos processos estende a análise do combustível como um sistema físico de multicomponente. Sendo fundamental o conhecimento dos mecanismos de evaporação e combustão das gotas para uma melhor compreensão do fenômeno de combustão. Assim, a modelagem matemática inicia-se com a identificação do sistema, em seu estado termodinâmico, o qual é definido por algumas propriedades, tais como, energia interna, entalpia, calores latentes de vaporização de substâncias puras, pressão de vapor e calor específico. Essas propriedades dependerão de dimensões fundamentais tais como comprimento, tempo, massa, temperatura e quantidade de substância. Com isto, pode-se expressar um sistema de equações diferenciais ordinárias de 1ª ordem no qual, algumas equações são calculadas por método algébrico, enquanto que, as equações da variação da temperatura das gotículas e da temperatura do gás têm suas aproximações através do método numérico de Runge-Kutta de 4ª ordem.

*Palavras chave: combustão, vaporização, método numérico.*

### 1. Introdução

Para uma melhor compreensão do fenômeno da combustão, (Kuo, 1986) comenta que é fundamental o conhecimento dos mecanismos de evaporação e combustão das gotículas. Para a combustão ocorrer com eficiência, é necessária uma mistura de combustível e ar. Em casos especiais a mistura é separada na combustão, mas em grande parte do processo de combustão por vaporização isto ocorre ao mesmo tempo. A combustão por vaporização ocorre nos motores dos foguetes que utilizam combustíveis líquidos, turbinas de gás, motores de automóveis movidos a álcool, gasolina e diesel, caldeiras industriais, entre outros. Em meio a esta variedade de aplicações, os modelos estudados e desenvolvidos para a combustão por vaporização reduzem os custos dos projetos, tendo assim, um papel importante no sistema.

Nesta pesquisa foi desenvolvido um "software" que analisa uma mistura combustível através de um sistema multicomponente multigotículas. A mistura será selecionada pelo usuário bem como o raio das gotas, a quantidade de gotas e as frações mássicas de cada componente. Com estes dados de entrada, o "software" calculará várias equações que serão chamadas de equações auxiliares para posterior substituição nas equações diferenciais de 1ª ordem. Duas equações diferenciais de 1ª ordem terão sua solução pelo método numérico de Runge-Kutta de 4ª ordem. Os resultados calculados pelo "software" são apresentados em gráficos e tabelas.

### 2. O Estudo da Vaporização

O estudo da vaporização envolve diversas áreas da engenharia referentes à dinâmica dos fluidos, transferência de calor e massa, atomização e dinâmica multifase. A solução de sistemas deste tipo inclui a solução de equações de conservação da massa, da energia e do movimento, para cada fase (Schmehl *et al.*, 1986). Em algumas aplicações o fluxo de ar não é afetado pela presença das gotas, noutras ele é dependente destas, como no caso da nossa pesquisa.

Os modelos de vaporização apresentam-se com grande aceitação nas áreas de pesquisa e um dos seus objetivos principais é a redução de tempo e custo no desenvolvimento do processo, mesmo onde a modelagem é relativamente simplificada, os testes são caros, as penalidades por defeitos nos testes são severas e o tempo de desenvolvimento é limitado. Por exemplo, um modelo unidimensional de vaporização que é empregado para estimar a performance dos combustíveis líquidos dos foguetes demorou vinte anos para ser desenvolvido (Schmehl *et al.*, 1986).

O nosso estudo de vaporização visa analisar o comportamento dos combustíveis na antecâmara de combustão através das gotículas geradas por esta atomização, em seu estado termodinâmico.

A termodinâmica é uma ciência com amplas aplicações na área tecnológica. O seu desenvolvimento tem se ampliado fortemente devido a resultados computacionais que sofisticam os estados de equilíbrio e a análise de suas perturbações (Smith *et al.*, 1986). Assim, a modelagem termodinâmica tem a sua importância fundamental para o



avanço do conhecimento científico, o qual é definido por algumas propriedades mensuráveis, tais como energia interna, entalpia, calores latentes de vaporização de substâncias puras, pressão de vapor e calor específico. Essas propriedades dependerão de dimensões fundamentais tais como comprimento, tempo, massa, temperatura e quantidade de substância. As propriedades físico-químicas dos compostos também serão consideradas sendo descritas como as propriedades de uma mistura envolvendo a densidade, a massa atômica e molecular, a massa molar, o número de mols, a fração mássica, a difusividade mássica e o coeficiente de transferência de calor.

### 3. A Estrutura do Modelo de Vaporização Proposto

O modelo de vaporização proposto nesta pesquisa terá como base, um sistema de equações diferenciais ordinárias de 1ª ordem que envolve:

- a variação do raio adimensional das gotas;
- a variação do quociente entre a pressão parcial dos compostos pela temperatura do gás;
- a variação do número de mols de vapor de água e do combustível evaporado;
- a variação da fração volumétrica da água;
- a variação da massa de vapor de água;
- a variação da temperatura das gotas;
- a variação da temperatura do gás.

O sistema de equações diferenciais é constituído de  $2n+m+4$  equações diferenciais ordinárias de 1ª ordem, onde  $n$  é a amostra de raios de gotas e  $m$  é o número de compostos contidos no combustível.

Assume-se que a antecâmara contém combustível líquido na forma de gotas e ar com certa umidade. A umidade relativa tende a aumentar no decorrer do processo, e quando chega a 100% o ar fica saturado de vapor da água e passa a ocorrer condensação do mesmo, formando água líquida (Sirignano, 1986). Como a vaporização é um fenômeno endotérmico, a temperatura da antecâmara decresce, podendo atingir valores abaixo de 0°C. Neste caso, passa a haver congelamento da água condensada, formando gelo. Tanto a condensação quanto a solidificação são fenômenos exotérmicos, logo abrandam a queda de temperatura.

O combustível é formado por uma composição de compostos definida pelo usuário. Em seu estágio atual, o modelo considera que os diversos compostos evaporam à mesma taxa, logo suas concentrações permanecem constantes. Devido a isto a densidade do combustível também é considerada constante.

Uma simulação da mistura injetada na antecâmara de combustão por um atomizador, isto é, da vaporização, é feita através de um raio médio das gotas fornecido pelo usuário, o qual gera uma distribuição para os raios das gotas. Também serão fornecidos quantos diâmetros diferentes das gotas serão utilizados na distribuição e os compostos desejados com as suas respectivas frações mássicas. Posteriormente, determinadas quantidades são calculadas para que seus valores sejam inseridos nas equações. Estas quantidades referem-se ao:

- cálculo dos volumes iniciais das gotas;
- cálculo da densidade do estado gasoso;
- cálculo das difusividades mássicas;
- cálculo das pressões de vapor dos compostos;
- cálculo do coeficiente de transferência de calor;
- cálculo dos calores específicos do estado gasoso;
- cálculo do volume da antecâmara de combustão ocupado pelo ar necessário à combustão completa das gotas;
- cálculo da massa do estado gasoso.

As condições iniciais de pressão, temperatura e umidade também serão fornecidas como dados de entrada.

O método numérico aplicado a este PVI (problema de valor inicial) será o método de Runge-Kutta de 4ª ordem e o programa que irá encontrar a solução do sistema foi desenvolvido na plataforma Lahey-Fujitsu Fortran 95 v5.0.

### 4. Hipóteses Consideradas no Modelo que Envolve o Estudo da Gota

O processo individual da gota é um aspecto importante para o modelo de vaporização, para tanto, recentes trabalhos na área devem ser considerados. Em geral, os modelos do estudo da gota são abordados por controles computacionais particulares da análise de vaporização.

Na análise deve-se considerar os efeitos dos movimentos relativos da gota com respeito ao gás e ao fato de estar todo o processo em transição, isto é, as condições do ambiente e do líquido variam de acordo com o tempo de vida da gota na vaporização.

Portanto, praticamente um modelo que estude a gota deve considerar a fase líquida como multicomponente, pois os combustíveis são misturas de vários compostos.

A exemplo de (Faeth, 1983), Silva *et al.* (2002) e Bennett *et al.* (1978), algumas simplificações são adotadas nesta pesquisa:

- i) As partículas são assumidas como esféricas, independente da possibilidade ou não de deformação aerodinâmica;

- ii) A vaporização é considerada diluída em todos os pontos do escoamento. A colisão das gotas é ignorada, assim como o efeito de gotas adjacentes no transporte de calor e massa, isto é, a correlação do arrasto e convecção das gotas têm espaçamentos infinitos e são empregados sem correção;
- iii) O escoamento ao redor da gota é considerado com sendo quase-permanente, isto é, a cada instante o escoamento se ajusta às condições locais e ao tamanho da gota;
- iv) A velocidade radial de evaporação da superfície da gota é desconsiderada;
- v) Os efeitos de arrasto e convecção são representados por correlações empíricas;
- vi) O transporte da fase gasosa tem base nas propriedades do meio ambiente, e os efeitos de flutuações turbulentas são desconsiderados;
- vii) Durante a vaporização, a superfície líquida assume equilíbrio termo-dinâmico com o vapor da mistura gasosa, desconsiderando a tensão superficial da gota;
- viii) A pressão é considerada constante e igual à pressão do meio ambiente.
- ix) A difusão de espécie deve-se apenas a gradientes de concentração, sendo desprezada a difusão térmica;
- x) São desconsiderados quaisquer efeitos de radiação entre a gota e sua superfície. Sendo a taxa de transferência de calor da gota na vaporização alta, haverá redução na importância da radiação, pois a partícula é pequena;
- xi) O número de Lewis<sup>1</sup> é considerado unitário na modelação das trocas entre o ar e as gotas;
- xii) As propriedades do meio gasoso são admitidas constantes para cada instante de tempo. Difusividade binária, calor específico e massa molecular são consideradas em todas as espécies;
- xiii) Não há transporte no interior da gota, sendo suas propriedades consideradas uniformes e constantes a cada intervalo de tempo através de difusividade térmica infinita.
- xiv) A vaporização é considerada monodispersa.

## 5. Métodos de Série de Taylor

Os métodos que usam o desenvolvimento em Série de Taylor de  $y(x)$  teoricamente fornecem solução para qualquer equação diferencial. No entanto, do ponto de vista computacional, os métodos de Série de Taylor de ordem mais elevada são considerados impróprios, pois a menos de uma classe restrita de funções  $f(x,y)$  o cálculo das derivadas totais envolvidas é extremamente complicado.

Suponha-se que, de alguma forma, têm-se as aproximações  $y_1, y_2, \dots, y_n$  para  $y(x)$ , em  $x_1, x_2, \dots, x_n$ . Se  $y$  for suficientemente "suave", a Série de Taylor de  $y(x)$  em torno de  $x = x_n$  é:

$$y(x) = y(x_n) + y'(x_n)(x - x_n) + \frac{y''(x_n)}{2!}(x - x_n)^2 + \dots + \frac{y^{(k)}(x_n)}{k!}(x - x_n)^k + \frac{y^{(k+1)}(\xi_x)}{(k+1)!}(x - x_n)^{k+1} \quad (1)$$

onde  $\xi_x$  é o um valor entre  $x_n$  e  $x$  e fará parte no erro de truncamento, o qual é dado por

$$e(x) = \frac{y^{(k+1)}(\xi_x)}{(k+1)!} H^{(k+1)} \quad (2)$$

Para aplicar o método de Série de Taylor de ordem  $k$  tem-se que calcular  $y''_n, y'''_n, \dots, y^{(k)}_n$  (Ruggiero *et al.*, 1996).

### 5.1. Métodos Numéricos de Runge-Kutta (RK)

A idéia básica destes métodos é aproveitar as qualidades dos métodos de Série de Taylor e ao mesmo tempo eliminar sua maior dificuldade que é o cálculo de derivadas de  $f(x, y)$  que, conforme visto, torna os métodos de Série de Taylor computacionalmente impróprios.

Pode-se dizer que os métodos de Runge-Kutta de 1ª e 4ª ordem se caracterizam pelas três propriedades:

- i) são de passo um ou simples;
- ii) não exigem o cálculo de qualquer derivada de  $f(x, y)$ ; com isto, deve-se calcular  $f(x, y)$  em vários pontos;
- iii) após expandir  $f(x, y)$  por Série de Taylor para função de duas variáveis em torno de  $(x_n, y_n)$  e agrupar os termos semelhantes, sua expressão coincide com a do método da série de Taylor de mesma ordem (Ruggiero *et al.*, 1996).

### 5.2. Método Numérico de Runge-Kutta de 4ª. Ordem

A fórmula clássica do método de Runge-Kutta de 4ª ordem, o qual será utilizado no trabalho, é apresentada em (Valença, 1988):

$$y_{n+1} = y_n + 1/6(K_1 + 2K_2 + 2K_3 + K_4), \text{ onde,}$$

<sup>1</sup> E a razão entre a taxa de energia transportada e a taxa de massa transportada (Kuo, 1986).

$$\begin{aligned}
 K_1 &= hf(x_n, y_n), \\
 K_2 &= hf(x_n + h/2, y_n + K_1/2), \\
 K_3 &= hf(x_n + h/2, y_n + K_2/2), \\
 K_4 &= hf(x_n + h, y_n + K_3).
 \end{aligned}$$

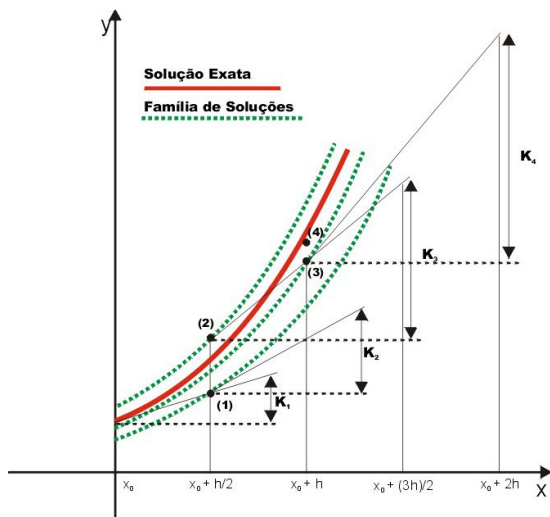


Figura 1 - Gráfico do Método de Runge-Kutta de 4ª. Ordem.

Na Fig. (1), observam-se os seguintes pontos:

- (0)  $(x_0, y_0)$ ,
- (1)  $(x_0 + h/2, y_0 + K_1/2)$ ,
- (2)  $(x_0 + h/2, y_0 + K_2/2)$ ,
- (3)  $(x_0 + h, y_0 + K_3)$ ,
- (4)  $(x_0 + h, y_1)$ , onde  $y_1 = y_0 + 1/6(K_1 + 2K_2 + 2K_3 + K_4)$ .

## 6. Modelo do Sistema Multicomponente Multigotículas

Para o modelo desta pesquisa, assume-se que a antecâmara contém combustível líquido na forma de "spray" e ar com certa umidade. O volume da antecâmara é calculado de forma que tenha ar em quantidade estequiométrica<sup>2</sup> para a combustão completa. A umidade relativa tende a aumentar no decorrer do processo e, quando chega a 100% o ar fica saturado de vapor d'água e passa a ocorrer condensação do mesmo, formando água líquida. Como a vaporização é um fenômeno endotérmico, a temperatura da antecâmara decresce, podendo atingir valores abaixo de 0°C. Neste caso, passa a haver congelamento da água condensada, formando gelo. Tanto a condensação quanto a fusão são fenômenos exotérmicos, logo abrandam a queda de temperatura (Sirignano, 1986).

O combustível é formado por uma mistura cuja composição é definida pelo usuário. Em seu estágio atual, o modelo considera que os diversos compostos evaporam à mesma taxa, logo suas concentrações permanecem constantes. Devido a isto a densidade do combustível também é considerada constante.

A mistura é injetada na antecâmara por um bico injetor que promove uma distribuição gaussiana de raios de gotículas em torno de um raio médio fornecido pelo usuário. Outras informações como a quantidade de raios ou diâmetros, tempo de simulação, pressão inicial, temperatura inicial, umidade inicial e fração mássica dos compostos também são dados de entrada.

Os compostos selecionados para esta pesquisa são: o Benzeno, Ciclopentano, Decano, MTBE (Metil Terc Butil Eter), Metanol, Octano e Tolueno.

Para um modelo multicomponente, (Kuo, 1986) determina que o número de equações diferenciais seja dado por  $m + 6$  equações, onde  $m$  é a quantidade de espécies (compostos) na mistura e o número 6 representa as incógnitas do sistema. Neste caso o diâmetro ou raio da gota é calculado e avaliado para apenas uma gota.

Para a nossa pesquisa, o número de equações diferenciais do sistema é dado por  $2n + m + 4$  equações, com  $n$  sendo a quantidade de raios ou diâmetros multiplicado por dois, para determinar as equações da temperatura da gota  $T_g$  e a temperatura do gás  $T_g$  e  $m$  o número de compostos. O sistema terá  $m + 4$  incógnitas do sistema, sendo elas a fração mássica  $Y_1, Y_2, \dots, Y_m$ , a pressão  $P$ , temperatura  $T$  e a umidade  $U$ . Por exemplo, se estivesse sendo analisado para apenas uma gota e um composto o resultado seria  $2 \cdot 1 + 1 + 4 = 7$  equações diferenciais iniciais, as quais são determinadas na pesquisa. Este número será chamado nesta pesquisa de *nequ*.

<sup>2</sup> Proporções dos elementos que se combinam ou dos compostos que reagem.

## 7. Simbologia

Para um melhor entendimento do modelo, será usada a seguinte simbologia:

$c_p$  - calor específico do estado gasoso - cal/(g.K);  
 $c_{p(\text{gsl})}$  - calor específico da gasolina - cal/(g.K);  
 $D_{ij}$  - difusividade mássica do composto  $i$  na gotícula  $j$  - (cm<sup>2</sup>/s);  
 $h_{tc}$  - coeficiente de transferência de calor - (cal/(s.cm<sup>2</sup>.K))  
 $m_g$  - massa do estado gasoso - (g);  
 $m_{ij}$  - massa do composto  $i$  na gotícula  $j$  - (g);  
 $m_{(\text{H}_2\text{O})^v}$  - massa de vapor de água - (g);  
 $M_i$  - massa molar do composto  $i$  - (g/mol);  
 $M_{(\text{H}_2\text{O})}$  - massa molar da água - (g/mol);  
 $n_j$  - quantidade de gotículas de raio inicial  $r_{0j}$ ;  
 $N_T$  - número total de mols (vapor de água + gasolina) - (mol)  
 $N_i$  - número de mols do composto  $i$  - (mol)  
 $P$  - pressão total do sistema - (atm);  
 $P_i$  - pressão parcial do composto  $i$  - (atm);  
 $P_i^v$  - pressão de vapor do composto  $i$  - (atm);  
 $P_{(\text{H}_2\text{O})^v}$  - pressão de vapor de água - (atm);  
 $P_{(\text{H}_2\text{O})}$  - pressão da água - (atm);  
 $r_{0j}$  - raio inicial da gotícula - (cm);  
 $R$  - constante dos gases ideais, igual a 0,08206 l.atm/mol.K;  
 $t$  - tempo - (s)  
 $T_g$  - temperatura do estado gasoso - (K);  
 $T_j$  - temperatura das gotículas de raio inicial  $r_{0j}$  - (K);  
 $T_0$  - temperatura inicial - (K);  
 $U$  - umidade inicial - (%)  
 $V_{0j}$  - volume inicial das gotículas - (cm<sup>3</sup>);  
 $V$  - volume da antecâmara - (cm<sup>3</sup>);  
 $V_{tg}$  - volume total de gotículas - (cm<sup>3</sup>);  
 $y_{(\text{H}_2\text{O})}$  - fração volumétrica da água;  
 $\eta_j$  - raio adimensional;  
 $\lambda_{(\text{H}_2\text{O})}^c$  - calor de vaporização da água - (cal/g);  
 $\lambda_i$  - calor de vaporização do composto  $i$  - (cal/g);  
 $\rho$  - densidade do estado gasoso - (g/cm<sup>3</sup>);  
 $\rho_{\text{gsl}}$  - densidade da gasolina - (g/cm<sup>3</sup>).

## 8. Equações Auxiliares

A seguir, são apresentadas as equações que fornecerão resultados iniciais auxiliares, os quais, serão utilizados posteriormente pelas equações diferenciais ordinárias de 1ª ordem.

### 8.1. Cálculo dos Raios Iniciais das Gotículas

$r_{0j} = \left( \frac{n}{2} + j - 0,5 \right) \frac{\bar{r}_0}{n}$ , onde  $n$  é o número de raios das gotas e  $\bar{r}_0$  é o raio médio inicial fornecidos pelo usuário (Sirignano, 1986).

### 8.2. Distribuição Gaussiana ou Normal das Gotas

$f(r) = n_j = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_r} \exp \left[ -\frac{1}{2} \left( \frac{r_{0j} - \bar{r}_0}{\sigma_r} \right)^2 \right]$ , com  $\sigma_r = \sqrt{\frac{(r_{0j} - \bar{r}_0)^2}{n}}$ , onde  $n$  é o número de raios ou diâmetros fornecido pelo usuário, ou  $\sigma_r = \sqrt{\frac{(r_{0j} - \bar{r}_0)^2}{n-1}}$  caso o número da amostra de raios fornecido for inferior que 30 elementos.

### 8.3. Cálculo dos Volumes Iniciais das Gotículas

$$V_{0j} = \frac{4}{3} \pi r_{0j}^3.$$

#### 8.4. Massa de uma Gotícula

$$m = \rho V \quad \text{ou} \quad m = \frac{4}{3} \pi r_{0j}^3 \rho.$$

#### 8.5. Número de Mols

$$N_i = \frac{m_i}{M_i}, \text{ onde } m_i \text{ é a massa do composto } i \text{ em (g) e } M_i \text{ é a massa molar do composto } i \text{ em (g/mol).}$$

#### 8.6. Cálculo da Densidade do Gás

$$\rho = \frac{PM_g}{RT_g}, \text{ onde } M_g \text{ é a massa molar do estado gasoso e é dada por (Sirignano, 1986),}$$

$M_g = M_{ar} + (18 - M_{ar}) \frac{P_{H_2O}}{P} + \sum_{i=1}^m \frac{P_i}{P} (M_i - M_{ar})$ , sendo  $m$  o número de compostos da mistura,  $M_{ar}$  a massa molar do ar (constante e igual a 16 g/mol),  $P$  a pressão total,  $P_{H_2O}$  a pressão parcial da água,  $P_i$  a pressão parcial do composto  $i$  e  $M_i$  a massa molar do composto  $i$  (Sirignano, 1986).

#### 8.7. Pressão Parcial dos Compostos

$$P_i = \frac{N_i RT_0}{V_{lg}}, \text{ com } N_i \text{ o número de mols do composto } i, R \text{ a constante dos gases ideais, } T_0 \text{ a temperatura inicial em}$$

Kelvin (K) e  $V_{lg}$  o volume total das gotas em litros  $l$ .

#### 8.8. Pressão Parcial da Água

$P_{H_2O} = \frac{UP_{H_2O}^v}{100}$ , que é a pressão parcial da água em relação à porcentagem de umidade inicial  $U$  e a pressão de vapor de água  $P_{H_2O}^v$  (Sirignano, 1986).

#### 8.9. Difusividades Mássicas

$$D_{ij} = \frac{2}{3} \sqrt{\frac{K^3}{\pi^3 m_i}} \frac{T^{3/2}}{P (r_{0j})^2}, \text{ apresentada por (Kuo, 1986).}$$

#### 8.10. Cálculo do Coeficiente de Transferência de Calor

$h_{tc} = [13,2 - 0,0313(370 - T_g)] \left( \frac{T_g}{370} \right)^{2 - 0,0372 \left( \frac{T_g}{370} \right)^2}$ , obtida experimentalmente em função da temperatura do estado gasoso (Sirignano, 1986).

#### 8.11. Cálculo dos Calores Específicos

$$c_p = 0,26 + \frac{P_{H_2O}}{P} + \sum_{i=1}^m \frac{P_i}{P} c_{pi}, \text{ onde } c_{pi} \text{ é o calor específico do composto } i.$$

Já a equação do calor específico da gasolina é dada por,

$$c_{p(gsl)} = \sum_{i=1}^m \tau_i c_{pi}, \text{ } \tau_i \text{ é a fração mássica do composto } i \text{ (Sirignano, 1986).}$$

#### 8.12. Cálculo do Volume da Antecâmara

$$V = V_0 \left( 1 + \frac{UP_{H_2O}}{100P} \right), \text{ com}$$

$V_0 = \frac{m_{gst}RT_0}{P0,21} \sum_{i=1}^m e_i \frac{\tau_i}{M_i}$ , onde  $m_{gst}$  é a massa de combustível na antecâmara,  $T_0$  é a temperatura inicial e  $e_i$  é o coeficiente estequiométrico<sup>3</sup> do composto  $i$  (Sirignano, 1986).

### 8.13. Raio Adimensional

Para dar maior estabilidade ao método numérico, emprega-se o raio adimensional  $\eta$ , que assumirá valores entre 0 e 1 e é dado por

$$\eta_j = \left( \frac{r_j}{r_{0j}} \right)^2.$$

Isolando  $r_j$ , tem-se

$$r_j = \eta_j^{1/2} r_{0j}.$$

Para o instante inicial, considera-se  $\eta_j = 1$ .

### 8.14. Cálculo da Massa do Estado Gasoso

$$m_g = m_{ar} + m_{H_2O}^v + \sum_{j=1}^m n_j m_j.$$

Nesta equação,  $n_j$  é a quantidade de raios da gota  $j$  e  $r_j$  é o raio adimensional (Kuo, 1986).

### 8.15. Cálculo das Pressões de Vapor

Existem diversas equações para se calcular a pressão de vapor de um composto. Para esta pesquisa foi selecionada a equação de Antoine baseada nos estudos de Poling *et al.*, (2001),

$$\ln P_i^v = A - \frac{B}{T + C}$$

onde os coeficientes A, B e C são as constantes de Antoine para gases ideais, particulares a cada composto apresentadas na Tab.(1) abaixo, e T é a temperatura em °C. Para o cálculo da pressão do vapor de água utiliza-se a mesma equação.

Tabela 1 – Constantes de Antoine para Pressão de Vapor [6].

Compostos	A	B	C
Benzeno	13,7819	2726,81	217,5721
Ciclopentano	13,9727	2653,90	234,510
Decano	13,9748	3442,76	193,858
MTBE	14,1334	2838,24	218,690
Metanol	16,5785	3638,27	239,500
Octano	13,9346	3123,13	209,635
Tolueno	13,9320	3056,96	217,625

## 9. O Sistema de Equações Diferenciais Ordinárias de 1ª. Ordem para o Modelo

O Modelo para Prever a Vaporização em Antecâmaras de Combustão pode ser expresso pelo Sistema de Equações Diferenciais Ordinárias de 1ª Ordem (EDOs) da seguinte forma:

### 9.1. Variação do Raio Adimensional

$$\frac{d\eta_j}{dt} = \frac{2\rho}{\rho_{gst}r_{0j}^2} \sum_{i=1}^n D_{ij} \left( \frac{P_i}{P_i^v} - 1 \right) \quad (4)$$

### 9.2. Variação do Quociente entre a Pressão Parcial dos Compostos pela Temperatura do Gás

<sup>3</sup> Mesmo que Número de Mols.

$$\frac{d}{dt} \left( \frac{P_i}{T_g} \right) = \frac{4\pi\rho D_{ij} R}{VM_i} \left( 1 - \frac{P_i}{P_i^v} \right) \sum_{j=1}^n n_j r_{0j} \eta^{1/2} \quad (5)$$

### 9.3. Variação do Número de Mols do Sistema

$$\frac{dN_T}{dt} = \frac{1}{M_{H2O}} \frac{dm_{H2O}^v}{dt} \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n \frac{1}{M_i} \frac{dm_{ij}}{dt} \quad (6)$$

### 9.4. Variação da Fração Volumétrica da Água

$$\frac{dy_{H2O}}{dt} = \begin{cases} \frac{1}{P} \frac{dT_g}{dt}, & \text{se } y_{H2O} \geq \frac{P_{H2O}^v}{P} \\ 0, & \text{se } y_{H2O} < \frac{P_{H2O}^v}{P} \end{cases} \quad (7)$$

### 9.5. Variação da Massa de Vapor de Água

$$\frac{dm_{H2O}^v}{dt} = \begin{cases} M_{H2O} \left( N_T \frac{dy_{H2O}}{dt} + y_{H2O} \frac{dN_T}{dt} \right), & \text{se } y_{H2O} \geq \frac{P_{H2O}^v}{P} \\ 0, & \text{se } y_{H2O} < \frac{P_{H2O}^v}{P} \end{cases} \quad (8)$$

As EDOs de (4) à (8) são calculadas por substituição das equações físico-químicas auxiliares.

### 9.6. Variação da Temperatura das Gotículas

$$\frac{dT_j}{dt} = \frac{3h}{r_{0j} \eta_j^{1/2} \rho_{gs1} c_{p(gs1)}} (T_g - T_j) - \frac{3T_j}{2\eta_j} \frac{d\eta_j}{dt} - \frac{1}{V_{0j} \rho_{gs1} \eta_j^{3/2} c_{p(gs1)}} \sum_{i=1}^m \lambda_i \frac{dm_{ij}}{dt} \quad (9)$$

### 9.7. Variação da Temperatura do Gás

$$\frac{dT_g}{dt} = \frac{\alpha}{1 + \beta + \gamma}, \quad (10)$$

onde

$$\alpha = \frac{4\pi h}{m_g c_p} \sum_{j=1}^n n_j r_{0j}^2 \eta_j (T_g - T_j) + \frac{3}{2m_g} \rho_{gs1} \sum_{j=1}^n n_j (T_j - T_g) V_{0j} \eta_j^{1/2} \frac{d\eta_j}{dt}$$

$$\beta = \begin{cases} \frac{1}{M_g} \left( T_g - \frac{\lambda_{H2O}^c}{c_p} \right) \frac{M_{H2O} V}{R} \frac{d}{dt} \left( \frac{P_{H2O}}{T_g} \right), & \text{se } y_{H2O} \geq \frac{P_{H2O}^v}{P} \\ 0, & \text{se } y_{H2O} < \frac{P_{H2O}^v}{P} \end{cases}$$

$$\gamma = \begin{cases} 1, & \text{se } y_{H2O} \geq \frac{P_{H2O}^v}{P} \text{ e } T_g \leq 0 \\ 0, & \text{se } y_{H2O} < \frac{P_{H2O}^v}{P} \text{ e } T_g > 0 \end{cases}$$

As EDOs (9) e (10) têm sua solução pelo Método de Runge-Kutta de 4ª Ordem. O método é aplicado por serem as equações que determinam as temperaturas da gota e do gás, portanto sua aproximação deve ser bem significativa.

Na EDO (10),  $\beta$  e  $\gamma$  possuem condições por dependerem do processo de condensação e congelamento da água, respectivamente.

## 10. Programação Computacional do Modelo

A programação computacional da pesquisa foi elaborada na linguagem Fortran (Cristo, 2003), utilizando a ferramenta Lahey-Fortran 95 5.0.

O programa possui sete arquivos auxiliares, com extensão .DAT, que possuem as informações de cada composto na seguinte ordem: massa molar, constantes de Antoine<sup>4</sup>, calor específico e calor de vaporização [5, 6], as quais são lidas no início do processo.

Os resultados são armazenados em três arquivos: um com todas as informações calculáveis do programa para verificação de alguma falha no processo chamado de Resulta.dat, outro com os resultados necessários finais (Finais.dat) e o último com os valores prontos para serem exportados para um programa de Planilha de Cálculo (por exemplo, Microsoft Excel) para geração dos gráficos (Graficos.dat).

O programa possui plataforma MS-DOS, mas executável em qualquer versão do Microsoft Windows do mercado. Foi estabelecida esta plataforma para agilizar o desenvolvimento, pois o programa só possui duas telas de apresentação, permitindo assim, como recomendação à transformação futura para a versão MS - Visual.

### 10.1. A Metodologia do Programa Computacional

O programa inicia com a seleção dos compostos pelo usuário, através da tela de entrada. A seguir aparecem as opções dos dados de entrada como: raio médio, número de raios, tempo final de simulação, pressão inicial, temperatura inicial, umidade inicial e as frações mássicas dos compostos selecionados na tela anterior.

Após a entrada dos dados, o programa faz uma leitura dos arquivos: Benzeno.dat, Ciclopentano.dat, Decano.dat, Metanol.dat, MTBE.dat, Octano.dat e Tolueno.dat dos compostos selecionados, carregando na memória as informações da massa molar, as constantes de pressão de vapor, calor específico e calor de vaporização de cada composto (Lide, 2002) e em seguida inicia os cálculos das equações auxiliares.

Ao término das equações auxiliares, o programa transfere todos os cálculos efetuados para as equações diferenciais e inicia a resolução das cinco primeiras equações. Em seguida prepara para o cálculo das temperaturas das gotículas e do gás e refaz o cálculo até o último passo registrado pelo intervalo de integração, utilizando método de Runge-Kutta de 4ª ordem.

Ao final do processo, o programa chama automaticamente os arquivos resulta.dat, finais.dat e graficos.dat para que o usuário possa utilizar e checar da melhor forma possível os resultados obtidos.

## 11. Resultados Numéricos e Discussões

O modelo matemático de vaporização deve considerar a gota em sua fase líquida como um processo físico multicomponente, pois, os combustíveis são misturas de vários compostos. Com isto, as características de cada composto e da mistura são implementadas nos cálculos para aproximar a realidade dos resultados. Estas características são: a difusividade mássica de cada espécie, o raio inicial das gotículas, a temperatura das gotículas, o calor específico do combustível a uma pressão constante, o coeficiente de transferência de calor gotícula-gás obtido por métodos experimentais, a massa molar de cada composto, a pressão parcial de cada composto, a pressão total do sistema, que é a soma das pressões parciais dos compostos, o volume da antecâmara, o calor de vaporização de cada composto, a densidade do combustível, etc. O volume da antecâmara é calculado para que exista ar suficiente para uma boa combustão (Sirignano, 1986). As condições iniciais, tais como, o raio médio, a amostra de raios, o tempo final de simulação, a pressão inicial, a temperatura inicial, a umidade inicial e as frações mássicas de cada composto, são apresentadas na simulação 1. A composição das gotículas varia de acordo com a composição do combustível.

### 11.1. Simulação 1

Para a simulação 1 foram escolhidos o Benzeno e o Ciclopentano com um raio médio inicial alto e uma umidade relativa inicial também alta para validar duas hipóteses: (i) quanto maior a umidade relativa, maior será a temperatura final, (ii) quanto maior o raio, menor será a queda de temperatura.

O raio médio inicial é de  $35\mu\text{m}$ , a amostra de raios é 10, o tempo final de simulação é de 5ms (milésimos de segundo), a pressão inicial de 1 atm, a temperatura inicial é  $25^\circ\text{C}$ , a umidade de 90% e as frações mássicas do Benzeno e Ciclopentano são 50% para ambos. A variação no raio e na temperatura das gotículas são apresentados na tabela 2. A tabela 3 traz o resumo geral do comportamento da temperatura das gotas e do gás, da umidade e da massa evaporada com o passar do tempo.

Considerou-se o percentual de solidificação igual a zero, pois a temperatura da gota teve uma queda média de  $15,3^\circ\text{C}$ , como mostra a tabela 3. Já para a temperatura do gás, obteve-se uma queda de temperatura de  $20,1910^\circ\text{C}$ .

Tabela 2 - Temperatura Final das Gotículas na Simulação 1

Raio Inicial ( $\mu\text{m}$ )	Raio Final ( $\mu\text{m}$ )	Temperatura Final $^\circ\text{C}$
19,2500	2,0000E-8	9,7723
22,7500	2,0000E-8	9,7766
26,2500	2,0000E-8	9,7800

<sup>4</sup> Parâmetros utilizados para o cálculo das pressões de vapor do combustível e da água (ver seção 11.15).



29,7500	1,0000E-8	9,7841
33,2500	1,0000E-8	9,7873
36,7500	1,0000E-8	9,7900
40,2500	1,0000E-8	9,7923
43,7500	1,0000E-8	9,7946
47,2500	1,0000E-8	9,7961
50,7500	1,0000E-8	9,7982

Com o raio médio de  $35\mu\text{m}$  pode-se notar que a queda de temperatura das gotículas foi branda.

Tabela 3 - Resumo Geral da Simulação 1

Tempo Ms	Temp. Gotículas °C	Temp. do Gás °C	Umidade %	Massa Evaporada g
0,2000	25,0000	25,0000	90,1800	2,4776E-03
0,4000	24,4036	25,0000	90,2162	1,5143E-05
0,6000	23,8075	24,8807	90,2703	3,2192E-06
0,8000	23,1898	24,7019	90,3425	2,1236E-06
1,0000	22,5426	24,4636	90,4326	1,9926E-06
1,2000	21,8895	24,1660	90,5414	2,0722E-06
1,4000	21,2424	23,8092	90,6680	2,2087E-06
1,6000	20,6036	23,3935	90,8136	2,3573E-06
1,8000	19,9722	22,9190	90,9763	2,5040E-06
2,0000	19,3472	22,3861	91,1588	2,6447E-06
2,2000	18,7275	21,7950	91,3593	2,7790E-06
2,4000	18,1124	21,1461	91,5789	2,9070E-06
2,6000	17,5013	20,4398	91,8160	3,0295E-06
2,8000	16,8937	19,6765	92,0738	3,1471E-06
3,0000	16,2893	18,8566	92,3490	3,2603E-06
3,2000	15,6879	17,9805	92,6452	3,3695E-06
3,4000	15,0891	17,0489	92,9602	3,4752E-06
3,6000	14,4928	16,0622	93,2958	3,5777E-06
3,8000	13,8989	15,0211	93,6490	3,6772E-06
4,0000	13,3072	13,9260	94,0240	3,7740E-06
4,2000	12,7176	12,7777	94,4190	3,8682E-06
4,4000	12,1300	11,5768	94,8344	3,9602E-06
4,6000	11,5444	10,3240	95,2708	4,0500E-06
4,8000	10,9606	9,02009	95,7288	4,1378E-06
4,9999	10,3786	7,66567	96,2062	4,2237E-06
5,1910	9,79841	6,26159	96,7070	4,3078E-06

Já a porcentagem de massa evaporada deu-se da seguinte forma: *Massa de Combustível Inicial: 2,0366E-04g; Massa de Combustível Final: 4,3078E-06g; e Porcentagem da Massa de Combustível Evaporado: 97,88%*. Esta porcentagem é encontrada dividindo a massa de combustível final pela inicial, menos 1 (-1) que representa 100%.

Com isto, pode-se concluir que com o passar do tempo a porcentagem de massa evaporada aumenta com a queda de temperatura. Outra observação importante é que nesta simulação não houve o fenômeno de condensação, pois só se dá quando a umidade relativa atinge 100% e a fração volumétrica é maior que a razão entre a pressão de vapor de água pela pressão total do sistema.

## 11.2. Simulação 2

A simulação 2 foi proposta a fim de validar as seguintes hipóteses: o tempo final de simulação e a quantidade de compostos. Foram selecionados os compostos: Benzeno, Ciclopentano, Decano e MTBE.

Para a simulação 2, o raio médio inicial é de  $80\mu\text{m}$ , a amostra de raios é 5, o tempo final de simulação é de 12 ms (milésimos de segundo), a pressão inicial de 1 atm, a temperatura inicial é 20 °C, a umidade de 90% e as frações mássicas do Benzeno, Ciclopentano, Decano e MTBE são, respectivamente, 40%, 20%, 20% e 20%. Nesta simulação o percentual de solidificação é diferente de zero, pois a temperatura da gota teve uma queda brusca média de 29°C, como mostra a tabela 4. A temperatura do gás ficou em -6,7455 °C e teve uma queda de temperatura de 26,7455°C.

Tabela 4 – Temperatura Final das Gotículas na Simulação 2

Raio Inicial ( $\mu\text{m}$ )	Raio Final ( $\mu\text{m}$ )	Temperatura Final $^{\circ}\text{C}$
40,0000	1,0000E-6	-9,8238
56,0000	7,0000E-7	-9,8486
72,0000	6,0000E-7	-9,8666
88,0000	5,0000E-7	-9,8808
104,0000	4,0000E-7	-9,8925

Esta queda de temperatura brusca se deu pelos fatores: tempo de simulação e quantidade de compostos. Quanto maior o tempo final de simulação, maior será a queda de temperatura, pois é o fator que faz variar os valores. O outro diz respeito à quantidade de compostos, quanto maior a quantidade de compostos, mais variáveis são os valores dos calores de vaporização, influenciando assim no comportamento das temperaturas.

A porcentagem de massa evaporada ficou sendo: *Massa de Combustível Inicial: 4,4411E-04g; Massa de Combustível Final: 2,6510E-05g; Porcentagem da Massa de Combustível Evaporado: 94,03%.*

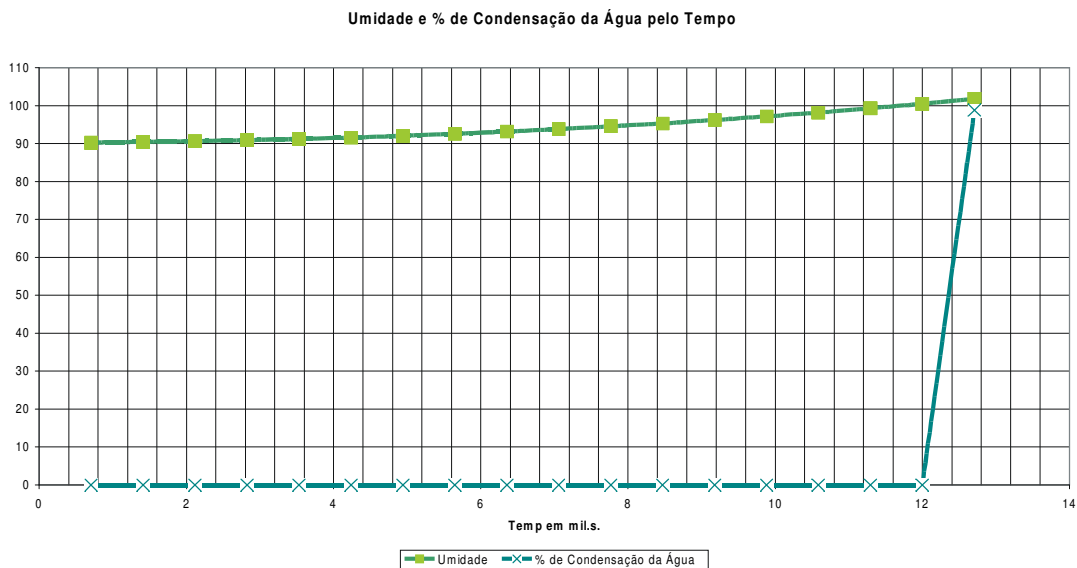


Figura 2 – Gráfico da Umidade e % de Condensação de Água pelo Tempo - S2

A Figura 2 confirma que somente haverá o fenômeno da condensação (exotérmico) caso a umidade relativa chegue a 100%, com isto, a fração volumétrica da água passou a ser maior do que a razão entre a pressão de vapor de água pela pressão total do sistema.

### 11.3. Simulação 3

A simulação 3 foi efetuada para todos os compostos com o raio médio inicial de  $1\mu\text{m}$ , a amostra de raios é 5, o tempo final de simulação é de 15 ms (milésimos de segundo), a pressão inicial de 1 atm, a temperatura inicial é  $25^{\circ}\text{C}$ , a umidade de 85% e a fração mássica do Benzeno é de 10% e a dos demais compostos 15%.

A porcentagem de massa evaporada ficou sendo: *Massa de Combustível Inicial: 6,9393E-02g; Massa de Combustível Final: 1,4965E-08g; Porcentagem da Massa de Combustível Evaporado: 99,99%.*

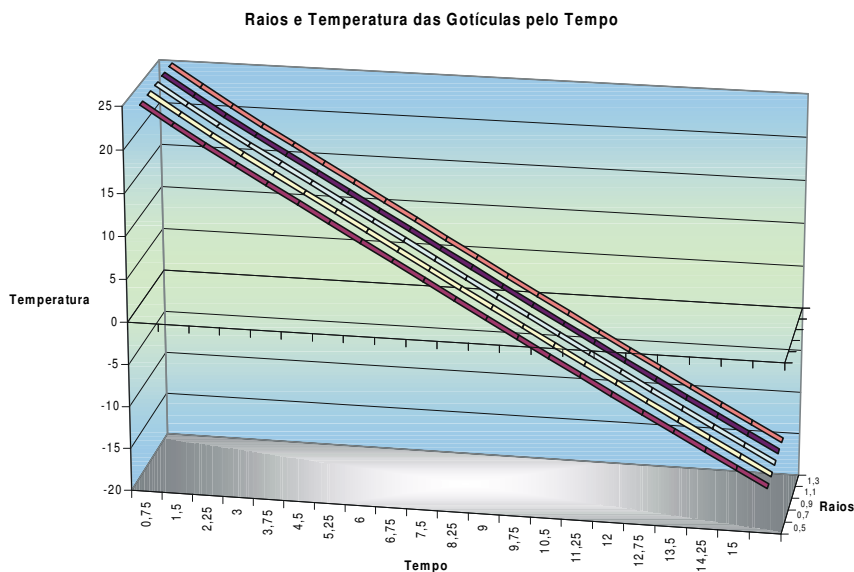


Figura 4 – Gráfico dos Raios e Temperatura das Gotículas pelo Tempo - S3

Esta simulação mostra que, quanto menor for o raio da gotícula maior a queda de temperatura, pois sua condutividade térmica é maior e mais calor será absorvido no processo em menos tempo (Fig. 3).

## 12. Conclusões

A partir da análise dos resultados numéricos, conclui-se que:

i) A temperatura das gotículas e do gás cai com o decorrer do tempo, pois a vaporização é um fenômeno endotérmico, isto é, ocorre absorção de calor durante sua realização, fazendo com que a temperatura da antecâmara também caia, podendo chegar a valores abaixo de  $0^{\circ}C$ . Caso isto ocorra, passa a haver congelamento da água condensada, formando gelo;

ii) Quanto maior for a umidade relativa inicial, maior será a temperatura final, pois a umidade abranda a queda térmica;

iii) Quanto menor o raio inicial, maior será a queda de temperatura. Isto ocorre porque a gotícula sendo menor, maior será sua condutividade térmica e, conseqüentemente, mais calor será absorvido em menos tempo;

iv) Quando os compostos são vaporizados para uma antecâmara de combustão, cada composto por possuir características específicas de viscosidade e tensão superficial, gera um raio médio específico de gotícula, com isto, se for possível trabalhar com o raio médio real analisado em laboratório, mais próximo do resultado real estará a simulação;

v) A porcentagem de combustível evaporado aumenta com a queda da temperatura no decorrer do tempo;

vi) A condensação do vapor de água, que é um fenômeno exotérmico, isto é, desprende calor, só aparece quando a umidade relativa atinge  $100\%$ , ou seja, quando a fração volumétrica da água passa a ser maior que a razão entre a pressão de vapor de água e a pressão total do sistema. Este processo abranda a queda de temperatura;

vii) A respeito do método de Runge-Kutta de 4ª ordem, pode-se concluir que a aplicação do método numérico nas equações (9.6 - VI, 9.7 - VII) foi excelente para as aproximações das temperaturas finais da gota e do gás.

Uma extensão desta linha de pesquisa para trabalhos futuros seria a seleção de novos combustíveis que estão surgindo no mercado, como por exemplo, os biocombustíveis (óleo de babaçu, óleo de mamona), o gás natural, entre outros, para novas análises e padronizações.

## 13. Referências

- Bennett, C. O.; Myers, J. E.. Fenômenos de transporte: quantidade de movimento, calor e massa. São Paulo: McGraw-Hill do Brasil, 1978.
- Cristo, H. Pereira. Programação em Linguagem Fortran. Arquivo Livre: Fortran.pdf; [www.geocities.com/helderpc/fortran/](http://www.geocities.com/helderpc/fortran/). Belo Horizonte, 2003.
- Faeth, G. M.. Evaporation and Combustion of Sprays. - Progress in Energy and Combustion Science, pergamon Press, 9:1-76, 1983.
- Kuo, Kenneth K.. Principles of Combustion. John Wiley & Sons. 1986.

- Lide, David R.. Handbook of Chemistry and Physics. 83th ed. CRC Press. 2002.
- Poling, B. E.; Prausnitz, J. M.; O'Connell, J. P.. The Properties of Gases and Liquids. 5th ed. - App. A, MacGraw-Hill, New York, 2001.
- Ruggiero, Márcia A. G.; Lopes, Vera Lúcia da R.. Cálculo numérico: aspectos teóricos e computacionais. 2ª Ed. - São Paulo: Makron Books, 1996.
- Schmehl, R.; Klose, G.; Maier G.; Witting, S.. Efficient Numerical Calculation of Evaporating Sprays in Combustion Chamber Flows. Lehrstuhl und Institut für Thermische Strömungsmaschinen - Karlsruhe: Universität Karlsruhe (T. H.) – Germany, 1986.
- Silva, Antonio C. S. B.; Neto, José A. B. da C.; Lamberts, Roberto. Modelo de Evaporação de Sprays em Escoamento Livre. Anais do IX Congresso Brasileiro de Engenharia e Ciências Térmicas. ENCIT 2002. Caxambu - MG. 2002.
- Sirignano, William A.. Fluid Dynamics and Transport of Droplets and Sprays. 2ª Ed. - Cambridge: Cambridge University Press, 1999.
- Smith, J. M., Van Ness, H. C., Abbott, M. M.. Introdução à Termodinâmica da Engenharia Química. 5ª Ed. - Rio de Janeiro: LTC, 2000.
- Valença, M. R.. Métodos Numéricos. I.N.I.C., Braga, 1988.

#### **14. Direitos Autorais**

## **MATHEMATICAL MODEL TO FORESEE THE VAPORIZATION IN COMBUSTION ANTECHAMBERS**

### **Marcos Freitas de Moraes**

Department of Mathematics – Unioeste – Postbox 520, PC 85903-000 – Toledo – Paraná - Brasil  
mfreitas@unicentro.br

### **Liliana Madalena Gramani Cumin**

Department of Mathematics – UFPR – Postbox 19044, PC 81531-990 – Curitiba – Paraná - Brasil  
gramani@mat.ufpr.br

**Abstract:** Deep adulterations in fuels currently used have modified the results and the preview of behavior, in relation to the performance, income and emission of pollutants. The quality of fuels has been questioned, so much that the refining of oil assumes an extremely important role for the development of new technologies. The research of these new processes extends the analysis of the fuel as a physical system of multicomponent. Since basic the knowledge of the mechanisms of evaporation and combustion of droplets for a better understanding of the combustion phenomenon. Thus, the thermodynamic modeling starts at the identification of the system, in its thermodynamic state, which is defined by some features, such as internal energy, enthalpy, latent heats of pure substance vaporization, basic dimensions such as length, time, mass, temperature and amount of substance. In this way, a system of usual distinguishing equations of 1st order is likely to be expressed, in which some of the equations are calculated by the algebraic method, while the equations of droplets temperature variation as well as the gas temperature variation have its approach through the method of Runge-Kutta of 4th order.

Key-words: combustion, vaporization, numerical method.

## SIMULAÇÃO NUMÉRICA DE JATOS CONCÊNTRICOS E VALIDAÇÃO COM RESULTADOS EXPERIMENTAIS DA LITERATURA

**Ibanez, W. A. C**

Universidade Federal de Santa Catarina. Laboratório de Combustão e Engenharia de Sistemas Térmicos – Labcet. Campus Trindade. CEP: 88040-900 Florianópolis-Brasil.  
ibanez@labcet.ufsc.br

**Oliveira, A. A. M**

Universidade Federal de Santa Catarina. Laboratório de Combustão e Engenharia de Sistemas Térmicos – Labcet. Campus Trindade. CEP: 88040-900 Florianópolis-Brasil.  
amirol@emc.ufsc.br

**Resumo.** Este trabalho enfoca a análise numérica do escoamento de jatos concêntricos e confinados a uma tubulação. A análise visa determinar e validar modelos adequados de simulação para a aplicação na simulação de bicos injetores de gás para queimadores atmosféricos. Na análise e projeto de injetores de gás para queimadores atmosféricos, os valores de campo de velocidades, pressão e concentração do escoamento na região do jato livre entre o injetor e a entrada do tubo venturi não são normalmente disponíveis na literatura e apresentam dificuldades na sua medição para as configurações utilizadas nas aplicações. Assim, o desenvolvimento de metodologias de projeto baseadas em simulações numéricas e modelos de escoamento são interessantes do ponto de vista de desenvolvimento tecnológico. Uma importante questão nestas simulações é se os modelos de turbulência disponíveis em códigos comerciais (os modelos  $\kappa$ - $\epsilon$ , das Tensões de Reynolds SSG, Shear Stress Transport SST) são capazes de reproduzir corretamente os campos de velocidade e concentração encontrados nas aplicações em queimadores atmosféricos. Para o teste do desempenho destes modelos de turbulência e dos procedimentos computacionais, selecionaram-se dois problemas, cujos escoamentos são semelhantes aos encontrados em bicos injetores de queimadores atmosféricos e que apresentaram medições disponíveis na literatura. Os jatos simulados foram misturas de  $\text{CH}_4/\text{Ar}$ ,  $\text{C}_3\text{H}_8/\text{Ar}$ ,  $\text{CO}_2/\text{Ar}$  e  $\text{He}/\text{Ar}$ .

*Palavras chave:* Bicos injetores, jatos, Simulação numérica, modelos de turbulência, queimadores atmosféricos.

### 1. Introdução

Na análise e projeto de injetores de gás para queimadores atmosféricos, os valores de campo de velocidades, pressão e concentração do escoamento na região do jato livre entre o injetor de gás e a entrada do tubo venturi que compõe o queimador, não são normalmente disponíveis na literatura e apresentam dificuldades na sua medição para as configurações utilizadas nestas aplicações.

Porém, a grande maioria do dimensionamento de queimadores atmosféricos é baseada em equações empíricas, diagramas, ou, em informações empíricas dos próprios fabricantes, onde não são estabelecidos os critérios precisos para seu projeto.

No entanto, o desenvolvimento de metodologias de projeto para queimadores atmosféricos baseado em estimativas obtidas a partir de soluções numéricas e modelos de escoamento são interessantes do ponto de vista de desenvolvimento tecnológico.

Desta forma, a análise numérica realizada neste trabalho visa determinar e validar modelos adequados de simulação, como por exemplo, avaliar a potencialidade dos modelos de turbulência disponíveis no CFX-10.0 (os modelos  $k$ - $\epsilon$ , Shear Stress Transport - SST e das Tensões de Reynolds - SSG) em reproduzir os campos de velocidades, concentração e variáveis turbulentas para os escoamentos semelhantes aos encontrados em injetores de gás para queimadores atmosféricos. Para isto, escolheram-se dois problemas de escoamentos concêntricos de jatos de combustível e ar confinados a uma tubulação e que apresentaram medições disponíveis na literatura.

O primeiro problema corresponde ao problema resolvido por Pitts (1991a), onde apresentou medições de concentração na linha do centro do jato para misturas de  $\text{C}_3\text{H}_8/\text{Ar}$  e  $\text{CH}_4/\text{Ar}$  variando a velocidade de saída do gás combustível.

O segundo problema corresponde ao problema resolvido por Djeridane *et al.* (1996), onde apresentou medições de concentração, variáveis turbulentas ao longo da linha do centro e do raio do jato para misturas  $\text{He}/\text{Ar}$  e  $\text{CO}_2/\text{Ar}$ .

As simulações numéricas serão resolvidas no software CFX-10.0 e os resultados numéricos obtidos são comparados e validados com os resultados experimentais obtidos por Pitts (1991a e 1991b) e Djeridane *et al.* (1996).

## 2. Descrição dos problemas

O problema 1 consiste de um jato de gás ( $C_3H_8/Ar$  ou  $CH_4/Ar$ ) concêntrico a um escoamento paralelo de ar confinados a uma tubulação de 0,56 m de comprimento e um diâmetro de 0,1 m conforme mostrado na Fig. 1. O diâmetro do injetor de saída é de 0,00635 m e um comprimento da tubulação de 0,2 m para o desenvolvimento do gás antes da saída do injetor. A Tabela 1 apresenta as propriedades para os dois gases estudados em função da relação de massas específicas do gás combustível e o ar,  $\rho_g/\rho_a$ , as velocidades do gás e do ar respectivamente e o número de Reynolds  $Re$  do gás combustível ( $Re = \rho_g U_g d / \mu_g$ , onde  $d$  é o diâmetro do injetor e  $\mu_g$  a viscosidade do gás combustível).

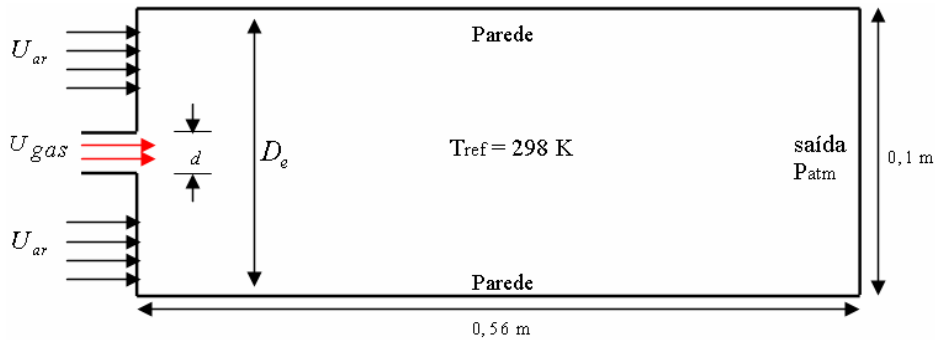


Figura 1. Domínio de solução do problema de Pitts (1991).

Tabela 1. Condições de Simulação para o problema resolvido por Pitts (1991a e 1991b).

Gás	$R_p = \rho_g/\rho_a$	$U_g$ [m/s]	$U_a$ [m/s]	$Re_d$
CH <sub>4</sub> /ar	0,55	1,022	0,347	3950
		2,69	0,148	3960
C <sub>3</sub> H <sub>8</sub> /ar	1,55	5,38	0,274	7930
		8,06	0,411	11800

O problema 2 consiste de um jato de gás (He ou CO<sub>2</sub>) concêntrico a um escoamento paralelo de ar e confinado a uma tubulação de 1,2m de comprimento e um diâmetro de 0,285m conforme mostrado na Fig. 2. O diâmetro do injetor de saída é de 0,0026m e o comprimento da tubulação de 2,86m para garantir o desenvolvimento do gás e o escoamento paralelo de ar antes da sua mistura. As condições de turbulência na entrada foram de 4% e 1% para os gases e o escoamento paralelo de ar respectivamente. A Tabela 2 mostra as velocidades para os jatos de He e CO<sub>2</sub> e o escoamento paralelo de ar respectivamente.

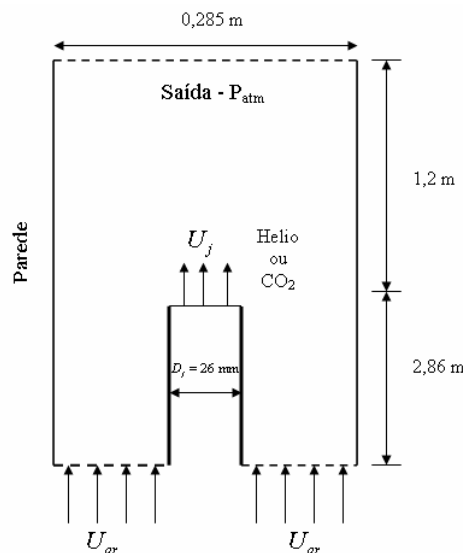


Figura 2. Domínio de solução do problema de Djeridane *et al* (1996).

Tabela 2. Condições de Simulação para o problema resolvido por Djeridane *et al.*(1996).

Gás	$R_p = \rho_g/\rho_a$	$U_g$ [m/s]	$U_a$ [m/s]	$Re_d$
He	0,14	32	0,75	7000
CO <sub>2</sub>	1,5	10	0,75	32 000

### 3. Equações de conservação

#### 3.1 Equação de conservação de massa

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho U) = 0 \quad (1)$$

#### 3.2 Equação de conservação de quantidade de movimento

$$\frac{\partial (\rho U)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho U \otimes U) = -\nabla p + \nabla \cdot \tau + S_M \quad (2)$$

Onde as tensões viscosas,  $\tau$ , estão relacionadas à taxa de deformação por:

$$\tau = \mu \left( \nabla U + (\nabla U)^T - \frac{2}{3} \nabla \cdot U \right) \quad (3)$$

e  $S_M$  o termo fonte para a quantidade de movimento.

#### 3.3 Equação de conservação de massa das espécies químicas

$$\frac{\partial (\rho Y)}{\partial t} + \frac{\partial (\rho U_j Y)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \Gamma_i \frac{\partial Y}{\partial x_j} \right) + S_i \quad (4)$$

Onde  $\Gamma_i$  é o coeficiente de difusão molecular expresso como  $\rho D_i$ ,  $D_i$  a difusividade molecular e  $S_i$  é o termo fonte que inclui os efeitos de reação química.

### 4. Modelos de turbulência

A seguir são apresentados os modelos de turbulência empregados nas simulações.

#### 4.1 Modelo de turbulência k-ε

O modelo k-ε é baseado na definição da viscosidade turbulenta e caracterizado por dois parâmetros de escoamento, a energia cinética turbulenta  $k$ , e a sua taxa de dissipação  $\varepsilon$ , conforme mostra a equação 5.

$$\mu_t = C_\mu \rho \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (5)$$

Os valores de  $k$  e  $\varepsilon$  são calculados diretamente a partir das suas equações de transporte dadas pelas equações 9 e 10 respectivamente.

$$\frac{\partial (\rho k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho U k) = \nabla \cdot \left[ \left( \mu + \frac{\mu_T}{\sigma_k} \right) \nabla k \right] + P_k - \rho \varepsilon \quad (9)$$

$$\frac{\partial (\rho \varepsilon)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho U \varepsilon) = \nabla \cdot \left[ \left( \mu + \frac{\mu_T}{\sigma_\varepsilon} \right) \nabla \varepsilon \right] + \frac{\varepsilon}{k} (C_{\varepsilon 1} P_k - C_{\varepsilon 2} \rho \varepsilon) \quad (10)$$

Onde  $C_\mu$ ,  $C_{\varepsilon 1}$ ,  $C_{\varepsilon 2}$ ,  $\sigma_k$ ,  $\sigma_\varepsilon$  são as constantes do modelo cujos valores são 0,09; 1,44; 1,92; 1 e 1,3 respectivamente (Launder e Spalding, 1974) e  $P_k$  é o termo de produção devido as forças viscosas e de empuxo definido como:

$$P_k = \mu_T \nabla U \cdot (\nabla U + \nabla U^T) - \frac{2}{3} \nabla \cdot U (3 \mu_T \nabla \cdot U + \rho k) + P_{kb} \quad (11)$$

Quando as forças de empuxo são consideradas, o termo de produção de empuxo é modelado como:

$$P_{kb} = -\frac{\mu_T}{\rho\sigma_p} \mathbf{g} \cdot \nabla \rho \quad (12)$$

#### 4.2 Modelo de turbulência shear stress transport - SST

O modelo SST é baseado no modelo k- $\omega$  desenvolvido por Wilcox (1998). Este modelo resolve duas equações de transporte, uma para a energia cinética turbulenta k, e outra para a frequência turbulenta  $\omega$  (ver Eq. 13 e 14).

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho U k) = \nabla \cdot \left[ \left( \mu + \frac{\mu_T}{\sigma_k} \right) \nabla k \right] + P_k - \beta' \rho k \omega \quad (13)$$

$$\frac{\partial(\rho \omega)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho U \omega) = \nabla \cdot \left[ \left( \mu + \frac{\mu_T}{\sigma_\omega} \right) \nabla \omega \right] + \alpha \frac{\omega}{k} P_k - \beta \rho \omega^2 \quad (14)$$

Uma das principais deficiências do modelo k- $\omega$  está relacionada ao cálculo da viscosidade turbulenta, onde estes valores são superestimados. Por tanto, o modelo SST introduz um limitador para a formulação da viscosidade turbulenta resultando:

$$v_t = \frac{a_1 k}{\max(a_1 \omega, S F_2)} \quad (15)$$

Onde:

$$v_t = \frac{\mu_T}{\rho} \quad (16)$$

$$F_2 = \tanh(\arg_2^2) \quad (17)$$

$$\arg_2 = \max\left(\frac{2\sqrt{k}}{\beta' \omega y}, \frac{500\nu}{y^2 \omega}\right) \quad (18)$$

sendo S na equação 15 uma medida fixa da taxa de deformação,  $\nu$  como a viscosidade cinemática e  $y$  como a distância próxima à parede. Os valores para as constantes  $\beta'$ ,  $\beta$ ,  $\alpha$ ,  $\sigma_k$ ,  $\sigma_\omega$  são 0,09; 0,075, 5/9; 2 e 2 respectivamente.

#### 4.3 Modelo de turbulência das tensões de Reynolds - SSG

O modelo das tensões de Reynolds no Ansys CFX é baseado na equação de  $\epsilon$ . A seguir, são apresentadas as equações para o transporte das tensões de Reynolds.

$$\frac{\partial(\rho \epsilon)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_k} (\rho U_k \epsilon) = \frac{\epsilon}{k} (c_{\epsilon 1} P - c_{\epsilon 2} \rho \epsilon) + \frac{\partial}{\partial x_k} \left[ \left( \mu \delta_{kl} + c_\epsilon \rho \frac{k}{\epsilon} u_k u_l \right) \frac{\partial \epsilon}{\partial x_l} \right] \quad (19)$$

$$\frac{\partial(\rho \overline{u_i u_j})}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_k} (U_k \rho \overline{u_i u_j}) = P_{ij} + \phi_{ij} + \frac{\partial}{\partial x_k} \left[ \left( \mu \delta_{kl} + c_\epsilon \rho \frac{k}{\epsilon} u_k u_l \right) \frac{\partial \overline{u_i u_j}}{\partial x_l} \right] + \frac{2}{3} \delta_{ij} \rho \epsilon \quad (20)$$

Onde  $P_{ij}$  o termo de produção e  $\phi_{ij}$  é o termo de redistribuição definidos como:

$$P_{ij} \equiv - \left( \overline{\rho u_i u_k} \frac{\partial U_j}{\partial x_k} + \overline{\rho u_j u_k} \frac{\partial U_i}{\partial x_k} \right) \quad (21)$$

$$\phi_{ij} = \phi_{ij}^{(1)} + \phi_{ij}^{(2)} \quad (22)$$



$$\phi_{ij}^{(1)} = -\rho\varepsilon \left[ C_{s1}a + C_{s2} \left( aa - \frac{1}{3}a \cdot a \delta \right) \right] \quad (23)$$

$$\phi_{ij}^{(2)} = -C_{r1}Pa + C_{r2}\rho kS - C_{r3}\rho kS\sqrt{a \cdot a} + C_{r4}\rho k \left( aS^T + Sa^T - \frac{2}{3}a \cdot S\delta \right) + C_{r5}\rho k (aW^T + Wa^T) \quad (24)$$

$$a = \frac{\overline{u \otimes u}}{k} - \frac{2}{3}\delta \quad (25)$$

$$S = \frac{1}{2} \left[ \nabla U + (\nabla U)^T \right] \quad (26)$$

$$W = \frac{1}{2} \left[ \nabla U - (\nabla U)^T \right] \quad (27)$$

Nas equações 25, 26 e 27,  $a$  é o tensor de anisotropia,  $S$  é a taxa de deformação e  $W$  é a vorticidade respectivamente.

Nas equações de transporte do modelo das tensões de Reynolds, os coeficientes de anisotropia são substituídos por uma formulação isotrópica, incrementando a robustez neste modelo de turbulência. Os valores das constantes  $c_s$ ,  $c_{\varepsilon,1}$ ,  $c_{\varepsilon,2}$ ,  $c_{s1}$ ,  $c_{s2}$ ,  $c_{r1}$ ,  $c_{r2}$ ,  $c_{r3}$ ,  $c_{r4}$ ,  $c_{r5}$  são 0,22; 1,45; 1,83; 1,7; -1,05; 0,9; 0,8; 0,65; 0,625 e 0,2 respectivamente (Speziale, Sarkar e Gatski, 1991).

## 5. Solução numérica

Para a geração das geometrias e as malhas computacionais utilizou-se o Ansys ICEM-10.0 e para as simulações numéricas empregou-se o Ansys CFX-10.0.

### 5.1 Malhas computacionais

Para os dois problemas estudados foram geradas malhas estruturadas (hexaédrica). No problema 1, o problema resolvido por Pitts (1991), foi empregado  $\frac{1}{2}$  do domínio computacional resultando 1.256.912 elementos aproximadamente, enquanto que para o problema 2, o problema resolvido por Djeridane (1996), foi empregado  $\frac{1}{4}$  do domínio computacional resultando 883.000 elementos. Para reduzir o esforço computacional nas simulações numéricas, foi realizado o processamento em paralelo empregando um cluster com 3 computadores. A tabela 3 mostra as características destes recursos computacionais empregados nas simulações.

Tabela 3. Recursos computacionais.

Quantidade	Processador	Velocidade do processador	Memória RAM
1	AMD	2.16 GHz	3.0
1	AMD	2.00 GHz	1.5
1	Pentium 4	3.40 GHz	1.5

### 5.2 Hipóteses

Foram consideradas as seguintes hipóteses nas simulações:

- Processo em regime permanente,
- Negligenciam-se os efeitos gravitacionais,
- A pressão de referência é 101.325 kPa,
- O escoamento é assumido isotérmico a uma temperatura de referência de 298 K,
- O fluido comporta-se como gás ideal,
- O escoamento é turbulento.

### 5.3 Condições de contorno

As condições de contorno utilizadas nas simulações numéricas foram paredes sólidas (condição de não escorregamento), condição de simetria e velocidades para o jato de gás e o escoamento paralelo de ar (conforme foi mostrado na Tab.1 e 2). Pitts (1991) não apresentou nos seus trabalhos medições de variáveis turbulentas para o jato de

gás e o escoamento paralelo de ar, por isso, foi assumido nas simulações condições de turbulência de 5% para o jato de gás, e de 1% para o escoamento paralelo de ar.

## 6. Resultados e Discussões

A seguir, são apresentados os resultados das simulações obtidos para os três modelos de turbulência e validados com os resultados experimentais obtidos por Pitts (1991a e 1991b) e Djeridane (1996).

### 6.1 Validação dos resultados numéricos - Problema de Pitts

As Figuras 3 e 4 mostram a fração de massa ao longo da linha do centro do jato de propano e metano respectivamente.  $Y_o$  é a fração de massa na saída do injetor e igual a 1, e  $Y_m$  é a fração de massa local do jato de gás.

Nota-se que para ambos os gases estudados, os modelos de viscosidade turbulenta (os modelos k- $\epsilon$  e SST) representam bem melhor os campos de concentração medidos por Pitts (1991a e 1991b) quando comparados com os resultados obtidos pelo modelo das Tensões de Reynolds SSG. O desvio numérico obtido pelo modelo SST, k- $\epsilon$  e SSG foi cerca de 3%, 9% e 20% respectivamente dos resultados experimentais.

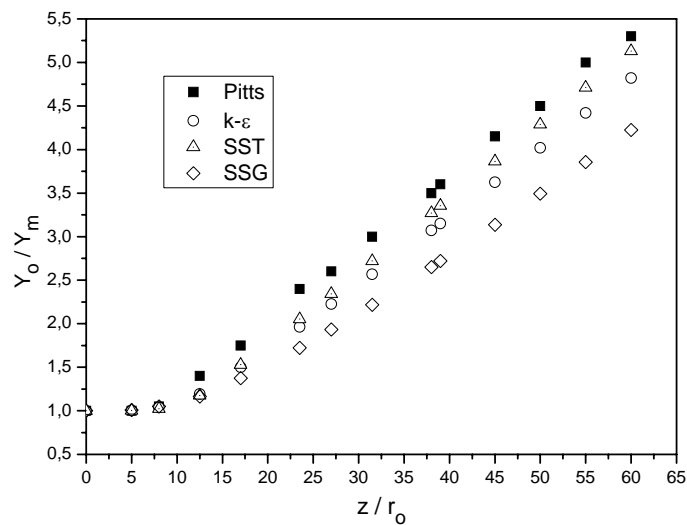


Figura 3. Variação da fração de massa ao longo da linha do centro do jato de  $C_3H_8$  –  $Re = 3960$  (Pitts,1991a).

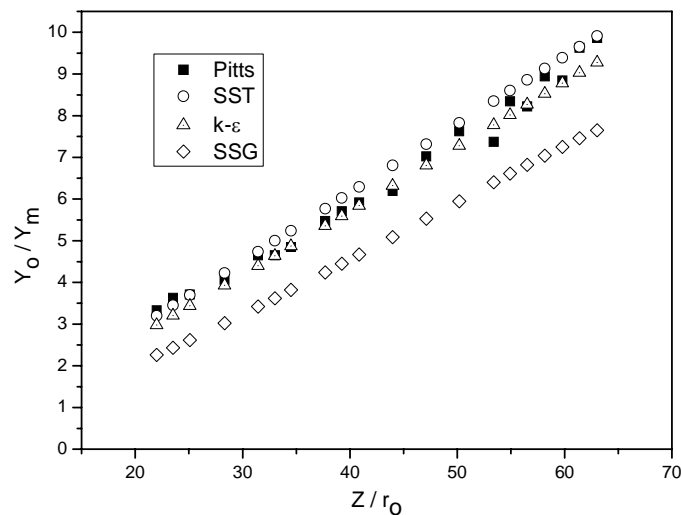


Figura 4. Variação da fração de massa ao longo da linha do centro do jato de  $CH_4$  –  $Re = 3950$  (Pitts,1991b).

### 6.1.1 Influência da relação de densidades $R_\rho$ na fração de massa - Problema 1

A figura 5 mostra a fração de massa  $Y_m$  ao longo da linha do centro para os jatos de propano e metano. Observa-se que os dois gases apresentam o mesmo comportamento para afastamentos próximos de 3 raios do injetor.

Para afastamentos maiores a 3 raios do injetor, a fração de massa do jato  $CH_4$  decresce rapidamente quando comparado com o jato de propano, apresentando uma maior difusão de espécies químicas.

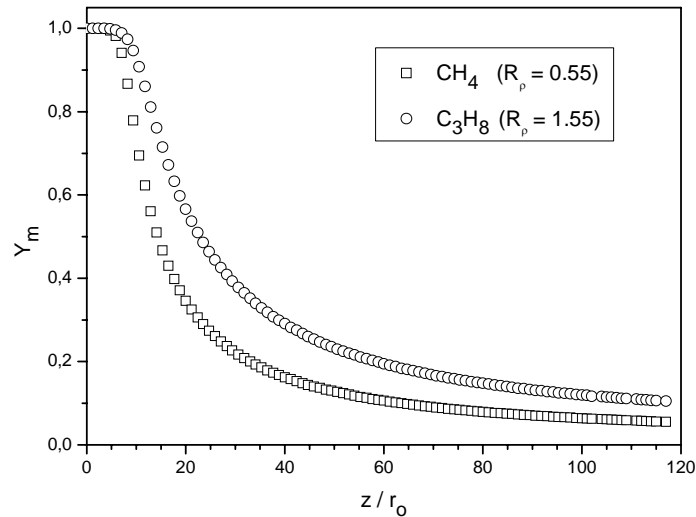


Figura 5. Variação da fração de massa ao longo da linha do centro do jato em função da relação de densidades  $R_\rho$ .

### 6.1.2 Influência do número de Reynolds na fração de massa – Problema 1

A Figura 6 apresenta a influência do número de Reynolds avaliado na saída do injetor na fração de massa ao longo da linha do centro do jato para o gás propano. Estes resultados foram obtidos empregando o modelo de turbulência SST (*Shear Stress Transport*). Nota-se na Fig. 6 que apesar do modelo SST ter apresentado resultados bem próximos aos resultados obtidos por Pitts (1991a e 1991b) (ver Fig. 3 e 4), ele apresenta suas diferenças quando é incrementado o número de Reynolds do jato de gás. No entanto, estas diferenças podem ser creditadas ao desconhecimento das condições de turbulência na entrada do injetor, por isso usou-se condições de turbulência completamente desenvolvidas na saída do jato, as quais apenas aproximam-se das condições experimentais.

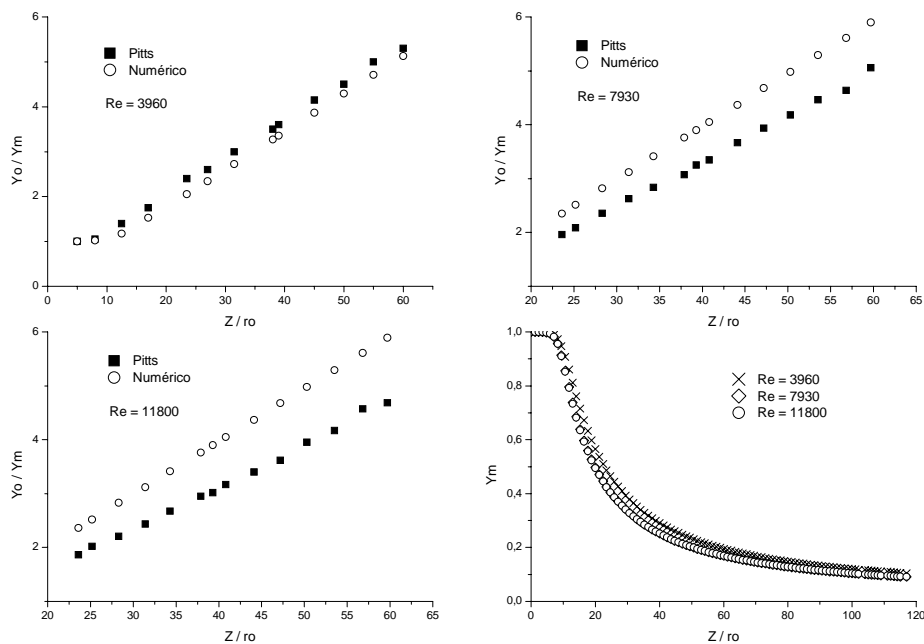


Figura 6. Variação da fração de massa ao longo da linha do centro do jato de  $C_3H_8$  em função do número de Reynolds – modelo de turbulência SST (Pitts,1991b).

Por outro lado, observa-se no lado direito inferior da Fig. 6 que o aumento do número de Reynolds incrementa os níveis de turbulência favorecendo rapidamente o processo de difusão turbulenta de espécies químicas.

### 6.2 Validação dos resultados numéricos - Problema de Djeridane *et al.*

As Figuras 7 e 8 mostram os resultados de simulação para a fração de massa ao longo da linha do centro dos jatos de He e CO<sub>2</sub> respectivamente.  $Y_m$  é a fração de massa local e  $Y_0$  a fração de massa na saída do injetor sendo igual a 1.

Notam-se nessas figuras as deficiências dos modelos de turbulência em reproduzir corretamente os campos de concentração quando aumenta o número de Reynolds do jato na saída do injetor.

No jato de Helio com  $Re = 7000$  (Fig. 7), os modelos de viscosidade turbulenta, especificamente o modelo SST (*Shear Stress Transport*), apresentam resultados bem próximos aos valores experimentais obtidos por Djeridane *et al.* (1996).

No entanto, no jato de CO<sub>2</sub> com  $Re = 32000$  (Fig. 8), para afastamentos maiores a 5 raios do injetor o modelo das Tensões de Reynolds SSG tornou-se mais adequado para reproduzir os valores experimentais de Djeridane *et al.* (1996), onde o desvio numérico obtido foi bem menor quando comparado com os desvios obtidos com os modelos de viscosidade turbulenta.

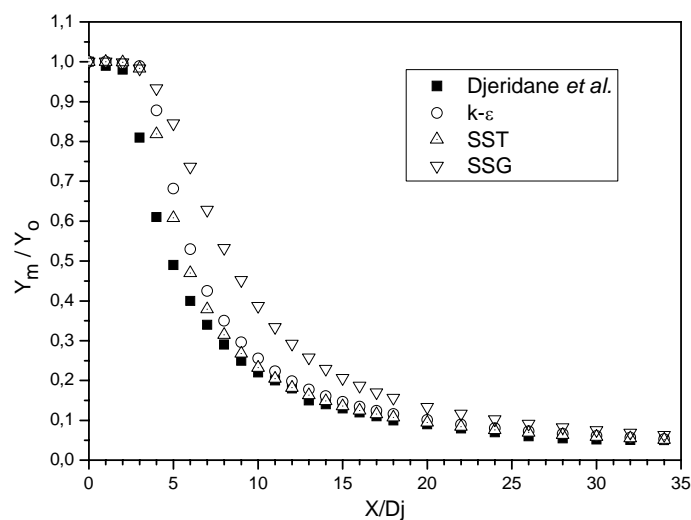


Figure 7. Variação da fração de massa ao longo da linha do centro do jato de He –  $Re = 7000$ .

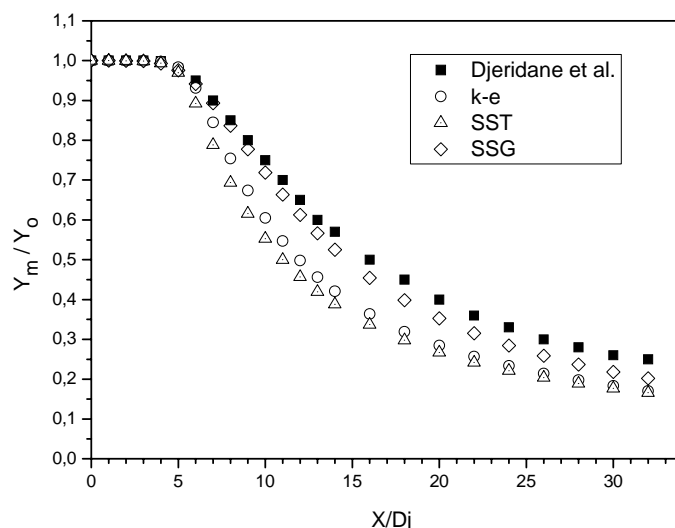


Figura 8. Variação da fração de massa ao longo da linha do centro do jato de CO<sub>2</sub> –  $Re = 32000$ .

A seguir, são apresentados os perfis de concentração para o He e o CO<sub>2</sub> ao longo do raio do jato para dois afastamentos do injetor. Djeridane *et al.* (1996) apresentou resultados de campos de concentração ao longo do raio para afastamentos de 0,2, 2, 5 e 10 diâmetros do injetor. Neste trabalho serão apresentados só os perfis de concentração para os afastamentos de 5 e 10 respectivamente.

A Figura 9 mostra que os modelos de viscosidade turbulenta (k-ε e SST) reproduzem melhor os perfis radiais de concentração para os afastamentos de 5 e 15 diâmetros do injetor. Nota-se que o modelo de turbulência das Tensões de Reynolds - SSG superestima os valores de concentração na região próxima ao centro do jato.

Observando a Fig. 10, para o jato de CO<sub>2</sub>, os modelos de turbulência apresentaram melhores resultados em afastamentos próximos 5 diâmetros do injetor, enquanto que para afastamentos maiores a 5 diâmetros, o modelo das Tensões de Reynolds – SSG permite reproduzir melhor os campos de concentração obtidos por Djeridane *et al* (1996).

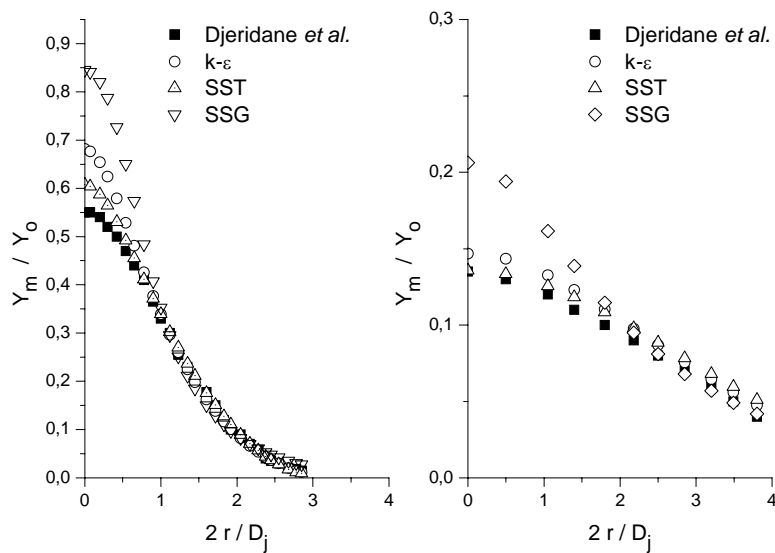


Figura 9. Variação da fração de massa ao longo do raio do jato de Helio para um afastamento de  $X / D_j = 5$  (Fig. da esquerda) e  $X / D_j = 15$  (Fig. da direita).

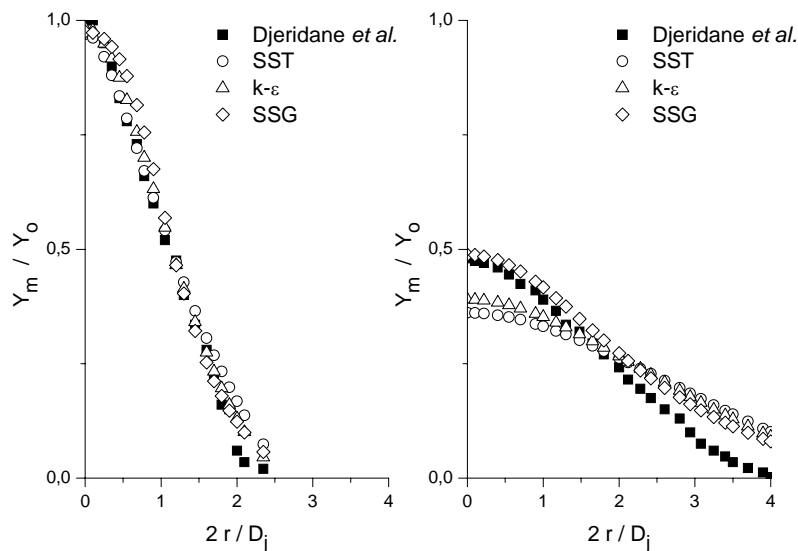


Figura 10. Variação da fração de massa ao longo do raio do jato de CO<sub>2</sub> para um afastamento de  $X / D_j = 5$  (Fig. da esquerda) e  $X / D_j = 15$  (Fig. da direita).

Os perfis radiais da energia cinética turbulenta  $k$ , para o He e CO<sub>2</sub> são apresentados nas Fig. 11 e 12 respectivamente pela relação  $(2 \langle k \rangle / 3)^{1/2} / (U_c - U_a)$  em relação a  $r/L_u$ .  $U_c$  é definido como a velocidade média local,  $U_a$  a velocidade de entrada do escoamento paralelo de ar,  $r$  é o raio do tubo concêntrico e  $L_u$  é a metade da largura do perfil de velocidade radial na posição  $X / D_j$ .

As Figuras 11 e 12 mostram que a energia cinética turbulenta aumenta rapidamente quando a densidade do jato de gás é baixa. Além disto, observa-se que a máxima produção de energia cinética turbulenta obtida para o He e o CO<sub>2</sub> encontra-se nas regiões de  $0,5 < r/L_u < 0,7$  e  $r/L_u \approx 1$  respectivamente, a mesma faixa que foi obtida por Djeridane *et al.* (1996) nas suas medições.

Enquanto aos modelos de turbulência, nota-se que os modelos de viscosidade turbulenta (os modelos k-ε e SST) superestimam a produção de energia cinética turbulenta quando comparados com os valores obtidos pelo modelo de turbulência das Tensões de Reynolds SSG.

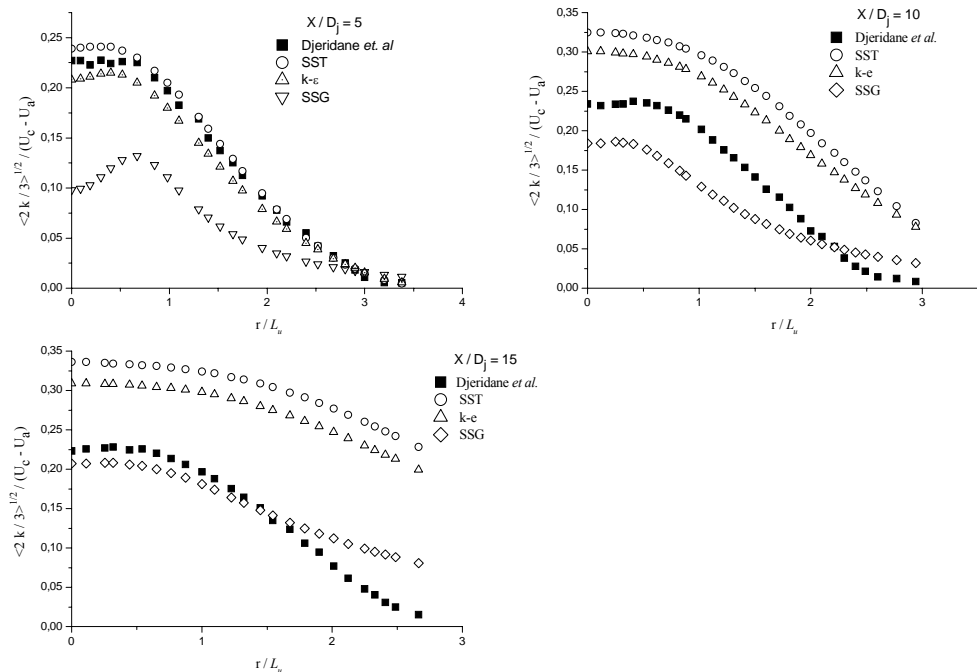


Figura 11. Variação da energia cinética turbulenta ao longo do raio do jato de Helio para diferentes afastamentos do injetor.

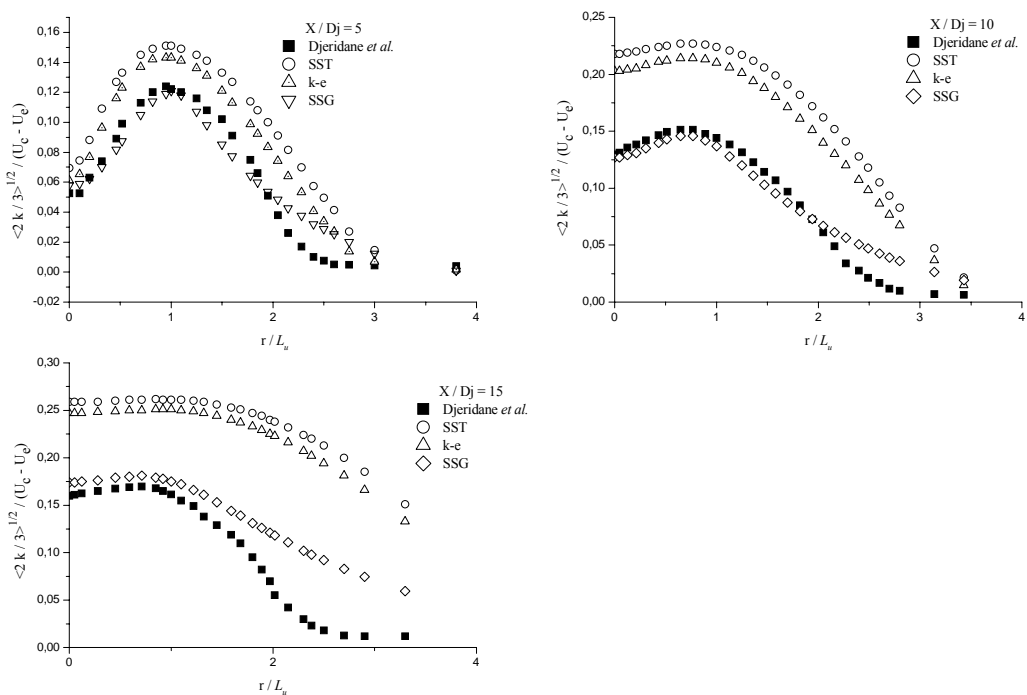


Figura 12. Variação da energia cinética turbulenta ao longo do raio do jato de CO<sub>2</sub> para diferentes afastamentos do injetor.

## 7. Conclusões

A análise numérica realizada neste trabalho permitiu validar modelos adequados de simulação para a aplicação na simulação de bicos injetores de gás para queimadores atmosféricos.

Os modelos de turbulência estudados deixam em evidência que o modelo SST (*Shear Stress Transport*) apresentou resultados mais próximos aos resultados obtidos por Pitts (1991a e 1991b) e por Djeridane *et al.* (1996) para números de Reynolds na ordem de 3950 – 11800.

Apesar de que o modelo de turbulência  $k-\epsilon$  tenha apresentado resultados mais próximos aos resultados obtidos por Pitts (1991a e 1991b) e Djeridane *et al.* (1996) para os números de Reynolds de 3960 e 7000 respectivamente, este modelo apresenta suas deficiências em reproduzir corretamente escoamentos em jatos circulares (Silva, 2002).

Para escoamentos completamente turbulentos, o modelo das Tensões de Reynolds SSG torna-se mais adequado na resolução de aspetos do escoamento em jatos.

Mesmo não conhecendo-se com exatidão todas as condições experimentais, acredita-se que as características como a geometria do injetor, a temperatura, as propriedades termofísicas e as condições de contorno tenham sido reproduzidas corretamente nos dois problemas estudados.

## 8. Referências

- Djeridane, T.; Amielh, M.; Anselmet, F. and Fulachier, L. Velocity turbulence properties in the near-field region of axisymmetric variable density jets. American Institute of Physics, Vol. 8, No. 6, 1996.
- Launder, B.E.; Spalding, D.B. Lectures in Mathematical Models of Turbulence, Academic Press, London, 1974.
- Pitts, W. M. Effects of global density ratio on the centerline mixing behavior of axisymmetric turbulent jets. Experiments in Fluids 11, 125-134, 1991a.
- Pitts, W. M. Reynolds number effects on the mixing behavior of axisymmetric turbulent jets. Experiments in Fluids 11, 135-141, 1991b.
- Silva, A. P.; Menut, P. P; SU, J. Coleção de Cadernos de Turbulência. Vol. 1. 1ª Escola de Primavera em Transição e Turbulência. Instituto Militar de Engenharia. Rio de Janeiro. 1998, 134p.
- Speziale, C.G., Sarkar, S. and Gatski, T.B., “Modelling the pressure-strain correlation of turbulence: an invariant dynamical systems approach”. J. Fluid Mechanics, Vol. 277, pp. 245-272, 1991.
- Wilcox, D. C. Turbulence Modeling for CFD. America by Griffin Printing, California, 1994.

Os autores são os únicos responsáveis pelo conteúdo do material impresso incluído no seu trabalho.

## NUMERIC SIMULATION OF CONCENTRIC JETS AND VALIDATION WITH EXPERIMENTAL RESULTS OF THE LITERATURE

### Ibanez, W. A. C

Federal University of Santa Catarina. Combustion Laboratory and Engineering of Thermal Systems – Labcet. Campus Trindade. CEP: 88040-900 Florianópolis-Brazil.  
ibanez@labcet.ufsc.br

### Oliveira, A. A. M

Federal University of Santa Catarina. Combustion Laboratory and Engineering of Thermal Systems – Labcet. Campus Trindade. CEP: 88040-900 Florianópolis-Brazil.  
amirol@emc.ufsc.br

## Abstract

This work focuses the numeric analysis of the flow concentric jets and confined to pipe. The analysis allows to determine and to validate appropriate models of simulation for the application in the simulation of injectors of gas for atmospheric burners. In the analysis and design of injectors of gas for atmospheric burners, the values of the field velocity, pressure and concentration of the flow in the area of the free jet between the injector and the entrance of the tube venturi are not usually available in the literature and they present difficulties in your measurement for the configurations used in the applications. Like this, the development of project methodologies based on numeric simulations and flow models are interesting of the point of view of technological development. Is an important subject in these simulations been the available turbulence models in commercial codes (the models  $k-\epsilon$ , the Reynolds Stress SSG, Shear Stress Transport SST) are they capable to reproduce the fields of velocity and concentration correctly found in the applications in atmospheric burners. For the test of performance these turbulence models and the procedures computations, two problems were selected, whose flows are similar to the found in injectors of atmospheric burners and

that presented available measurements in the literature. The simulate jets were mixtures of CH<sub>4</sub>/Ar, C<sub>3</sub>H<sub>8</sub>/Ar, CO<sub>2</sub>/Ar and He/Ar.

Keywords: Gas injectors, jets, numeric simulation, turbulence models, atmospheric burners.



## EXPERIMENTAL STUDY OF A COMBINED THERMAL AND FLUIDYNAMIC MECHANISM OF FLAME STABILIZATION IN A RADIANT POROUS BURNER

**Rafael de Camargo Catapan**

Department of Mechanical Engineering - Federal University of Santa Catarina – Florianópolis/SC  
catapan@labcet.ufsc.br

**Fernando Marcelo Pereira**

Department of Mechanical Engineering - Federal University of Santa Catarina – Florianópolis/SC  
fernando@labcet.ufsc.br

**Amir Antonio Martins de Oliveira Júnior**

Department of Mechanical Engineering - Federal University of Santa Catarina – Florianópolis/SC  
amirol@emc.ufsc.br

*Abstract: In this paper, we present an experimental study of the flame stabilization in a radiant porous burner with combined thermal and fluidynamic mechanisms. In the application of porous radiant burners, usually the flame is stabilized when two or more layers of porous foams with different structures are used in series. This stabilization occurs solely by heat loss to the external environment and a basically plane flame is obtained. Here, a perforated plate with a single central injection hole was placed upstream of the ceramic foams. In this case, the flame develops a rounded, bell type, axisymmetric shape and the flammability range is further extended by the flow acceleration as the flame approaches the premixed gas inlet hole. In order to test the limits of this approach, burners with different layers of 20 mm thick alumina ( $Al_2O_3$ ) and zirconia ( $ZrO_2$ ) ceramic foams, with a diameter of 70 mm, operating with premixed methane and air were tested. The perforated plate promoted a local increase of outflow speed, preventing flashback for lower flame speeds. It is shown that a properly designed perforated plate, through a combined thermal and fluidynamic stabilization mechanism, is a simple way of increasing the operation range of radiant porous burners.*

*Keywords: porous radiant burner, premixed flame, flammability limits, flame stabilization, natural gas.*

### 1. Introduction

The development of radiant porous burner has been encouraged by advantages these in relation to free flame burners. According to Hsu (1996), radiant porous burner has high radiation efficiencies, extended lean flammability limit, good flame stability characteristics and low pollutants emissions. Many of this features was analyzing by Hardesty and Weinberg (1974) in burners with high heat recirculation. They showed the advantages of excess enthalpy flame made by heat recirculation of combustion products to unburnt mixture. Was possible burn no inflammable mixture and fuel with low calorific power.

Takeno and Sato (1979) proposed a simple way to produce excess enthalpy flames inserting a porous, highly conductive solid into the flame to conduct heat from post flame zone to pre flame zone. This way was tested by Kotani e Takeno (1982), with a premixed combustion of methane and air in an alumina tubes burner with heat recirculation of combustion products. They observed the flame stabilized within a porous media in different positions resulting different heat recirculation rates. The Figure (1) shows a rendering of the gas and solid enthalpy across a flame within a porous medium, showing the increase of enthalpy in the flame zone as a result of sensible heat recirculation.

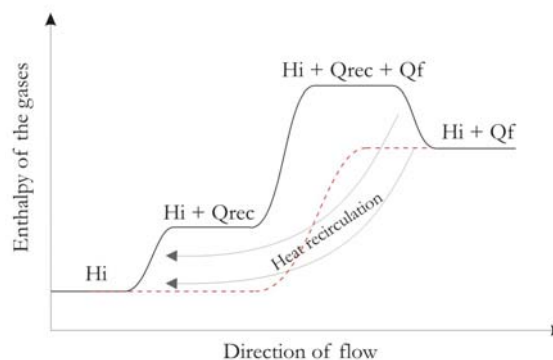


Figure 1. Rendering of the gas and solid enthalpy across a flame within a porous medium, showing the increase of enthalpy in the flame zone as a result of sensible heat recirculation, where  $H_i$  is the initial enthalpy,  $Q_{rec}$  is the recirculated heat and  $Q_f$  is the energy of the fuel (from Hardesty e Weinberg, 1974).

Others researchers studied combustion in porous media, especially in radiant porous burners. Know of operational conditions, pointedly flammability limits, limits of blow off and flashback and radiation efficiencies, is very important for your study. In this context, the experimental study had been a great importance in validation of numerical model and prevision of operational range.

Following Barra *et al.* (2003) the porous burner can have different designs. It is usual, porous burner made with two layers with different properties. Trimis and Durst (1996) showed that the rate of heat loss from the reaction zone increases as the pore size decreases, resulting in flame quenching as the pore size is decreased below a critical value. Therefore, when the combustion takes place within a double layer of ceramic foams, in which the layer located upstream has pore size below the critical value, there is a tendency of stabilization of the combustion front at the interface between the two layers. Hsu (1996) calls the layer with small pores as the preheating region (PR) and the layer with the larger pores as the stable-burning region (SBR).

Hsu *et al.* (1993) researched numerically and experimentally the premixed combustion of methane and air within a porous burner made from ceramic foam. The PR was made with 65 ppi and SBR with 10, 30 and 45 ppi. They obtained a range of flame speed for each equivalence ratio. In all studied equivalence ratios, the flame speed within a porous medium was higher than the laminar free flame speed for the same conditions. In numerical study, they founded two different regions of flame stabilization. The first region, near to the interface between layers with different properties was experimentally confirmed. The second region, near to the exit surface of the burner for environment temperature close to the burner surface temperature, was not confirmed.

In a similar study, Khanna *et al.* (1994) measured the CO and NO<sub>x</sub> emissions and radiation efficiencies of the porous burner. They looked that NO<sub>x</sub>/No increase with the increase of flame speed for all studied equivalence ratios. In general, CO emissions increase with flame speed. However, for a fixed equivalence ratio, the CO is minimum at intermediate values of the flame speed. The radiant thermal efficiency of the burner decrease with increasing the flame speed. Hsu (1996) compared the results obtained by Khanna *et al.* (1994) with a porous burner with a thermal radiation barrier. He not found differences between results. In this experiment, he used a third layer of ceramic foam upstream of SBR, called radiation reflection region (RRR). A second stabilization region was got in the interface between SBR and RRR.

This mechanism for flame stabilization and has been explored by Pereira (2002) in the design of surface and volumetric porous burners. In this study, he used three thermocouples axial lines for flame structure measurements. He observed the flame stabilization in the interface between ceramic foams with different properties. Beyond this, he found a minimum temperature variation in the three lines. This information shows the plane shape of the flame.

Barra *et al.* (2003) and Barra and Ellzey (2004) studied a porous burner made from two layers of ceramic foams with different properties. The numerical studies show that the properties of porous matrix influences the limits of stability and that a good design of porous burner can be find by correct selection of this properties.

Chaffin *et al.* (1991) shows an alternative way of flame stabilization and enlargement of yours stability limits. In this study, the flame stabilization was controlling by the combined of the interface of different properties of ceramic foams and a ring shape heat exchanger near of interface. The results show a minimum variation of temperature peak position and consequently of flame position with flame speed and equivalence ratio variations.

Hayashi *et al.* (2004) studied a radiant porous burner with large superficial area composed by two layers. The first layer was made from an insulation perforated plate and avoided the flash back. The combustion reaction occurs in the second layer made from SiC ceramic foam. The results show that the flame position is constant and near to the interface. This behavior is due the blockage of heat transferred in the solid in the counter-flow direction at the interface combined with high flow speed on the interface. However, for low power and low excess air ratio conditions, the flame stabilizes inside the holes of the perforated plate.

Recently, we proposed a simple way of flame control within a porous radiant burner with large superficial area (Catapan, 2005). Differently of Hayashi *et al.* (2004), we used a perforated plate with few holes that decreased the passage area of the unburnt gases in relation to ceramic foam. The advantage of this design in flame stabilization is that above each hole the flow expands and decelerates, originating a flame stretch, and the flame position stabilizes where the local flame velocity equilibrates the flow speed in a mode essentially like a Bunsen burner flame. This fluidynamic stabilization of flame makes difficult the flash back and expands the flame stability limits range.

In this study, we use a combine thermal and fluidynamic mechanism of flame stabilization. The first stabilization mechanism present in this radiant porous burner is the thermal stabilization imposed by the presence of a solid matrix, i.e., heat recirculation and heat loss to the surroundings. A second stabilization mechanism is present when two or more layers of different porous structures are used together. These two mechanisms are well known from the literature and are briefly discussed in the previous paragraphs. A third stabilization mechanism is fluidynamic and is related to the reactants injection in the burner. All these mechanisms are explored in this work to achieve stable and uniform combustion.

Now, we present an experimental study of a combined mechanism of flame stabilization in a porous radiant burner based in the porous burner made by Pereira (2002). Here, a perforated plate with a single central injection hole was placed upstream of the ceramic foams. The flame position and shape were showed by thermocouple measurements within a porous burner in different flame speeds and equivalence ratios. We show the stability limits and the radiation efficiencies with the variation of the diameter of the injection hole.

In the following, the experimental set-up and burner design is described.

## 2. Experimental set-up

### 2.1. Experimental apparatus

The Figure (2) presents a schematic view of the apparatus for testing of radiant porous burners. Basically, it is composed of a burner section, air and fuel supply systems and measurement systems, including temperature measurement and data acquisition.

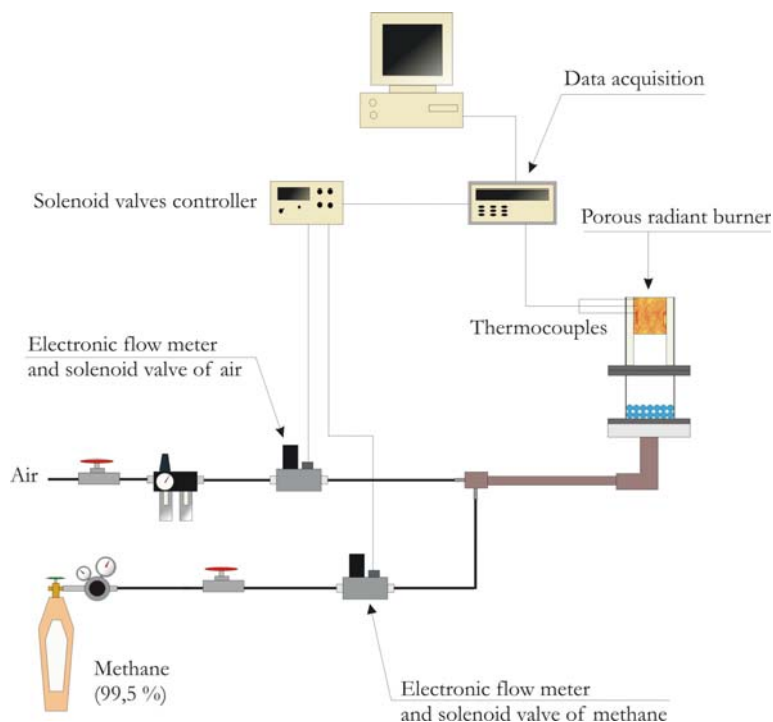


Figure 2. Schematic view the apparatus for testing of radiant porous burners.

The air supply system is composed of a check valve, air flow control valve and an electronic flow meter (from Omega Engineering Inc.), with measurement range between 0 and 500 liters per minute (lpm) and measurement uncertainty of  $\pm 0.75$  lpm. The fuel supply system is composed by a check valve, solenoid control valve and an electronic flow meter (from Omega Engineering Inc.) with the measurement range between 0 and 50 lpm and measurement uncertainty of  $\pm 0.05$  lpm. Air and methane is premixed in a steel tube with 1000 mm length. Type R (platinum and platinum + 13% rhodium) thermocouples insulated inside alumina beads are used to measure the temperature within the porous burner. These have measurement range between 50°C and 1768°C and measurement uncertainty of  $\pm 4^\circ\text{C}$ . Values of temperature are recorded by an Agilent 34970. A data acquisition system was interfaced to a personal computer.

### 2.2. Burner design

The burner was made with different layers of 20 mm thick alumina ( $\text{Al}_2\text{O}_3$ ) ceramic foams (manufactured by Foseco Ind. e Com. Ltda.), as shown in Figure (3). The SBR was made with 10 porous per inch (ppi) ceramic foams and the PR with 40 ppi ceramic foams. All ceramic foams had diameter of 70 mm and 80% of volumetric porosity.

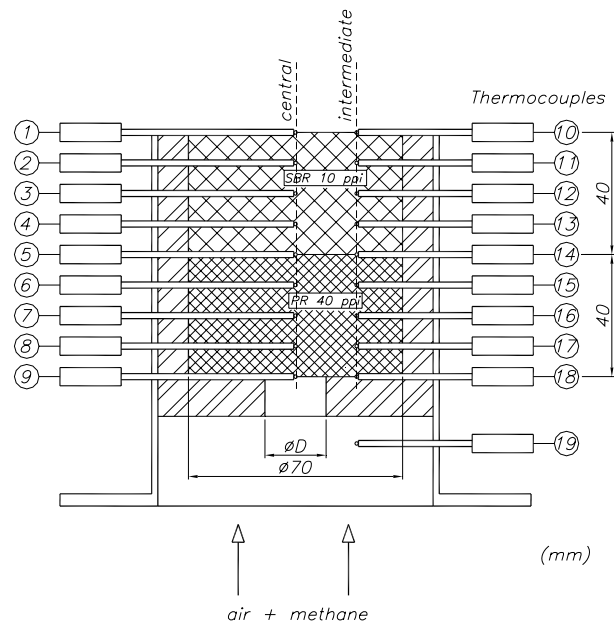


Figure 3. Schematic drawing of the radiant porous burner.

A perforated plate with a single central injection hole was placed upstream of the ceramic foams, Fig. (3). In this study, we used two perforated plate with diameter of 17 mm and 35 mm (“D” in Fig. 3).

Two thermocouples lines, each of which with 9 thermocouples, was placed within of ceramic foams as shown in Figure (3). The central line was placed in the centre of the porous medium and the intermediate line in the half way between central line and the external cylindrical surface. The thermocouples show where the reaction zone is located, because a great gradient of the temperature is recorded in this region. For the steady state flame, we will know the position of flame front and the flame shape. Axisymmetric variations in the flame will not be identified, due the only one thermocouple line in the periphery of the ceramic foam.

Due to the hot bed measure great, it is not possible to know if we are measuring the gas phase temperature or the solid phase temperature. According to Barra e Ellzey (2004), the flame within porous media is composed by two regions. In the pre heating zone, the solid phase temperature is highest than the gas phase temperature. In this zone, the thermocouple is heating by radiation from solid phase and cooler by gas phase. The reaction zone star when the solid phase and the gas phase temperatures are equals. As from this moment, the thermocouple is heating by the gas phase and cooler by radiation to solid phase.

### 2.3. Experimental method

The experimental method used in this work follows Hsu *et al.* (1993). It consists of choosing a fuel equivalence ratio and a gas volumetric flow rate that allows for flame propagation within the porous burner. The flame stabilizes in the SBR in a region near the interface between the PR and the SBR. The equivalence ratio is slowly adjusted to the desired value and the volumetric flow rate is increased until the upper limit for flame propagation (the blowout limit) is reached. Then, the burner is reinitialized and the volumetric flow rate is decreased until the lower limit for flame propagation (the flashback limit) is reached. The larger possible fuel equivalence ratio is limited by the upper temperature limit for the porous matrix used. Here, the fuel equivalence ratio follows the usual definition as,

$$\phi = \frac{\left(\frac{\dot{m}_F}{\dot{m}_a}\right)_a}{\left(\frac{\dot{m}_F}{\dot{m}_a}\right)_s} \quad (1)$$

The flame speed ( $S_L$ ) is calculated dividing the gas flow rate by the burner area. The calculated flame speed by this method is a reasonable approximation for plane flame shape. However, we observe in this study that the flame shape is three-dimensional and the real flame speed is very difficult to determine. A flame is considered stable when the recorded temperatures within the porous burner vary by less than 10°C in ten minutes. The blow off limit is identified as the flame speed beyond which the flame stabilizes outside the burner and is visually seen as a trembling blue flame at the burner surface. The flash back limit is defined as the flame speed for which the flame penetrates in the perforated plate, is identified by increase in the temperature in the thermocouple 19, Fig. (3). The radiation efficiency of the burner is defined as ratio between the energy emitted by the burner through thermal radiation and the total energy released by

the combustion process. We define that the surface temperature of the burner is equal to arithmetic mean of the temperatures indicated by thermocouples 1 and 10, Fig. (3).

### 3. Results and discussion

We tested the radiant porous burner with  $\phi = 0,55$  e  $\phi = 0,60$ . According to experimental procedure, was found the upper and lower stability limits for burner configurations with perforated plated of 17 mm and 35 mm. The highest total power obtained was 3,7 kW in  $\phi = 0,55$  e  $S_L = 53$  cm/s and the lower total power was 0,5 kW in  $\phi = 0,55$  and  $S_L = 7$  cm/s.

Figure (4) presents a temperature profiles across the porous burner with a perforated plate of 17 mm, recorded in the central line (Fig. 4a) and in the intermediate line (Fig. 4b). The “x” axis represents the non dimensional length and is equal to  $x/L$  where “L” is burner length and “x” is the position. Figure (4a) presents the displacement of the temperature peak in the central line when the flame speed is increased. According to Pereira (2002), the flame front position is equal to the temperature peak position. In Figure (4a) we observe that flame front is close to the burner surface for  $S_L = 40$  cm/s. For higher flame speed than this one, i.e.,  $S_L = 50$  cm/s, occurs the blow off. This occurs because the higher radiation heat exchange to the environment by porous matrix when the flame front is near to the burner surface. The flame front is cooled and your speed is decreased. Figure (4b) presents the temperature profiles across the porous burner recorded in the intermediate line. We observe that the flame front position is stable with increase the flame speed and the temperature profile is smoother than the profile in the central line.

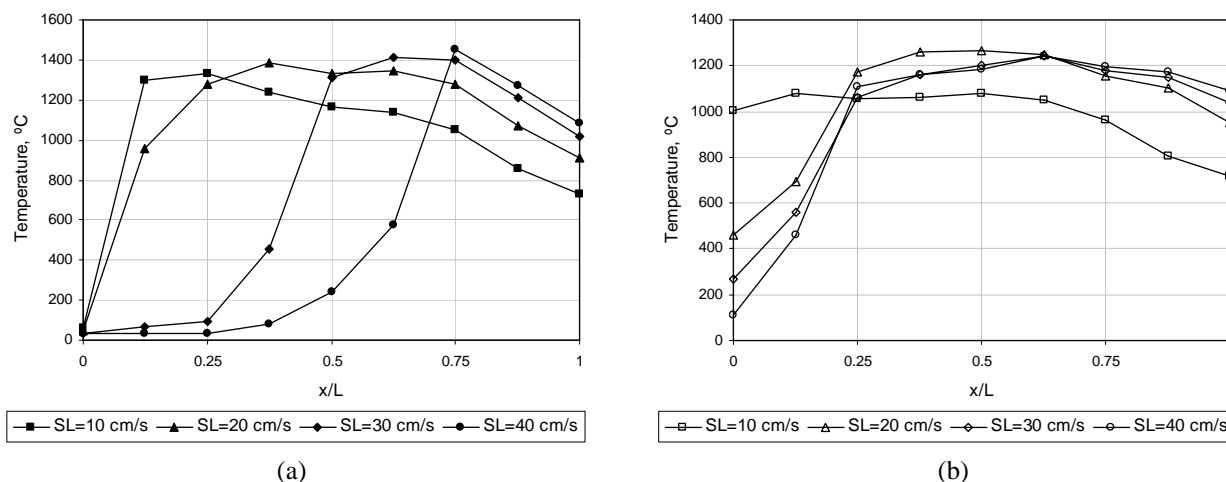


Figure 4. Temperature profiles across the porous burner with a perforated plate of 17 mm, for  $\phi = 0,55$ , recorded (a) in the central line and (b) in the intermediate line.

In the Figure (4a) we observe that the flame front is close to the downstream surface of the burner for  $S_L = 10$  cm/s. For the same conditions, the Figure (4b) doesn't present a peak of temperature that defines the flame front position. This shows that flame front only crossed the central line of the thermocouples. When we increased the flame speed, the flame front in the central line is displacement across the porous medium until the blow off. However, the flame front position in the intermediate line is constant. The flame develops a rounded and bell shape that is lengthened when the flame speed is increased.

The variation of the flame front position in the central line was observed when we change the equivalence ratio for a same flame speed. With the increase of the fuel mass fraction, i.e., increase the total power of the burner, increase the propagation speed of chemical reaction and the flame front found a new stability position. This behavior is visualized in the Figure (5) where are presented the temperature profiles across the porous burner with a perforated plate of 17 mm, operating with  $S_L = 30$  cm/s,  $\phi = 0,55$  and  $\phi = 0,60$ , recorded (a) in the central line and (b) in the intermediate line.

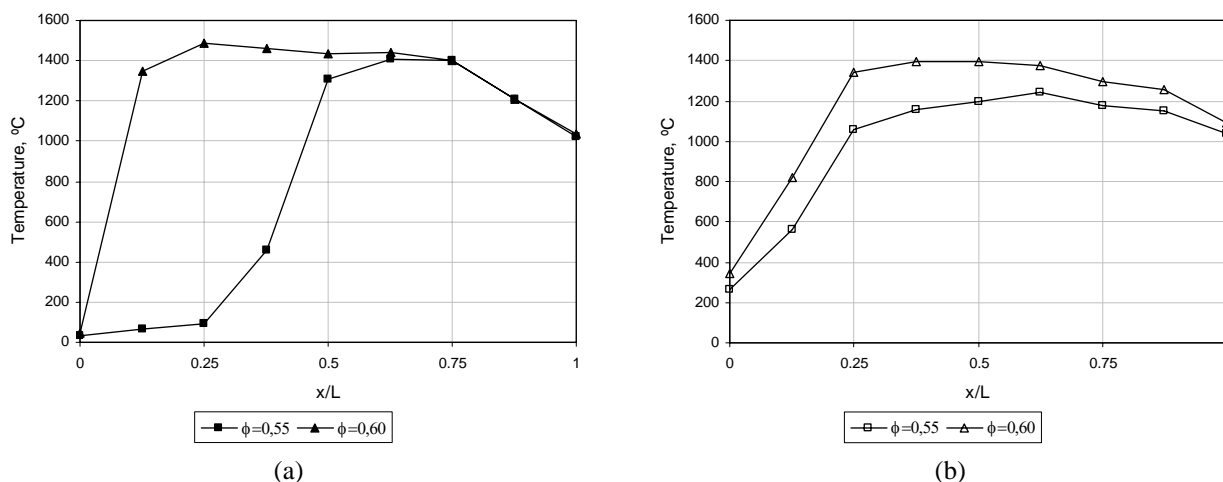


Figure 5. Temperature profiles across the porous burner with a perforated plate of 17 mm, for  $S_L = 30$  cm/s,  $\phi = 0,55$  and  $\phi = 0,60$ , recorded (a) in the central line and (b) in the intermediate line.

In Figure (5) we observe the displacement of the flame front to close of downstream surface of the porous medium for increase of the equivalence ratio. In this region, the flame front become fixed, because the high flow speed near to the perforated plate is equal to the chemical reaction speed.

In other experiment, we test the radiant porous burner in the same operational conditions with a perforated plate of 35 mm. In general, the two configurations of the burners present stable flame with same shape, i.e., three dimensional and bell shape. For lower flame speed ( $S_L < 30$  cm/s), the two configurations present the constant flame front position. However, for  $S_L > 30$  cm/s, the configuration with perforated plate of 17 mm presents the flame front position more close to the upstream of the burner than the configuration with perforated plate of 35 mm. This behavior can be visualized in Figure (6) where are presented the temperature profiles across the porous burner, operating with  $\phi = 0,55$ ,  $S_L = 30$  cm/s, recorded (a) in the central line and (b) in the intermediate line.

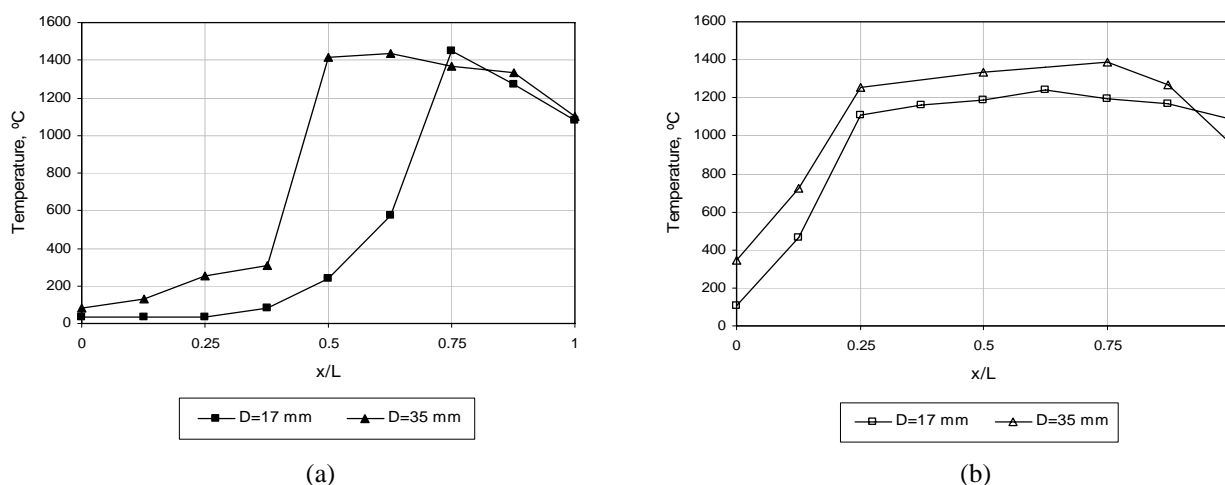


Figure 6. Temperature profiles across the porous burner, for  $\phi = 0,55$ ,  $S_L = 30$  cm/s, with perforated plate of 17 mm and 35 mm, recorded (a) in the central line and (b) in the intermediate line.

Differences between the upper stability limits were found between the two configurations. For  $\phi = 0,55$ , the configuration with perforated plate of 17 mm presented an upper stability limits in  $S_L = 45$  cm/s and the configurations with perforated plate of 35 mm presented in  $S_L = 53$  cm/s. Both configurations presented blow off in the central region of the burner surface according to bell type shape. The differences between two stability limits are due the higher flow speed by perforated plate of 17 mm than the flow speed by 35 mm. For  $\phi = 0,60$ , don't was found the upper stability limits due the high temperature of the solid matrix, near to thermal degradation limit of the ceramic foam (1550°C).

Figure (7) presents the radiation efficiencies as a function of flame speed for everyone studied conditions. The values varied between 20 % and 33% with the highest value in intermediate flame speed. As from  $S_L = 20$  cm/s, the radiation efficiencies decrease with increase of the flame speed. This behavior was observed by Khanna *et al.* (1994) and Pereira (2002). However, a radiation efficiencies decrease when the flame speed is decreased. This is due the lower surface temperature by radiation heat losses to environment in the lower flame speed (Fig. 4). For higher flame speed

the total power is increased, however, the radiation efficiencies are decreased because the surface temperature is limited by adiabatic flame temperature.

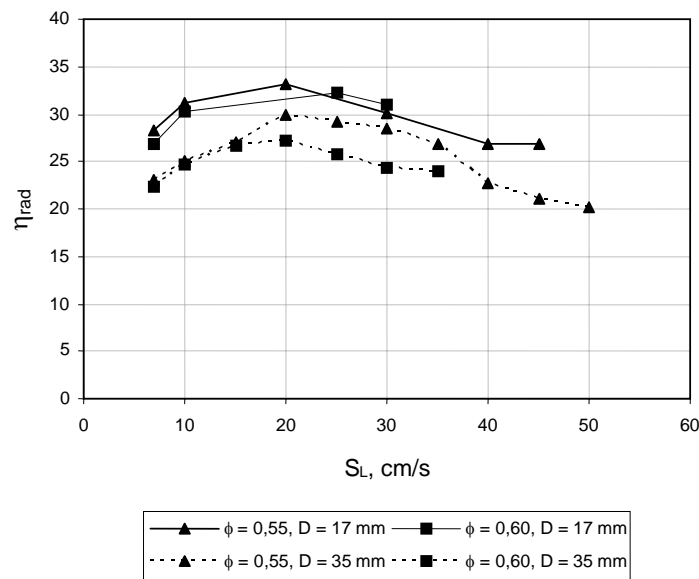


Figure 7. Radiation efficiencies as a function of flame speed for  $\phi = 0,55$ ,  $\phi = 0,60$  and perforated plate of 17 mm and 35 mm.

#### 4. Conclusions

We present an experimental study of the flame stabilization in a radiant porous burner with combined thermal and fluidynamic mechanisms. Burners with different layers of 20 mm thick alumina ( $Al_2O_3$ ) and zirconia ( $ZrO_2$ ) ceramic foams, with a diameter of 70 mm, operating with premixed methane and air were tested. A perforated plate with a single central injection hole was placed upstream of the ceramic foams.

The main findings can be summarized as:

1. For the studied operational conditions, the flame develops a rounded, bell type and axisymmetric shape.
2. When we increased the flame speed for the same equivalence ratio, the flame front in the central line is displaced across the porous medium until the blow off. However, the flame front position in the intermediate line is constant.
3. The variation of the flame front position in the central line was observed when we change the equivalence ratio for a same flame speed.
4. Both configurations presented blow off in the central region of the burner surface according to bell type shape.
5. Differences between the upper stability limits were found between the configurations with perforated plate of 17 mm and 35 mm. The differences are due the higher flow speed by perforated plate of 17 mm than the flow speed by 35 mm.
6. The radiation efficiencies values varied between 20 % and 33% with the highest value in intermediate flame speed.
7. The flammability range can be extended by a properly designed perforated plate.

#### 5. References

- Barra, A. J., Diepvens, G., Ellzey, J. L., Henneke, M. R., 2003, "Numerical study of the effects of material properties on flame stabilization in a porous burner", *Combustion and Flame*, Vol. 134, pp. 369-379.
- Barra, A. J., Ellzey, J. L., 2004, "Heat recirculation and heat transfer in porous burners", *Combustion and Flame*, Vol. 137, pp. 230-241.
- Catapan, R. C., Pereira, F. M., Oliveira, A. A. M., 2005, "Development of a radiant porous burner with a combined thermal and fluidynamic mechanism of flame stabilization", *Proceedings of 18th International Congress of Mechanical Engineering*, Ouro Preto, Brazil.
- Chaffin, C., Koenig, M., Koeroghlian, M., Matthews, R. D., Hall, M. J., Nichols, S. P., Lim, I-G., 1991, "Experimental investigation of premixed combustion with highly porous media", *ASME/JSME Thermal Engineering Proceedings*, Vol. 4, pp. 219-224.
- Hsu, P. F., 1996, "Experimental study of the premixed combustion within the nonhomogeneous porous ceramic media", *National Heat Transfer Conference*, Vol.6, ASME.

- Hsu, P. F., Evans, W. D., Howell, J. R., 1993, "Experimental and numerical study of premixed combustion within nonhomogeneous porous ceramics", *Combustion Science and Technology*, Vol. 90, pp. 149-172.
- Hardesty, D. R., Weinberg, F. J., 1974, "Burners producing large excess enthalpies", *Combustion Science and Technology*, Vol. 8, pp. 201-214.
- Hayashi, T. C., Malico, I., Pereira, J. C. F., 2004, "Three-dimensional modelling of a two-layer porous burner for household applications", *Computers and Structures*, Vol. 82, pp. 1543-1550.
- Khanna, R., Goel, R., Ellzey, J. L., 1994, "Measurements of emissions and radiation for methane combustion within a porous medium burner", *Combustion Science and Technology*, Vol. 99, pp. 133-142.
- Kotani, Y., Takeno, T., 1982, "An experimental study on stability and combustion characteristics of an excess enthalpy flame", *Proceedings of the 19th Symposium on Combustion / The Combustion Institute*, pp. 1503-1509.
- Pereira, F. M., 2002, "Medição de características térmicas e estudo do mecanismo de estabilização de chama em queimadores porosos radiantes", in Portuguese, M.Sc. Thesis, UFSC, 145 p.
- Takeno, T., Sato, K., 1979, "An excess enthalpy flame theory", *Combustion Science and Technology*, Vol. 20, pp. 73-84.
- Trimis, D., Turst, F., 1996, "Combustion in a porous medium – advances and applications", *Combustion Science and Technology*, Vol. 121, pp. 153-168.

## **6. Copyright Notice**

The author is the only responsible for the printed material included in his paper.



## CONVERSÃO DE MOTORES DIESEL PARA GÁS NATURAL

### Leonardo Mauro Junior

Universidade Federal do Rio de Janeiro – Rua Viana Drumond, 48. Vila Isabel. Rio de Janeiro, RJ, Brasil 20560-070.  
leonardomauro@terra.com.br

### Silvio Carlos Anibal de Almeida

Universidade Federal do Rio de Janeiro - Ilha do Fundão, CT - sala G-204, Rio de Janeiro, RJ, Brasil 21945-970.  
silvio@gmail.com

**Resumo.** O presente projeto trata da conversão de um motor Scania DSI 11, originalmente ciclo Diesel, usado para geração estacionária, para operar num ciclo Otto com gás natural. A conversão dedicada ou otolização permite uma melhor performance do motor e um menor custo de geração, possibilitando ao consumidor uma economia de energia ao operar nos horários de pico em comparação com as tarifas cobradas pelas distribuidoras. Na faixa de potência deste motor (231 kW), não existe um similar nacional. Um estudo econômico da conversão mostra que seu custo é significativamente menor que a importação de um motor do mesmo porte.

*Palavras chave:* conversão, motores, diesel, gás natural.

### 1. Introdução

O objetivo desse projeto é oferecer uma alternativa econômica para a geração de energia, convertendo o motor Scania DSI 11 estacionário, a diesel, para o uso dedicado de gás natural, tornando-o totalmente independente do combustível derivado do petróleo.

O projeto destina-se a alimentar o motor com gás natural canalizado, fornecido pela companhia distribuidora de gás, dispensando assim toda a logística para abastecimento periódico de combustível. Passa-se a utilizar um combustível mais barato, e teoricamente menos poluente que o óleo diesel.

A conversão do motor Scania torna-se interessante por permitir uma solução mais barata perante os elevados preços de novos motores estacionários a gás natural, por serem importados e avaliados em dólar.

A otolização, ou conversão dedicada, permite que a transformação seja mais específica, possibilitando a potencialização do uso do gás natural como combustível, fornecendo um possível ganho de desempenho em relação ao motor original e uma maior economia em energia com relação ao fornecimento da rede elétrica e à geração a diesel.

Nesse trabalho são descritas todas as alterações necessárias para o funcionamento do motor em ciclo Otto, visando desempenho e economia de combustível, assim como manter a vida útil do motor próxima à original. Essas modificações abrangem: alteração da taxa de compressão para uma adequada ao uso do gás natural; adoção de sistema de ignição elétrica; alteração do sistema de admissão e escape; adoção de um novo sistema de alimentação para gás natural; e ajustes para melhoria do sistema de arrefecimento.

O projeto é realizado na prática em conjunto com a Auto Mecânica Arapongas, empresa especializada no reparo de motores e equipamentos de grande porte, proprietária do motor Scania DSI 11 e interessada na geração de energia a gás natural em suas instalações.

### 2. O Gás Natural

O gás natural é um combustível formado por uma mistura de hidrocarbonetos leves que, à temperatura ambiente e pressão de uma atmosfera, permanece no estado gasoso. O hidrocarboneto principal na composição do gás é o metano (CH<sub>4</sub>), responsável por quase 90% de sua formação. O etano, o propano, e outros gases como o nitrogênio (N<sub>2</sub>), o dióxido de carbono (CO<sub>2</sub>), o sulfeto de hidrogênio (H<sub>2</sub>S) e o vapor d'água (H<sub>2</sub>O), são responsáveis pelo restante de sua composição.

Combustíveis líquidos, como a gasolina e o diesel, são compostos por hidrocarbonetos mais pesados. A gasolina apresenta em sua composição, moléculas de 5 a 12 átomos de carbono. O diesel apresenta moléculas com 12 a 18 átomos de carbono.

Na tabela 1 estão descritas as propriedades dos principais combustíveis utilizados em motores de combustão interna.

Tabela 1 – Propriedades dos Combustíveis

FUEL CHARACTERISTICS OF VARIOUS FUELS					
	METHANE	PROPANE	LNG	GASOLINE	DIESEL
FORMULA	CH <sub>4</sub>	C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	CH <sub>4</sub>	C <sub>8</sub> H <sub>16</sub>	C <sub>12</sub> H <sub>26</sub>
RESEARCH OCTANE	130	112	130	91-98	
MOTOR OCTANE #	130	97	130	83-90	
CETANE #	-10	5-10	-10	8-14	40-65
DENSITY OF LIQ. FUEL (lbs./ft. <sup>3</sup> ) / (kg/L)		31.78 / .509	26.28 / .421	46.57 / .746	50.44 / .808
DENSITY OF GAS (lbs./ft. <sup>3</sup> ) / (kg/m <sup>3</sup> )	.041 / .6512	.032 / .508		.275 / 4.4	
BOILING POINT (°F) / (°C)	-259 / -162	-44 / -42	-259 / -162	(81-464) / (27-240)	
LOWER HEATING VALUE (BTU/lb.) / (kJ/kg)	21,463 / 49,913	19,882 / 46,238	21,463 / 49,913	18,344 / 42,661	18,670 / 43,419
ENERGY CONTENT (VOLUME) (BTU/ft. <sup>3</sup> ) / (kJ/L)	213,300 / 7875	637,500 / 25,535	569,200 / 21,013	862,100 / 31,825	950,400 / 35,082
ENERGY (wrt) GASOLINE	25%	74%	66%	100%	110%
ENERGY (wrt) DIESEL	22%	67%	60%	91%	100%
STOICHIOMETRIC A/F RATIO (mass)	17.30	15.70	17.30	14.70	15.00
HEAT OF VAPORIZATION (BTU/lb.) / (kJ/kg)	218 / 507	182 / 423	218 / 507	153 / 355	123 / 286
ENERGY OF STOICH. MIXTURE (BTU/ft. <sup>3</sup> ) / (kJ/L)	97.0 / 3.58	103 / 3.79	97.0 / 3.58	106 / 3.91	
AUTO IGNITION TEMP. (°F) / (°C)	1004 / 540	842 / 450	842 / 450	428 / 220	437 / 225
PEAK FLAME TEMP. (°F) / (°C)	3254 / 1790	3614 / 1990	3254 / 1790	3591 / 1977	3729 / 2054
FLAMMABILITY LIMITS (Vol%)	5.3-15	2.1-10.4		1.4-7.6	
DETONATION LIMITS (Vol %)	6.3-13.5	3.4-35	6.3-13.5	1.1-3.3	
FLAME SPREAD RATE (ft./s) / (m/s)				(13.1-19.7) / (4-6)	
MAX. BURNING VEL. IN STP AIR (ft./s) / (cm/s)	(1.21-1.48) / (37-45)	(1.41-1.71) / (43-52)	(1.21-1.48) / (37-45)	(1.21-1.41) / (37-43)	
SPECIFIC GRAVITY AT STP (lbs./ft. <sup>3</sup> ) / (kg/m <sup>3</sup> )	.034 / .55	.095 / 1.52	.034 / .55	(.125-.250) / (2-4)	(.250-.375) / (4-6)
QUENCHING GAP IN STP AIR (in.) / (mm)	.080 / 2.03	.070 / 1.78	.080 / 2.03	.078 / 2	
FLAME VISIBILITY, RELATIVE	0.60	0.60	0.60	1.00	1.00
FLASH POINT (°F) / (°C)			-306 / -188		125 / 52

Fonte: Catálogo Woodward

Tabela 2 – Composição do Gás Natural

Natural Gas		
Component		Volume (%)
Methane	CH <sub>4</sub>	92.00%
Ethane	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	3.60%
Propane	C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	1.00%
Butanes	C <sub>4</sub> H <sub>10</sub>	0.30%
Pentanes	C <sub>5</sub> H <sub>12</sub>	0.10%
Hexanes	C <sub>6</sub> H <sub>14</sub>	0.10%
Carbon Dioxide	CO <sub>2</sub>	1.00%
Nitrogen	N <sub>2</sub>	1.60%
	Total	100.00%

Fonte: Catálogo Woodward [14].

## 2.1 - Características do Gás Natural

### 2.1.1 - Mistura Ar-Combustível

O gás natural, por ser um combustível em estado gasoso, forma com o ar uma mistura mais homogênea. Essa característica traz benefícios em relação à queima, que se dá de forma mais completa. Aliado a isso, o motor a gás não apresenta problemas de partida a frio pois não há necessidade de vaporização do combustível.

### 2.1.2 - Combustão

O gás natural apresenta algumas peculiaridades em relação à sua queima. O metano, componente principal do combustível, possui a maior relação hidrogênio/carbono dentre os hidrocarbonetos. Essa relação é de quatro átomos de hidrogênio para um átomo de carbono, que tem como principal consequência a menor emissão de poluentes pesados devido à menor quantidade de carbono presente no combustível. Esse fator representa reduções consideráveis nas emissões de monóxido de carbono (CO) e de hidrocarbonetos (HC).

Devido também a essa característica, o motor a gás natural apresenta uma menor formação de depósitos em seu interior (carbonização), resultando numa maior duração do óleo lubrificante, e maior durabilidade de componentes internos (tais como velas, anéis, camisas, etc.) em relação aos motores movidos a Diesel.

### 2.1.3 - Resistência à Detonação

Segundo a portaria N° 104 de 08/07/2002 da Agência Nacional de Petróleo, que especifica as propriedades do gás natural a ser comercializado em todo o território nacional, o número de metano indica a capacidade anti-detonante do gás natural, sendo seus limites passíveis de comparação com a octanagem da gasolina.

O poder anti-detonante de combustíveis líquidos (como a gasolina) é medido através do número de octano (RON ou MON<sup>1</sup>). Os valores típicos do número de octano do gás natural encontram-se entre 115 e 130, sendo que o metano puro apresenta 140. Esse valor é bem elevado se comparado ao índice de octanas de outros combustíveis utilizados nos motores ciclo Otto, como o álcool e a gasolina (tabela 1). Esse fator permite a utilização de elevadas taxas de compressão num motor a gás natural, sem acarretar problemas em seu funcionamento. Isso significa que, de modo geral, a utilização do gás natural permite atingir um rendimento térmico maior nos motores ciclo Otto.

### 2.1.4 - Emissões

Tabela 3 – Balanço dos Efeitos à Saúde e ao Meio-Ambiente da Utilização dos Combustíveis<sup>2</sup>.

Direct toxic and nuisance effects	Gasoline	LPG	CNG	Diesel
CO	o	o/+	++	+
NO <sub>x</sub>	o	o	+	--
particulates	o/+	+	o	-/-
lower aldehydes	o	o	+/++	-/-
<b>Long-term toxic effects</b>				
PAH	o	+	+	-
BTX	-	o	o	o
lower aldehydes	o	o	+	-
summary	-/o	o/+	+	-
<b>Regional and global effects</b>				
summer smog	-	o	+	--
winter smog	o	o/+	o	-
acidification	o	o/+	o/+	-
GWP	-/o	o	o/+	-/o
summary	-/o	o/+	o/+	-
<b>Summary of effects</b>				
Dir. Toxic	o	o/+	+/++	-/-
LT Toxic	-/o	o/+	+	-
Reg./global	-/o	o/+	o/+	-

(++, + advantages, 0 average, -, -- disadvantages )

Fonte: IANGV [7]

<sup>1</sup> RON – Research Octane Number; MON – Motor Octane Number.

<sup>2</sup> Classificação dos combustíveis: (++,+) uso vantajoso; (o) médio; (-,--) uso desvantajoso

Na tabela 3 tem-se um comparativo dos efeitos nocivos da utilização de diferentes combustíveis, seja nos danos diretos à saúde humana ou ao ambiente, poluição em longo prazo e efeitos regionais e globais. Numa comparação direta entre o gás natural (CNG) e o diesel, vemos que o primeiro apresenta grandes vantagens principalmente quando se trata da poluição direta do ambiente. O diesel por sua vez apresenta desvantagens em todos os quesitos quando comparado aos outros combustíveis.

Motores a ciclo Otto, movidos a álcool ou gasolina, emitem maiores quantidades de monóxido de carbono (CO), hidrocarbonetos (HC) e óxidos de nitrogênio (NOx). Os motores ciclo Diesel emitem maiores quantidades de óxidos de enxofre (SOx) e material particulado (fuligem). Em ambos os casos a utilização do gás natural torna-se vantajosa.

A composição química dos combustíveis determina os tipos de gases que são emitidos de sua combustão. Conforme visto anteriormente, o gás natural é um combustível menos agressivo ao meio-ambiente que os combustíveis líquidos, por conter uma menor quantidade de carbono em sua composição. Isso representa que, de um modo geral, menores emissões de CO e HC são produzidas na combustão do gás, além de retirar dos gases de exaustão componentes cíclicos e pesados de cadeia longa, considerados cancerígenos, o que o torna um combustível menos maléfico à saúde. Além disso, o hidrocarboneto não queimado na utilização do gás natural é basicamente o metano, que não é considerado tóxico e nem poluente.

A conversão de motores Diesel para gás natural praticamente elimina a emissão de óxido de enxofre, aldeídos e material particulado na atmosfera. Este por sua vez é considerado um dos maiores responsáveis pela poluição do ar nos grandes centros urbanos.

Outro fator que torna o gás natural teoricamente mais limpo é a redução das emissões poluentes liberadas pelos respiros do motor ou pelo derramamento do combustível líquido, ocasionando futura vaporização do mesmo no ar ambiente.

Devido a uma maior quantidade de calor liberada na queima do combustível (poder calorífico maior), ocorre o aumento da temperatura de funcionamento da câmara de combustão dos motores movidos a gás natural. Quanto maior for a temperatura na câmara, maior será a emissão de NOx, pois o nitrogênio presente no ar reage com o oxigênio nessas condições (oxidação). Esse fator pode ser controlado limitando-se a temperatura na câmara de combustão, seja utilizando menores taxas de compressão, uma mistura ar/combustível mais pobre ( $\lambda \geq 1,5$ )<sup>3</sup>, ou melhorando o sistema de refrigeração do motor. Ainda assim, para um controle satisfatório de emissões, é fundamental a instalação de um catalisador de três vias.

O conjunto dessas características torna o gás natural ideal para a alimentação de motores utilizados nos grandes centros, como os que equipam as frotas de ônibus, permitindo uma melhora na qualidade do ar das grandes cidades, e conseqüentemente um aumento na qualidade de vida e preservação da saúde da população.

### 2.1.5 - Segurança

A utilização do gás natural como combustível é segura, e não apresenta risco de acidentes quando manuseado corretamente. Dentre as características que tornam o gás um combustível seguro, destaca-se:

- 1 – Limite de Inflamabilidade: a faixa de mistura ar-gás para ocorrer ignição é mais elevada que a de outros combustíveis (5,3 a 15% em volume de gás).
- 2 – Temperatura de auto-ignição: a temperatura de ignição do metano é bem superior à dos combustíveis líquidos (450° C).
- 3 – Densidade: o gás natural é mais leve que o ar (densidade de 0,65 kg/m<sup>3</sup>), sendo rapidamente dispersado em caso de vazamento. Os combustíveis líquidos, por sua vez, depositam-se no chão, formando poças que podem facilmente se inflamar.

Além desses fatores, o gás natural não é tóxico. Como medida de segurança, o gás é odorizado de forma que uma concentração de 0,5% em mistura com o ar, seja detectada. Essa concentração se encontra em níveis bem inferiores aos mínimos necessários para haver combustão ou para comprometer a saúde humana.

## 2.2 - Aspectos Econômicos

No Brasil, as reservas provadas de gás natural são da ordem de 320 bilhões de metros cúbicos. Conforme podemos notar no gráfico da figura 1, a disponibilidade de gás natural no país vem crescendo consideravelmente nos últimos anos, demonstrando que existe um grande potencial de crescimento da utilização do gás como combustível alternativo no setor de transporte, e no setor energético. Este combustível já está disponível em postos de abastecimento em diversos municípios, e será disponibilizado em outros em médio prazo.

<sup>3</sup>  $\lambda$  – razão entre a relação ar/combustível do motor e a relação estequiométrica.

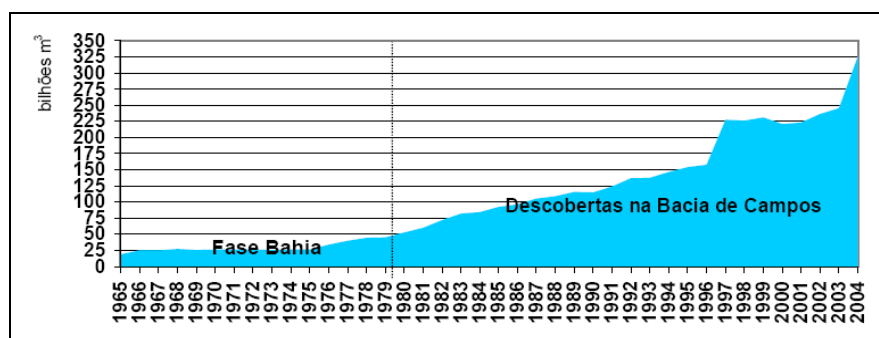


Figura 1 – Reservas Provadas de Gás Natural 1965-2004.

Fonte: ANP.

Segundo Ribeiro, 2001, o Brasil possui um grande déficit no que diz respeito à oferta de óleo diesel no país. São importados anualmente cerca de 5,28 bilhões de litros de óleo diesel, 15% do consumo total do país. Este valor não contabiliza ainda a quantidade de petróleo importado, do qual é retirada grande parte do óleo diesel consumido, ou seja, mais cerca de 14,15 bilhões de litros deste combustível. Juntando-se o óleo diesel importado mais o refinado do petróleo importado atualmente, tem-se que aproximadamente 54,7% de todo óleo diesel consumido no Brasil é importado, ou diretamente como derivado, ou indiretamente como petróleo bruto.

Com isso, tecnologias que reduzam o consumo de óleo diesel em qualquer percentual são extremamente importantes do ponto de vista macroeconômico do país (reduzindo as importações e melhorando a situação da balança comercial brasileira). Outro aspecto importante, que deve ser levado em conta, é que a troca do óleo diesel pelo gás natural reduz a dependência externa com relação ao derivado importado. A redução do consumo de óleo diesel levaria o país a um maior equilíbrio na sua matriz energética, onde a troca pelo gás natural é uma boa opção e, ainda, aumentaria o consumo deste energético na matriz brasileira. Como foi mostrado anteriormente, o gás natural é um combustível disponível no país e as reservas são significativas, com grande possibilidade de novas descobertas.

A vantagem econômica da utilização do gás natural em relação ao óleo diesel depende do preço relativo dos combustíveis. Atualmente, o gás natural é mais barato que os derivados de petróleo e o seu preço está menos suscetível à flutuações, pois não está diretamente ligado ao preço do barril do petróleo. Outro aspecto econômico importante é o alto custo do processamento para a retirada de enxofre do óleo diesel, que aumenta as vantagens econômicas do gás.

Na tabela 4 pode-se avaliar um estudo feito em uma frota de ônibus da cidade de São Paulo, em 2001, onde se calcula a economia gerada pela substituição completa do óleo diesel pelo gás natural como combustível da frota.

Tabela 4 – Economia na Utilização do GNV em Frotas de Ônibus.

	Frota a Diesel	Frota a Gás Natural
Quantidade de ônibus (A)	10.156	10.156
Quilometragem dia (B)	200 km/dia	200 km/dia
Consumo médio (C)	1,8 km/l	1,7 km/m³
Custo combustível (D)	R\$ 0,819/l	R\$ 0,749/m³
Consumo diário de combustível da frota (E)=(A*B)/(C)	1.128.444,45 l/dia	1.194.823,53 m³/dia
Consumo anual de combustível da frota (F)=(365 dias/ano)*(E)	411,88 milhões de l/ano	436,11 milhões de m³/ano
Gasto anual com o combustível (G)=(F)*(D)	R\$ 337,33 milhões/ano	R\$ 326,64 milhões/ano
Economia anual pela troca de diesel por gás natural (Gdiesel)- (Ggás natural)	R\$ 10,69 milhões/ano	

Fonte: Ribeiro .

Países como Estados Unidos, Austrália, Canadá e diversas nações européias utilizam alguns instrumentos econômicos para aumentar a vantagem do GNV em relação ao óleo diesel. Como por exemplo, uma menor taxaço do gás natural. É justo uma taxa superior para um combustível mais poluente como o diesel, que causa maiores problemas

ambientais e à saúde humana e, nesta lógica, aplicar taxas inferiores ao gás natural devido às suas características de queima limpa e de menores impactos ambientais, incentivando a utilização do mesmo. No Brasil, o imposto de licenciamento anual de veículos é reduzido para automóveis convertidos ao gás natural, e há grande interesse do governo federal em incentivar a popularização do uso do gás como combustível.

### 3. Conversão de Motores Diesel à Gás Natural

Existem dois tipos básicos de conversão de motores diesel para a utilização do gás natural: a ciclo dual e a dedicada (ottolização).

#### 3.1. Conversão Ciclo Dual (*Dual Fuel*)

A conversão ciclo dual é uma tecnologia que utiliza o óleo diesel e o gás natural em proporções variáveis. Em geral, o gás natural substitui o diesel na faixa de 30 a 80%. O motor passa a queimar gás natural e o diesel continua a ser injetado na câmara apenas para promover o início da combustão da mistura ar-combustível. Ou seja, ambos os combustíveis são queimados simultaneamente.

A conversão dual apresenta a vantagem de não necessitar troca de componentes do motor original, o que confere maior flexibilidade e menor custo de investimento.

Em termos de economia de combustível, o motor *dual fuel* só é vantajoso em baixas cargas de funcionamento, isto é, quando não é demandado nem muito torque, nem muita potência. Quando o motor necessita de cargas mais elevadas de trabalho, torna-se imprescindível a utilização de um maior percentual de óleo diesel na queima.

Uma das grandes desvantagens dessa tecnologia está na alta emissão de poluentes. Por não haver a substituição de componentes do motor, como o eixo comando de válvulas, o motor acaba funcionando com um diagrama de válvulas inadequado para uso de gás natural. Os motores diesel apresentam um grande cruzamento de válvulas (*overlap*), pois admitem apenas ar, sendo adotado para resfriar a câmara de combustão e auxiliar a saída dos gases de escape, melhorando a eficiência volumétrica do motor. Essa característica torna-se indesejada em motores alimentados com gás natural, pois esses passam a admitir mistura ar-combustível, e não apenas ar. Isso faz com que uma grande quantidade de mistura não queimada seja jogada para fora da câmara, indo queimar-se no cano de escapamento. Essa queima incompleta gera grande emissão de monóxido de carbono e hidrocarbonetos pelo motor ciclo dual.

#### 3.2. Conversão Dedicada (Ottolização)

A conversão dedicada trabalha com a total substituição do óleo diesel pelo gás natural. Com isso, o motor deixa de ser ciclo Diesel, para ser transformado em ciclo Otto, daí o nome de ottolização.

Essa transformação demanda a troca e/ou usinagem das peças originais do motor, como o eixo comando de válvulas, pistões e cabeçotes, sendo esse processo específico para cada tipo de motor. Essa mudança se deve ao fato do motor a gás natural trabalhar a uma taxa de compressão mais baixa, além de necessitar da instalação de um sistema de ignição elétrica (incluindo velas), onde o motor deixa de ter ignição por compressão (ICO) para ter ignição por centelha elétrica (ICE).

Por ser uma conversão mais específica e detalhada, permitindo a potencialização do funcionamento do motor com o gás natural, geralmente consegue-se desempenho próximo ao original do motor, além de apresentar uma considerável economia de combustível, em relação à tecnologia dual, pois torna o sistema totalmente independente do óleo diesel.

Apesar de representar um custo de investimento mais elevado que a conversão dual, a ottolização pode ser totalmente reversível, caso o proprietário do motor não se desfça das peças originais. Esse fator torna-se interessante para o caso de revenda para uma localidade que não tenha fornecimento de gás natural.

Os motores ottolizados também são menos poluentes que os motores ciclo dual, apresentando menores emissões de monóxido de carbono, já que na transformação dos mesmos ocorre a troca do eixo comando de válvulas, eliminando assim o problema causado pelo grande cruzamento de válvulas original dos motores diesel. Além disso, os motores funcionando a 100% de gás natural permitem a instalação de catalisadores específicos para motores Otto, que reduzem consideravelmente as emissões de poluentes.

#### 3.3. A Ottolização do Motor Scania DS11

Para o projeto de ottolização, foi selecionado o motor Scania DSI 11 de 11 litros, 6 cilindros, estacionário, para utilização na geração de energia elétrica.

Esse motor pertence à mesma família da Scania que compreende os motores:

- D11: a versão aspirada
- DS 11: versão turbinada
- DSI 11: versão turbinada com intercooler

Os motores têm a mesma cilindrada, e compartilham a maior parte das peças, diferenciando apenas a presença do turbo-compressor e do intercooler. A versão turbinada tem uma taxa de compressão de 15:1, enquanto que a versão aspirada apresenta taxa de 16:1, devido ao uso de pistões diferentes.

O modelo DSI 11 foi selecionado por apresentar uma potência superior ao aspirado, o que é desejado na geração de energia elétrica industrial. Outra vantagem é que a presença do intercooler no sistema de admissão faz com que a temperatura da mistura ar/combustível admitida seja reduzida de maneira considerável. Esse fator resulta, além do ganho de potência, numa redução na temperatura de funcionamento do motor, que é recomendável em um motor a gás natural, devido ao seu maior poder calorífico em relação ao óleo diesel.

Nesse projeto, o motor passará a trabalhar 100% a gás natural, sendo alimentado diretamente pelo gás de rua fornecido pela companhia estadual distribuidora de gás (CEG). Com isso, o sistema passa a ser independente do abastecimento periódico de combustível, seja ele o óleo diesel, ou o próprio gás natural estocado nos tradicionais cilindros de alta pressão. O sistema de alimentação passa então a dispensar a aquisição de cilindros de alta pressão, além de válvulas de abastecimento, e válvulas redutoras de alta pressão, tornando-se uma conversão dedicada de menor custo.

Para isso, são necessárias as seguintes alterações:

1. Usinagem de cabeçotes e pistões.
2. Adoção de sistema de ignição elétrica: bobinas, controlador de ignição, disco de fase, cabos de vela, velas de ignição e sensor de ponto.
3. Retirada do sistema de alimentação original: bicos injetores e bomba injetora.
4. Usinagem do eixo comando de válvulas.
5. Adoção de um novo sistema de alimentação de gás natural: misturador, válvula redutora de pressão, controlador de mistura ar-combustível, sonda lambda.
6. Adoção de um novo sistema de controle de velocidade: instalação de um novo controlador de velocidade, próprio para o gás natural.

Na tabela 5 encontram-se as especificações gerais do motor DSI 11 a ser otimizadas. Na figura 2, encontra-se a faixa de pressão do turbo, de acordo com a rotação do motor. Como o motor é para uso estacionário (operação contínua), é necessário se ater aos valores apresentados à velocidade de 1800rpm (pressão máxima do turbo a 0,7 bar, aproximadamente).

Tabela 5 - Especificações do Motor Scania DSI 11

Motor	Scania DSI 11
- Número de Cilindros	6
- Cilindrada	11,02litros
- Diâmetro do cilindro	127mm
- Curso do pistão	145mm
- Taxa de compressão	15:1
- Potência máxima à operação intermitente	247 kW (331hp) @ 2200 rpm
- Potência máxima à operação contínua	231 kW (310hp) @ 1800 rpm
- Torque máximo à operação intermitente	1130 N.m (115 kgf.m) @ 1300 rpm
- Torque máximo à operação contínua	1020 N.m (104 kgf.m) @ 1300 rpm
- Consumo específico de combustível	206 g/kWh @ 1800 rpm
- Diâmetro da válvula de admissão	54mm
- Diâmetro da válvula de escape	45mm
- Tempo de válvulas :	
Abertura de admissão	30° antes do PMS
Fechamento de admissão	26° depois do PMI
Abertura de escape	64° antes do PMI
Fechamento de escape	28° depois do PMS

Fonte: Catálogo Scania [15].

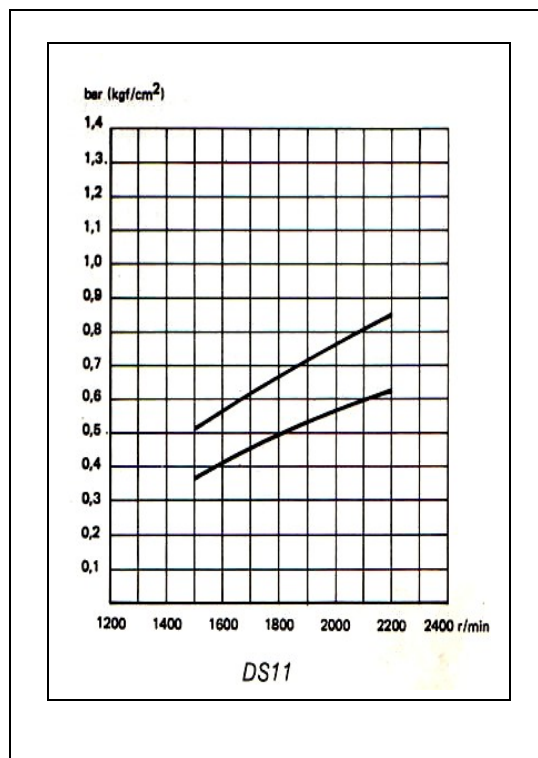


Figura 2 – Faixa de pressão do turbo do motor.

Fonte: Catálogo Scania [15].

#### 4. Definindo a Mistura Ar/Combustível

A relação ar/combustível estequiométrica é aquela na qual a queima do combustível se dá por completo, não havendo excesso de ar, nem de combustível. Essa relação pode ser entre os volumes (volumétrica) ou entre as massas (mássica). Os valores são distintos devido à diferença entre as densidades do ar e do gás natural.

Para o gás natural, temos os seguintes valores:

- A/C estequiométrica volumétrica = 9,5
- A/C estequiométrica mássica = 17,3

A variável  $\lambda$  representa a razão entre a relação ar/combustível do motor e a relação estequiométrica do combustível. Na tabela 6, temos que, para mistura pobre, onde há excesso de ar,  $\lambda > 1$ . Para mistura rica, há excesso de combustível na queima, e  $\lambda < 1$ .

Tabela 6 – Misturas Ar/Combustível

Mistura	$\lambda$
Rica	$< 1$
Pobre	$> 1$
Estequiométrica	$= 1$

Os motores a diesel convertidos ao uso dedicado do gás natural, podem trabalhar com mistura pobre (*Lean Burn*) ou com mistura estequiométrica, cujas características são descritas a seguir.

##### 4.1. Motores de Mistura Pobre - *Lean Burn*



Motores *Lean Burn* são aqueles que utilizam mistura ar/combustível pobre, ou seja, funcionam com excesso de ar ( $\lambda \geq 1,5$ ). Esse tipo de configuração visa basicamente economia de combustível em detrimento do desempenho.

Conforme já discutido no capítulo 2, os motores movidos a gás apresentam aumento na temperatura da câmara de combustão devido a maior quantidade de calor liberada pela queima do combustível. O aumento da temperatura provoca a oxidação do nitrogênio do ar durante a combustão, o que resulta num aumento nas emissões de óxidos de nitrogênio (NOx).

Ao funcionarem com excesso de ar, os motores de mistura pobre apresentam menores temperaturas na câmara de combustão, pois queimam uma menor quantidade de combustível para um mesmo volume de mistura admitida, liberando menos calor. Com isso, apresentam um controle maior das emissões de NOx, como mostra a figura 3.

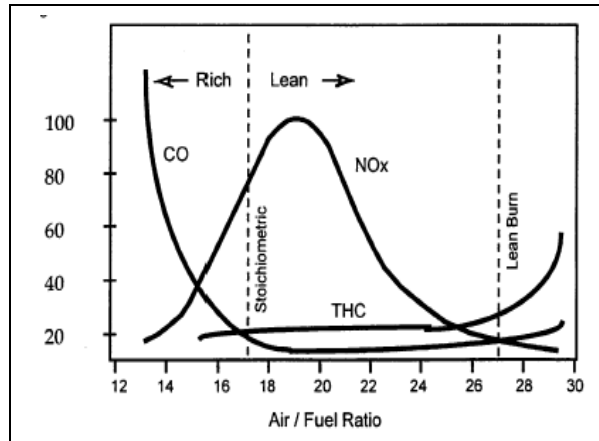


Figura 3 – Relação entre a mistura ar/combustível e as emissões de poluentes para motores a gás natural.

Fonte: IANGV.

Além desse controle da temperatura, esses motores apresentam a vantagem de terem baixo consumo de combustível, devido à mistura ar/combustível pobre.

Em contrapartida, esse tipo de configuração apresenta elevadas emissões de metano, THC na figura 3. O fato de o motor funcionar com mistura pobre impossibilita a utilização de alguns tipos de catalisadores, que são projetados para trabalharem com misturas estequiométricas. Esse fato compromete a utilização desses motores atualmente devido às rigorosas normas internacionais que regulamentam as emissões de poluentes.

Além disso, por queimarem menos combustível, esses motores apresentam desempenho consideravelmente menor que o apresentado pelo motor diesel original. Por isso, esse tipo de configuração é mais indicado para motores turbinados, onde a perda de desempenho não é tão considerável.

#### 4.2. Motores Estequiométricos

Esse tipo de motor utiliza mistura ar/combustível estequiométrica ( $\lambda=1$ ), sem excesso de ar ou de combustível. Por queimarem uma maior quantidade de combustível, para um mesmo volume de mistura admitida, o motor regulado à mistura estequiométrica produz mais potência que um motor similar de mistura pobre.

Como a queima nesse caso se dá por completo, esse motor apresenta baixas emissões de hidrocarbonetos (HC) e de monóxido de carbono (CO). A emissão crítica nesse caso é a de óxidos de nitrogênio (NOx)(conforme a figura 3), devido a um funcionamento mais quente desses motores, por queimarem maior massa de combustível, em especial os alimentados a gás natural, pelo seu maior poder calorífico. Todavia, a emissão desse poluente pode ser reduzida a valores próximos zero com a instalação de um catalisador de três vias.

- Catalisador de Três Vias (*Three Way Catalytic*):

O catalisador de três vias é assim denominado por ser responsável pela redução nas emissões dos três principais agentes poluidores em motores ciclo Otto: o monóxido de carbono (CO), os óxidos de nitrogênio (NOx) e os hidrocarbonetos (HC). Devido a sua alta eficiência no controle de emissões, esse tipo de catalisador equipa todos os automóveis à gasolina produzidos atualmente.

No caso de motores alimentados a gás natural, o metano, junto com outros hidrocarbonetos, forma um grupo de hidrocarbonetos totais (THC). Tanto as emissões de THC como de monóxido de carbono provem da queima incompleta do combustível usado, seja na câmara de combustão por uma mistura imprópria de ar/combustível ou pelo fato de que uma parte da mistura, próxima às paredes da câmara, não queima.

Um catalisador de três vias converte a maioria dos hidrocarbonetos e o monóxido de carbono em dióxido de carbono e água, ao mesmo tempo os óxidos de nitrogênio são catalisados pelo nitrogênio.

Tabela 7 - Comparativo das Emissões (em g/kWh) dos Ônibus Movidos a Gás Natural e a Óleo Diesel no Brasil<sup>4</sup>.

ÔNIBUS	CO	HC	NO <sub>x</sub>
<b>Modelos em uso em 1993</b>			
Diesel (aspirado)	3,81	0,80	11,07
GNV (aspirado)	10,75	2,13	20,7
GNV (com catalisador)	1,18	1,50	0,99
<b>Modelos desenvolvidos e em uso a partir de 1993</b>			
Diesel (turbo)	4,5	1,1	8,0
GNV (turbo)	7,11	3,65	2,08
GNV (com catalisador)	0,40	0,45	2,08

Fonte: Ribeiro, 2001.

Na tabela 7 pode-se notar a grande redução nas emissões de poluentes com a instalação do catalisador em ônibus movidos a gás natural, principalmente nos motores turbinados. O motor torna-se bem menos poluente que o similar a diesel, e o original a gás, sem catalisador.

Conforme figura 4, esse tipo de catalisador é projetado para trabalhar com gases de combustão de misturas próximas à estequiométrica (faixa pontilhada - *Stoich*). Quanto mais distante for o lambda do valor 1, menor será a eficiência do catalisador, e maior será a carga de metal na construção do mesmo. Esse fato inviabiliza a aplicação em motores de mistura pobre (*Lean Burn*).

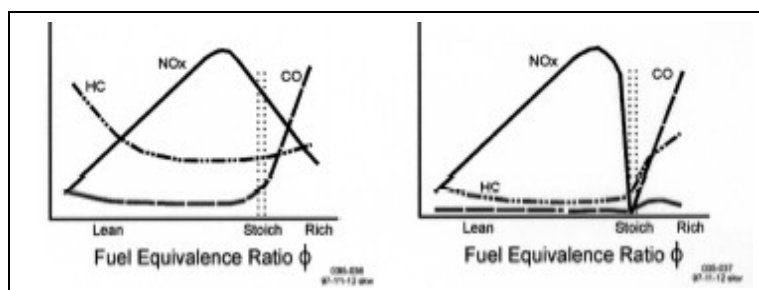


Figura 4 – Emissões sem o uso de catalisador e com o uso de catalisador.

Fonte: IANGV.

#### 4.3. A Mistura Ar/Combustível do Motor Scania DSI 11 Ottolizado

Devido a um melhor desempenho apresentado pelos motores estequiométricos, desejado na geração de energia, e por apresentarem a possibilidade de futura utilização de um catalisador de três vias, permitindo que o motor ottolizado cumpra com as normas de emissões vigentes, foi determinada a utilização de mistura ar/combustível estequiométrica para o motor Scania DSI 11 a gás natural.

#### 5. A Taxa de Compressão para o Motor a Gás Natural

A taxa de compressão de um motor é a relação entre o volume do cilindro, quando o pistão se encontra no ponto morto inferior (V1), e o volume do mesmo quando o pistão se encontra no ponto morto superior (V2).

<sup>4</sup> Limite de emissões estabelecido pela norma Euro II: CO – 4,0 g/kWh; HC – 1,1 g/kWh; NOx – 7,0 g/kWh. (Ribeiro, 2001)

Quanto maior for a taxa de compressão, maior será o rendimento térmico do motor, conforme figura 5, para diferentes valores de  $\gamma$ <sup>5</sup>.

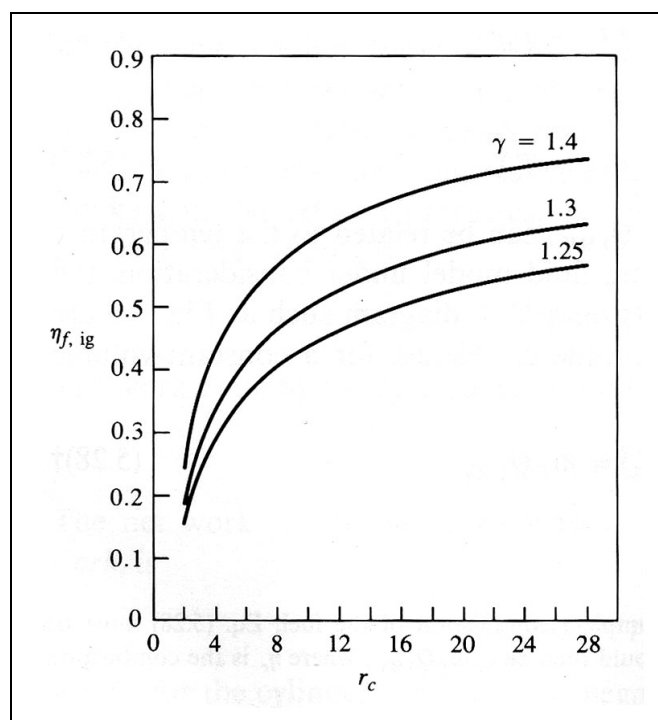


Figura 5 – Gráfico Taxa de Compressão ( $r_c$ ) x Rendimento Térmico ( $\eta_{f,ig}$ ), para motores ciclo Otto.

Fonte: Heywood

Os motores Diesel, por terem sua ignição iniciada pela compressão do motor, costumam ter taxas elevadas (de 15:1 a 22:1), e por isso, maiores rendimentos.

Nos motores ciclo Otto, uma mistura ar/combustível (e não apenas o ar) é comprimida no cilindro. Essa mistura então pode entrar em combustão, fora do ponto determinado, sem o acionamento da centelha elétrica, devido às altas pressões e temperaturas atingidas na câmara de combustão. Esse fenômeno pode comprometer o desempenho e a durabilidade do motor. Por essa razão, esses motores têm taxas de compressão mais baixas, limitadas principalmente pela capacidade anti-detonante do combustível a ser comprimido.

Em alguns casos de motores ottolizados, a temperatura do motor também é um fator limitante da taxa de compressão. Como o gás natural tem seu poder calorífico mais elevado que o do óleo diesel, uma maior quantidade de energia é liberada para uma mesma massa de combustível. Conseqüentemente, uma maior quantidade de calor é transmitida para as peças internas do motor e para o líquido de arrefecimento, podendo, em alguns casos, ocasionar desgaste e quebra do equipamento. Assim, alguns fabricantes optam por utilizar taxas de compressão mais baixas, para diminuir a temperatura da mistura ar-combustível antes da combustão, fazendo o motor trabalhar mais frio.

Todavia, segundo Heywood, essa queda no fluxo de calor para o líquido refrigerante, e conseqüente diminuição na temperatura do motor, devido ao uso de menores taxas de compressão, é muito modesta. Isso porque, nesses motores, o gás é menos comprimido durante a fase de compressão, mas também se expande menos, durante a fase de expansão. Isso resulta numa queda pequena da temperatura média do ciclo.

Assim, acaba-se perdendo muita potência e rendimento do motor, em troca de um funcionamento a uma temperatura pouco menor. Por essa razão, opta-se por utilizar no motor Scania DSI 11 a máxima taxa de compressão admissível pelo poder anti-detonante do gás natural, deixando que a diminuição da temperatura do motor seja efetuada por mudanças no sistema de arrefecimento (capítulo 9), caso essa elevação de temperatura de funcionamento seja realmente verificada na prática.

Utilizando uma taxa de compressão mais elevada pode-se aproveitar ao máximo o poder calorífico do gás natural, devido ao maior rendimento térmico do motor. Motores veiculares convertidos a gás natural apresentam queda no desempenho justamente por não aproveitarem por completo a capacidade energética do gás, já que o mesmo deve funcionar à taxa de compressão original do carro à gasolina, que é baixa. Como nesse projeto de ottolização, o motor

<sup>5</sup>  $\gamma$  – Razão entre calor específico a pressão constante ( $C_p$ ) e calor específico a volume constante ( $C_v$ ). Para o ar, a temperatura ambiente, a razão é de 1,4.

funcionará exclusivamente com gás natural, podemos otimizar o seu desempenho para esse combustível especificamente.

Soluções que busquem um aumento do rendimento térmico do motor se refletem em baixo consumo de combustível e conseqüentemente redução na emissão de poluentes para a atmosfera.

## 5.1. Cálculo da Alteração na Taxa de Compressão

### 5.1.1. Determinação da Taxa de Compressão de Trabalho

Quanto maior for a taxa de compressão utilizada no motor, maior será a temperatura e a pressão no interior da câmara de combustão. Esse fato exige que o combustível utilizado no motor tenha uma maior resistência à detonação, suportando as condições de funcionamento e iniciando sua queima apenas quando ocorrer a centelha da vela de ignição.

Conforme visto no capítulo 2, o poder anti-detonante dos combustíveis pode ser medido através do número de octano (método RON ou MON). No caso do gás natural, essa característica é avaliada através do número de metano. Esse valor equivale à porcentagem de metano na composição do gás, tendo valor 100 para o metano puro. Uma relação entre a octanagem e o número de metano do gás natural pode ser avaliada através da equação 1.

$$NO = 0,679 \times NM + 72,32 \quad (1)$$

Onde: NO – Número de octano (MON).  
NM – Número de metano.

Os valores típicos do número de octano do gás natural encontram-se entre 115 e 130<sup>6</sup>, sendo que o metano puro apresenta 140. Índice que pode ser confirmado utilizando a equação 1. De acordo com a tabela 1, o número de octano é de 130 para o gás natural, em ambos os métodos, RON e MON.

Esse fator permite a utilização de elevadas taxas de compressão num motor a gás natural sem acarretar problemas em seu funcionamento, tornando esse combustível o mais eficiente dentre aqueles utilizados nos motores ciclo Otto.

No gráfico da figura 6, podemos notar a influência da taxa de compressão no requerimento da octanagem (índice mínimo), em motores Otto.

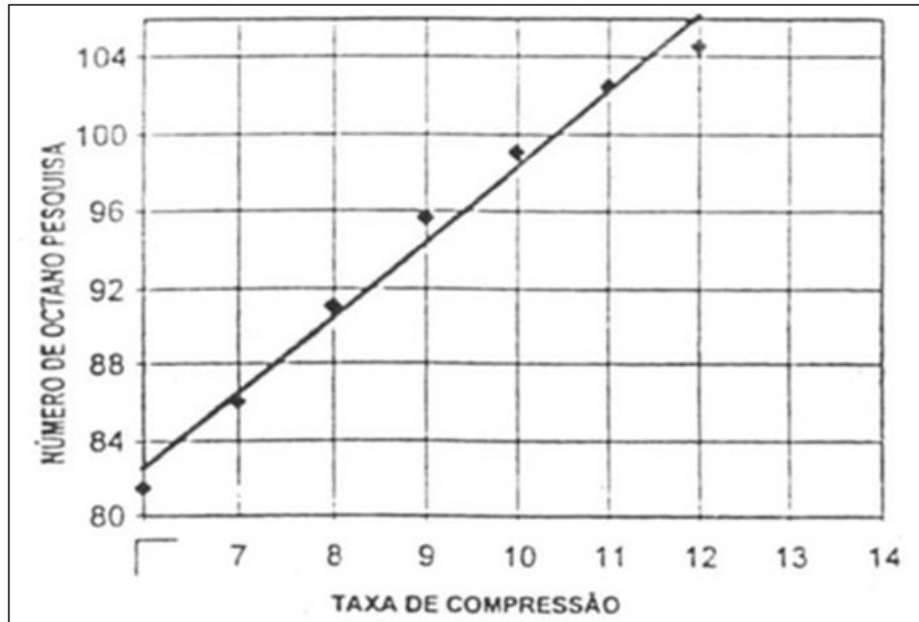


Figura 6 – Gráfico Taxa de Compressão x Número de Octano.

Fonte: Farah.

Convertendo o gráfico numa fórmula, para obter a extrapolação, temos:

$$NO = 4 \times Rp + 58,4 \quad (2)$$

<sup>6</sup> Segundo a Portaria Nº 104 de 08/07/2002 da ANP (Agência Nacional de Petróleo), em anexo.

Onde:  $R_p$  – taxa de compressão.  
 NO – Número de octano.

Calculando através da equação 2 a taxa de compressão máxima admissível correspondente para o gás natural de menor octanagem (menor número de metano), tem-se  $R_p = 14,15$ . Logo, considerando como limite de segurança a utilização de gás natural com número de octano correspondente a 115 (porcentagem de metano de 62,85% em sua composição), temos que uma taxa de compressão de 14:1 é o ideal para o motor Scania convertido a gás natural. Dessa maneira obtém-se um motor que trabalha teoricamente sem sofrer detonação, mesmo quando operando com um gás natural de menor poder anti-detonante.

Segundo a CEG, o número de metano do gás canalizado fornecido pela companhia é de 87,35, especificado em contrato. Esse valor corresponde, pela equação 1, a um índice de octanagem de 131, e uma taxa de compressão máxima de 18,3:1, pela equação 2, o que oferece uma boa margem de segurança para o motor DSI 11 otolizado utilizando taxa de 14:1.

### 5.1.2 - O Volume da Câmara de Combustão

Para alterar a taxa de compressão do motor, deve se modificar basicamente o volume da câmara de combustão. A taxa é dada pela seguinte fórmula:

$$R_p = \frac{V_1}{V_2} = 1 + \frac{(V_u)}{V_2} \quad (3)$$

Onde:  $R_p$  – taxa de compressão.  
 $V_1$  – volume do cilindro com o pistão no ponto morto inferior.  
 $V_2$  – volume da câmara de combustão.  
 $V_u$  – volume deslocado por cilindro.

De acordo com a fórmula, a taxa de compressão é reduzida quando se aumenta o volume da câmara de combustão. Para a cilindrada por cilindro, tem-se:

$$V_u = \frac{V_t}{6} = 1.836.666,67 \text{ mm}^3 \quad (4)$$

Com as taxas de compressão determinadas, pode-se então calcular o volume teórico da câmara de combustão para as diferentes configurações de motor, através da equação 3:

- Motor DSI 11 ciclo Diesel ( $R_p = 15$ ):

$$V_{2\text{DIESEL}} = \frac{1.836.666,67}{14}$$

$$V_{2\text{DIESEL}} = 131.190,5 \text{ mm}^3$$

- Motor DSI 11 ciclo Otto a gás natural ( $R_p = 14:1$ ):

$$V_{2\text{GN}} = \frac{1.836.666,67}{13}$$

$$V_{2\text{GN}} = 141.282,1 \text{ mm}^3$$

### 5.1.3/ Cálculo da Taxa de Compressão Real

Para calcular a taxa de compressão, é imprescindível utilizar as medidas reais do motor. Com os dados do catálogo do fabricante e as medidas originais obtidas no pistão, foram desenhados o pistão e o cilindro do motor no software AutoCAD. Utilizando a ferramenta *Inquiry* (que avalia propriedades de volume e massa dos desenhos em 3D), consegue-se avaliar os diferentes volumes constituintes da câmara de combustão, e pode-se determinar qual deles podem ser alterados.

É importante observar o perfil da cabeça do pistão, característico dos motores Diesel, que deve ser copiado fielmente no desenho. Além disso, é preciso considerar o formato da parte superior da câmara, que faz parte do

cabeçote, assim como as folgas existentes no cilindro. Todas essas medidas são fundamentais para calcular com precisão a taxa de compressão real do motor Scania DSI 11.

Após isso, o volume total da câmara de combustão é separado em quatro partes a serem calculadas:  $V_a$ ,  $V_b$ ,  $V_c$  e  $V_d$ .



Figura 7 - Pistão original do motor Scania DSI 11.

Do catálogo do fabricante do motor, temos os seguintes dados, referente ao motor DSI 11, que são úteis para o cálculo da taxa de compressão:

- Diâmetro do topo do pistão (da face superior até o anel de compressão): 125 mm
- Diâmetro máximo do cilindro: 127,025 mm
- Folga máxima entre a face superior do pistão e a face do cabeçote, no PMS: 1,15 mm
- Diâmetro da válvula de admissão: 54 mm
- Diâmetro da válvula de escape: 44 mm
- Diâmetro externo da sede de válvula de admissão: 56 mm
- Diâmetro externo da sede de válvula de escape: 52 mm
- Folga máxima entre a face do cabeçote e a face da válvula: 0,75 mm
- Altura da sede: 3,6 mm

Essas medidas são então inseridas no desenho do AutoCAD (figura 8), onde são incluídas todas as folgas no cálculo do volume da câmara de combustão, que por fim fornecerá a taxa de compressão do motor.

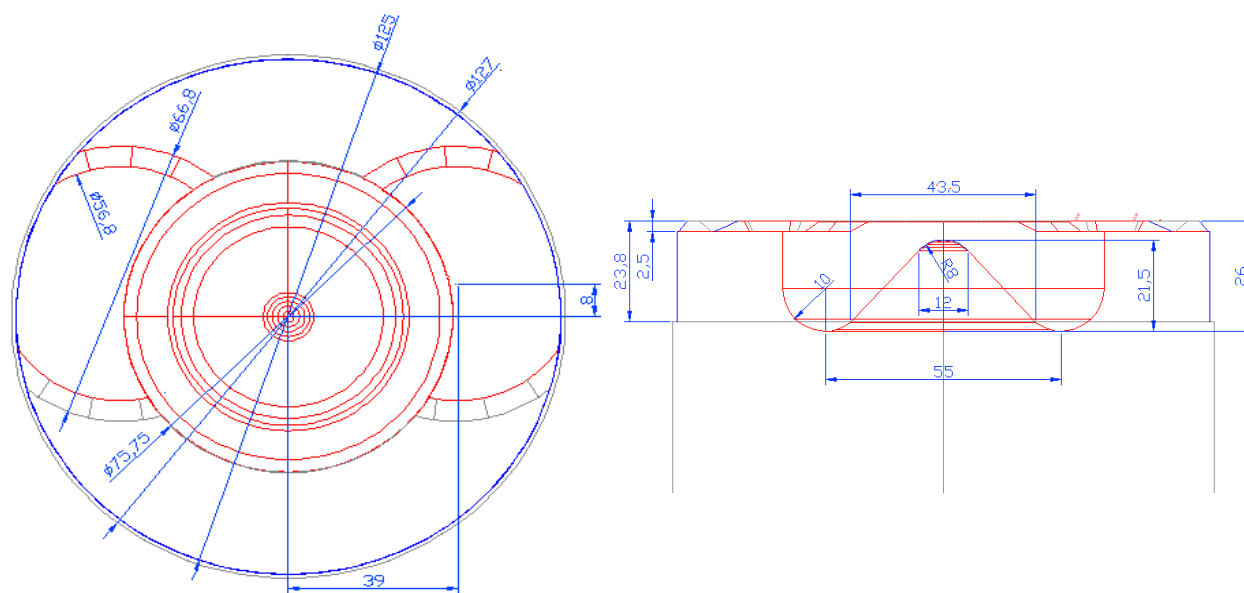


Figura 5.4 - Desenho da cabeça do pistão original do motor Scania DSI 11 [mm].

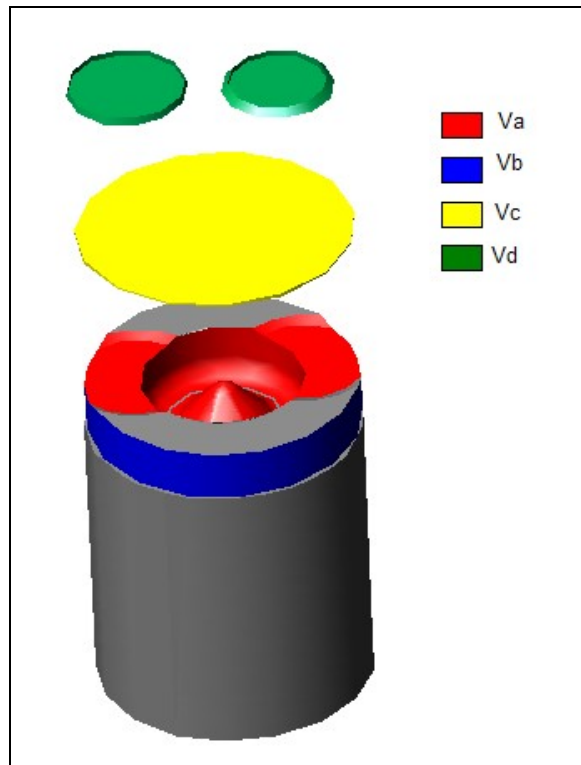


Figura 9 - Representação gráfica dos volumes constituintes da câmara de combustão do motor.

- Cálculo de  $V_a$  e  $V_b$ :

Conforme a figura 9, os volumes  $V_a$  e  $V_b$  representam o volume da câmara que está contida no pistão. A primeira medida é o volume do recipiente no topo do pistão, em vermelho, que foi desenhada com as medidas originais do pistão. A medida  $V_b$  é referente à folga entre a cabeça do pistão e camisa do cilindro, acima do anel de compressão, em azul.

Calcula-se então o volume do cilindro bruto (dentro do qual é desenhado o pistão) e subtrai-se o volume do pistão. A diferença entre esses dois volumes, fornece os volumes  $V_a$  e  $V_b$  que estão contidos no pistão:

$$V_a + V_b = V_{\text{bruto}} - V_{\text{pistão}} = 2.026.829,9 - 1.913.216,5 = 113.613,4 \text{ mm}^3 \quad (5)$$

Onde:  $V_{\text{bruto}}$  – Volume do cilindro bruto no interior do qual é desenhado o pistão.

$V_{\text{pistão}}$  – Volume do pistão do motor Scania DSI 11.

- Cálculo de  $V_c$ :

O volume  $V_c$  representa o volume da câmara de combustão referente à folga entre a face superior do pistão e o cabeçote, em amarelo na figura 9. Do catálogo do motor, temos folga máxima de 1.15 mm. Multiplicando esse valor, pelo diâmetro do cilindro, temos o volume  $V_c$ :

$$V_c = 14.573,5 \text{ mm}^3$$

- Cálculo de  $V_d$ :

O volume  $V_d$  representa o volume da câmara referente ao alojamento das válvulas de admissão e descarga, considerando também a folga entre as mesmas e as sedes. Das medidas apresentadas no catálogo do motor, calcula-se o volume da câmara de combustão referente aos alojamentos das válvulas:

$$V_{d1} = 2.029,9 \text{ mm}^3 \text{ (escape)}$$

$$V_{d2} = 2.129,9 \text{ mm}^3 \text{ (admissão)}$$

O volume total da câmara de combustão equivale a soma dos volumes:

$$V_2 = V_a + V_b + V_c + V_{d1} + V_{d2}$$

$$V_2 = 138.922,7 \text{ mm}^3$$

Com o volume da câmara calculado, aplica-se na equação 3 para obter a taxa de compressão:

$$R_p = 1 + \frac{V_u}{V_2} = 1 + \frac{1.836.666,67}{132.346,7} = 1 + 13,87 = 14,87$$

Com esse resultado, é obtida uma excelente aproximação para a taxa de compressão do motor DSI 11 original. Levando-se em conta de que foram consideradas as folgas máximas nos cálculos dos volumes. Para motores mais novos, com folgas menores, essa taxa é ainda mais próxima da relação 15:1.

#### 5.1.4. Volume a ser alterado

Para a alteração da taxa de compressão, o dado que realmente interessa é o  $\Delta V$  a ser acrescido na câmara de combustão, capaz de reduzir em uma unidade o valor da taxa. Com o valor desejado de 14:1, calcula-se a alteração para o motor original, através da equação 6:

$$\Delta V = V_{2GN} - V_{2DIESEL} = 141.282,1 - 131.190,5 = 10.091,6 \text{ mm}^3 \quad (6)$$

Onde:  $\Delta V$  – volume a ser acrescido na câmara de combustão para alteração da taxa de compressão [ $\text{mm}^3$ ].

$V_{2GN}$  – volume da câmara de combustão para o motor otolizado.

$V_{2DIESEL}$  – volume da câmara de combustão do motor original.

Dos volumes da câmara de combustão citados anteriormente ( $V_a$ ,  $V_b$ ,  $V_c$  e  $V_d$ ), é possível optar dentre esses, qual modificar para obter a taxa desejada. Para essa seleção, é necessário considerar dois pontos de vista: um técnico e um econômico.

Do ponto de vista técnico, tem-se que, os volumes  $V_b$ ,  $V_c$  e  $V_d$ , estão diretamente ligados às folgas de pistão, cabeçote e válvulas. Com isso, eles estão sujeitos a mudanças de acordo com o desgaste do motor, o que torna impreciso o controle dos mesmos. O volume  $V_a$ , por sua vez, depende somente da estrutura da cabeça do pistão, sendo o mais indicado para a modificação.

Do ponto de vista econômico, é necessário considerar o custo das peças envolvidas no trabalho, nesse caso, pistão e cabeçote. Considerando a possibilidade do projeto de um kit reversível, esse custo torna-se primordial, pois requer a compra de novas peças para a conversão. Após consulta no mercado, são obtidos os seguintes preços, para peças novas<sup>7</sup>:

- Pistão Scania DSI 11 – R\$ 500,00 (unit.) - R\$ 3.000,00 (jogo de 6 pistões)
- Cabeçote Scania DSI 11 – R\$ 6.333,00 (unit.) – R\$ 12.666,00 (jogo de 2 cabeçotes)

Conclui-se então que é mais vantajoso alterar o pistão. Além de mais barato, é uma peça mais leve e menor, o que torna a sua usinagem mais simples e menos dispendiosa.

O conjunto desses fatores indica que se deve alterar o volume  $V_a$ , da câmara contida no topo do pistão para atingir a taxa de compressão desejada.

#### 5.1.5. Alterando $V_a$

Com a alteração do volume da câmara do pistão ( $V_a$ ), pode-se modificar a sua geometria para uma mais próxima àquela característica dos motores ciclo Otto.

Nos motores Diesel, devido à sua característica de ter a mistura ar/combustível formada durante a fase de combustão, a estrutura da câmara é projetada para provocar o turbilhonamento do ar. Esse fato, aliado ao posicionamento do bico injetor, é responsável pela formação de uma mistura mais homogênea, que resulta numa combustão mais eficiente. No caso do motor Scania, o pistão é denominado restrito, porque a mistura é prensada radialmente para dentro da câmara do pistão, quando o mesmo está próximo ao ponto morto superior, conforme indicado na figura 10.



Figura 10 – Geometria do pistão restrito.

Fonte: Smith.

<sup>7</sup> Consulta feita a Equipe, revendedor autorizado Scania no Rio de Janeiro, em junho de 2005.



Por essa razão, os pistões dos motores Diesel são diferentes aos dos motores Otto. Esses apresentam uma geometria mais simples, com o topo do pistão geralmente plano ou levemente oval (dependendo do posicionamento da vela de ignição), já que a mistura ar/combustível nesse caso é formada antes da admissão. Nos motores Otto, o projeto da câmara de combustão também está ligado diretamente à possibilidade de ocorrência de auto-ignição, onde se deseja uma geometria que evite a formação de pontos quentes e de alta pressão na câmara.

Analisando a geometria da cabeça do pistão, nota-se a possibilidade de retirada de material na extremidade do recipiente contido na peça, mudando sua característica restrita. Usinando um raio que una a face interna do recipiente e a face superior do pistão, um volume de material considerável é retirado, e torna-se a face do pistão mais adoçada que a original, conforme podemos notar na figura 11.

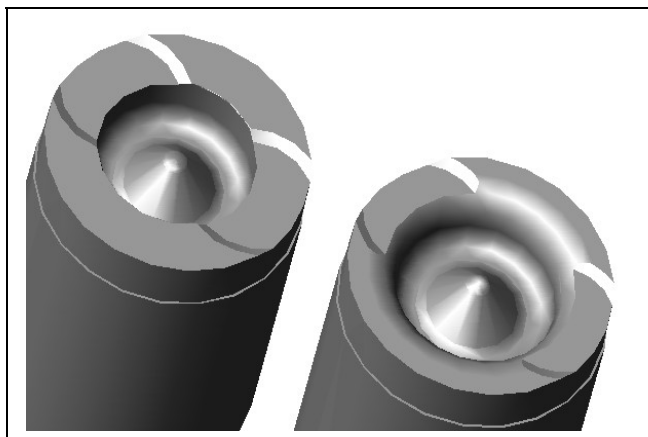


Figura 11 – Desenho em 3D do perfil do topo do pistão original e o perfil do novo pistão a ser usinado.

Essa modificação na câmara é desejada devido à tendência de auto-ignição dos motores ciclo Otto, com taxa de compressão elevada. A borda da câmara, devido à sua forma (aresta de 90°) e sua proximidade do ponto de centelhamento da vela, apresenta temperaturas mais elevadas, em relação às outras partes do pistão, se tornando uma área da câmara com provável surgimento de pontos quentes, responsáveis pela ocorrência da auto-ignição.

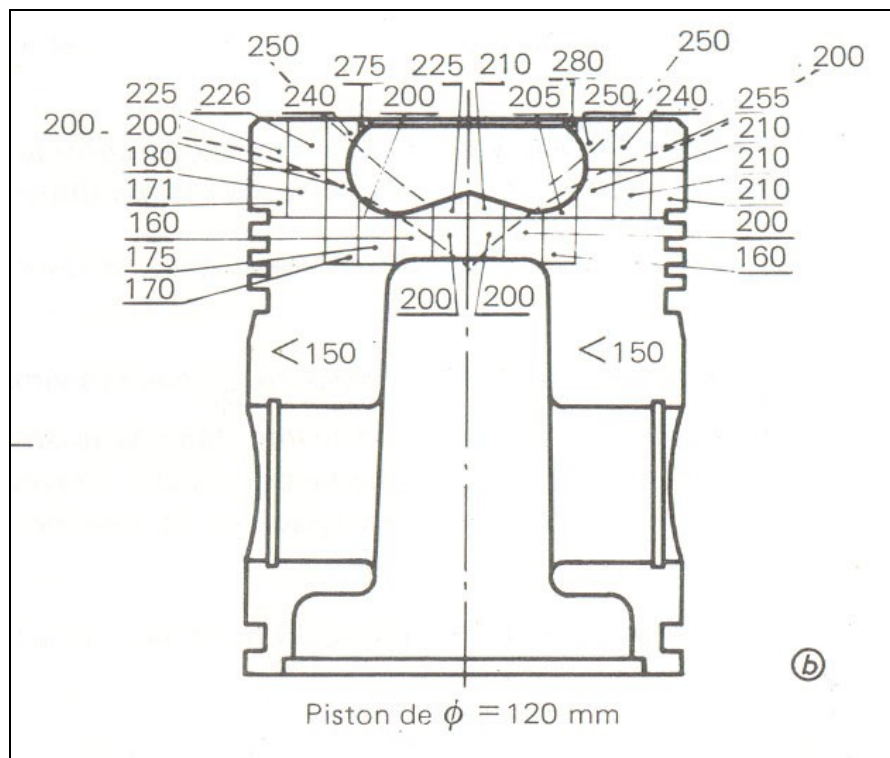


Figura 12 - Perfil de temperaturas de um pistão em alumínio, movido a Diesel.

Na figura 12 podemos notar o perfil de temperaturas em um pistão de motor a Diesel, em alumínio, de 120 milímetros de diâmetro, com câmara semelhante ao pistão do Scania DSI 11. Nota-se que, durante o funcionamento, a borda da câmara é o ponto mais quente do pistão, apresentando temperaturas de até 280° C. Como o gás natural tem um poder calorífico maior que o óleo diesel, essas temperaturas podem ser ainda mais elevadas, pelo fato do combustível liberar mais calor em condições similares de funcionamento. Para amenizar esse efeito, o ideal seria trabalhar a borda da câmara, onde passaríamos a ter temperaturas menores na face superior do pistão, preservando o material da peça e prevenindo o surgimento de pontos quentes na câmara.

Outro fator importante a se considerar, é a possibilidade do aparecimento de trincas originadas radialmente na borda da câmara de combustão. Por ser a parte mais quente, e ser circundada pelas regiões menos aquecidas, a borda pode não se expandir como deveria, de acordo com o coeficiente de dilatação térmica e a temperatura atingida. A única opção é a dilatação do material na direção da superfície livre (centro do pistão). O limite de elasticidade do material, que é mais baixo em altas temperaturas, pode então ser excedido, ocasionando uma deformação plástica na forma de acúmulo de material, ou uma concentração na periferia da câmara. O pistão, ao se resfriar até a temperatura ambiente, após o desligamento do motor, permanece com essa deformação, criando tensões de tração, que conduzem às trincas na borda da câmara.

Por essa razão, ao modificar o pistão da forma planejada, previne-se a ocorrência de pré-ignição no cilindro e o surgimento de trincas e falhas no pistão, fatores que comprometeriam o desempenho e a durabilidade do motor. Com base nesses dados, reforça-se a idéia de usinar a borda da câmara do pistão, como melhor opção para a alteração da taxa de compressão do motor.

-Calculando  $V_{a'}$  e a nova taxa de compressão:

Conforme o cálculo feito anteriormente, foi obtido o valor aproximado de 1.0091,6 mm<sup>3</sup>, para a diferença em volume a ser retirada para alteração da taxa de compressão de 15:1 para 14:1.

Com base nesse dado e por aproximação, chega-se ao volume a ser usinado no pistão, representado nos desenhos das figuras 13 e 14. Utilizando novamente a ferramenta *Inquiry* do software AutoCAD, avalia-se o novo volume  $V_{a'}$  (câmara do pistão) e  $V_{2'}$  (câmara de combustão):

$$V_{a'} + V_b = V_{\text{bruto}} - V_{\text{pistão}} = 2.026.829,9 - 1.902.340,9 = 124.489 \text{ mm}^3$$

$$V_{2'} = V_{a'} + V_b + V_c + V_{d_1} + V_{d_2}$$

$$V_{2'} = 124.489 + 14.573,5 + 2.029,9 + 2.129,9 = 143.222,3 \text{ mm}^3$$

$$R_p = 1 + \frac{V_{2'}}{V_{2'}} = 1 + \frac{1.836.666,67}{143.222,3} = 13,82$$

Foi obtida assim, uma boa aproximação para a nova taxa de compressão do motor. Levando-se em conta novamente que, para esse cálculo, são consideradas as folgas máximas do motor. Para um motor novo, a taxa estará ainda mais próxima ao valor de 14:1.

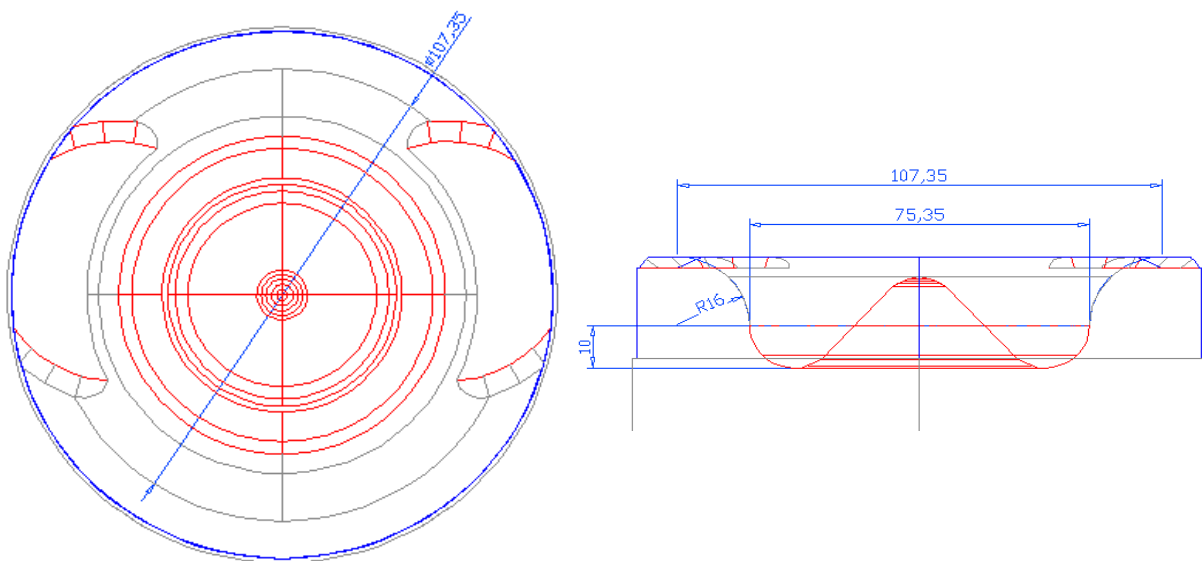


Figura 13 - Representação gráfica do volume a ser usinado.

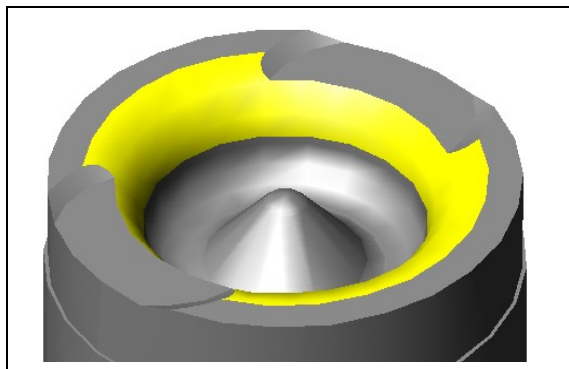


Figura 14 - Representação gráfica da nova face do pistão.

## 5.2 - Usinagem dos Pistões

Para a usinagem dos pistões, é utilizado um torno de comando numérico (CNC). Por ter um volume a ser usinado de geometria complexa, os tornos CNC se tornam os mais indicados para esse serviço, visto que o desenho do novo pistão pode ser inserido em um programa que comandará a máquina na fabricação da peça, conforme figura 15.

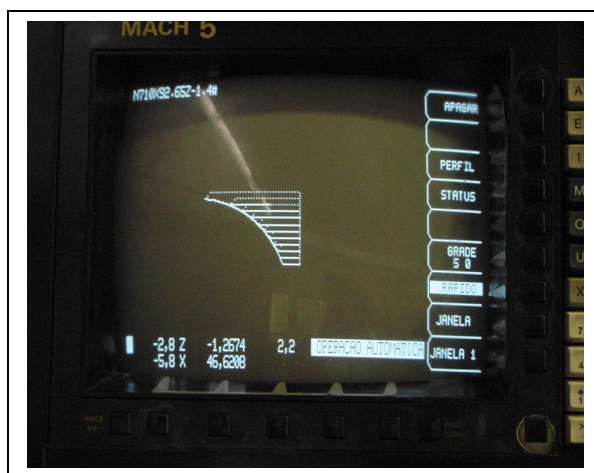


Figura 15 – Representação do volume a ser usinado na programação do torno CNC.

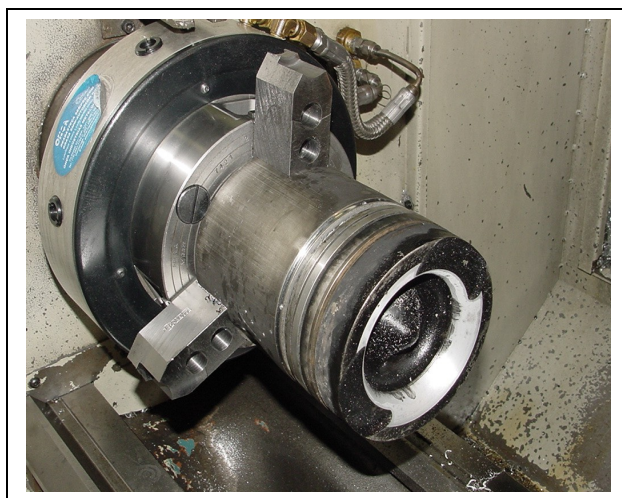


Figura 16 – Pistão usinado no torno CNC.

## 6. Sistema de Admissão e Escape

Ao se converter um motor ciclo Diesel para o ciclo Otto, se torna fundamental analisar as peculiaridades de ambos os ciclos. O fato do motor a óleo diesel admitir apenas ar, enquanto o motor ciclo Otto admite mistura ar/combustível, já torna de antemão o seu sistema de admissão e escape inadequado para o uso dedicado de gás natural. Seja o tempo de admissão, tempo de escape ou o grande cruzamento de válvulas apresentado pelo motor original, em sua configuração de eixo comando de válvulas.

O cruzamento de válvulas (*overlap*) é o tempo em que as válvulas de admissão e escape ficam abertas simultaneamente. Essa característica aumenta o rendimento volumétrico do motor devido a um melhor aproveitamento da inércia dos gases, com o ar admitido auxiliando na exaustão dos gases de combustão do ciclo anterior, possibilitando uma maior admissão de ar 'limpo' para a queima.

Além disso, o cruzamento permite uma maior refrigeração do cilindro e do sistema de exaustão através da passagem de ar da admissão diretamente para os dutos de escapamento. Isso é desejável principalmente em motores Diesel turbo, pois permite que a turbina trabalhe a uma temperatura mais baixa.

Como os motores Diesel admitem apenas ar, eles apresentam cruzamentos de grau elevado, característica que passa a ser indesejável em um motor ciclo Otto. Isso significa que, se as válvulas de admissão e escape ficam durante muito tempo abertas simultaneamente num motor Otto, haverá grande desperdício de mistura ar/combustível não queimada pela descarga. Esse fator se reflete em grande consumo de combustível e também num elevado nível de emissões de hidrocarbonetos (no caso do motor a gás natural, o metano não queimado). Cresce também as emissões de monóxido de carbono para a mistura que acaba sendo queimada nos dutos de escapamento.

Outro problema que pode surgir é o retorno de chama pelo coletor de admissão. Quando o motor está à baixa velocidade, com a borboleta do acelerador pouco aberta, a pressão no coletor fica abaixo da pressão atmosférica, e, ao ocorrer o cruzamento, o gás de escape, à pressão elevada, acaba retornando pelo duto de admissão devido à essa diferença de pressão. Esse fator pode acarretar na explosão da mistura ar/combustível presente no coletor de admissão, causando danos ao motor.

Por essas razões, torna-se imprescindível a alteração no diagrama de abertura e fechamento de válvulas do motor Scania. É necessária a adoção de um novo eixo comando com cruzamento de válvulas de menor grau, modificando o posicionamento e o perfil dos cames, que permitam um rendimento volumétrico adequado a motores Otto, sem ocasionar desperdício de mistura ar-combustível não queimada.

Algumas conversões, principalmente as ciclo dual (*dual fuel*), não promovem a troca do eixo comando de válvulas. Como resultado, apresentam motores com consumo de combustível elevado, e muito poluentes.

Tabela 8 : Tempo das Válvulas de Admissão e Escape do Motor Scania DSI 11

Tempo da válvula de admissão:	
- abertura:	30° antes do PMS
- fechamento:	26° depois do PMI
- duração da admissão:	236°
Tempo da válvula de escape:	
- abertura:	64° antes do PMI
- fechamento:	28° depois do PMS
- duração do escapamento:	272°
Cruzamento de válvulas ( <i>overlap</i> ):	58°

Fonte: Catálogo Scania.

### 6.1. Determinando o Novo Diagrama de Válvulas Ciclo Otto Utilizando o Software Dynosim

Para a determinação de qual geometria deve-se aplicar no eixo comando de válvulas do motor Scania DSI 11 convertido ao uso do gás natural, é utilizado um programa de computador que simula o desempenho de motores quatro tempos.

A definição do grau de abertura e fechamento de válvulas ideal é praticamente impossível de ser realizada de maneira teórica, visto que depende de centenas de variáveis. A mesma pode ser realizada na prática por meio de 'tentativa e erro'. Todavia, o teste de diversas combinações de ângulos também se torna inviável, visto que necessitaria a produção, montagem e teste de uma infinidade de eixos, com configurações de came diferentes, em dinamômetro.

Com base nessas dificuldades, a melhor maneira encontrada para este fim foi a utilização do software Dynosim. Trate-se de um programa de computador que funciona como um dinamômetro virtual. Ele se baseia em cálculos de dinâmica dos fluidos, termodinâmica e atrito mecânico existente durante os 720 graus compreendidos pelo ciclo quatro tempos, utilizando como dados de entrada as características do motor, como cilindrada, taxa de compressão, combustível, diâmetro de válvulas, geometria de cabeçote, para determinar dados de saída como pressão

no cilindro, eficiência volumétrica, potência e torque. Quanto maior é a fidelidade em relação aos dados do motor, mais precisos são os resultados da simulação.

Ainda que esse método de teste seja útil para obter uma boa aproximação dos resultados esperados da conversão do motor Scania DSI 11, a sua grande utilidade está na ferramenta *Pro Iterator*. Essa ferramenta é utilizada na otimização da configuração ideal para o eixo comando de válvulas do motor através de um teste iterativo.

Nesse teste é definido para qual característica o eixo comando de válvulas deve ser otimizado: pico de torque, pico de potência, curva plana de torque ou curva plana de potência. Como o projeto é de um motor estacionário para geração de energia (velocidade constante), o mesmo deve ser otimizado para pico de potência na faixa de rotação que compreende à de utilização (1800 rpm).

Após essa escolha o programa realiza milhares de combinações de graus de abertura e fechamento das válvulas de admissão e escape variando em uma faixa de até 64 graus para cada um dos tempos de válvulas. Ao final do teste, o Dynosim salva as dez melhores configurações de eixo comando, ou seja, aquelas que apresentarem pico de potência mais elevado na faixa determinada, após a simulação.

Dessas dez melhores configurações seleciona-se aquela que apresentar o melhor desempenho dentro das características desejadas para um motor ciclo Otto.

### 6.1.1. O Teste

Para realizar a simulação do motor Scania DSI 11 a gás natural, é necessário suprir o programa com as informações requeridas figura 8, que são descritas a seguir.

**Short Block**  
 Short Block: Scania DS11 - GNV  
 No. Cylinders: 6      Bore: 127.00 mm      Rod Length: 237.22 mm  
 Total Volume: 11020.89 cc      Stroke: 145.00 mm      Rod Ratio: 1.636

**Cylinder Heads**  
 Cylinder Heads: Low Performance/Ported, Large Valves      Air Flow  
 Valve Specifications:  
 Intake Valves/Port: 1      Exhaust Valves/Port: 1  
 Intake Valve Dia: 54.00 mm      Exhaust Valve Dia: 45.00 mm

**Compression**  
 Compression Ratio: 14.00      CR Calc  
 Combustion Space: 141.29 cc      Cylinder Volume: 1836.81 cc

**Induction**  
 Induction Flow: 595.0 cfm @ 3.00 inHg      Fuel Type: LNG  
 Manifold Type: Forced Induction      Nitrous Injection: 0.0 lbs/min  
 Forced Induction Specifications:  
 Blower Type: Custom Turbo  
 Island Flow: 595.0 cfm      Surge Flow: 420.0 cfm      Pressure Ratio: 1.70  
 Impeller Speed: --- rpm      Belt Ratio: ---      Internal Ratio: ---  
 Peak Efficiency: 73.0 %      Boost Limit: 10.0 psi      Intercooler: 25.0 %

**Exhaust**  
 Exhaust System: Forced Induction Exhaust

**Camshaft**  
 Cam Name: Scania DS11 - GNV      CamManager  
 Intake Lift At Valve: 14.60 mm      Lifter Type: Solid  
 Exhaust Lift At Valve: 15.10 mm      Lifter Acceleration Rate: 3.00  
 Valve Opening/Closing Based On: Seat-To-Seat  
 Primary Timing (Seat-to-Seat): IVD: 0.0      IVC: 0.0      EVD: 0.0      EVC: 0.0

Figura 9 – Dados de entrada para simulação do motor no software Dynosim.

#### - Bloco do Motor (*Short Block*):

Nessa janela configuram-se as características do bloco do motor. Número de cilindros (6), curso do pistão (145 mm) e diâmetro do pistão (127 mm). O programa fornece então automaticamente a cilindrada do motor.

- Cabeçote (*Cylinder Heads*):

Nessa configuração é selecionada, dentre as opções disponíveis no programa, aquela que mais se assemelha com a geometria do cabeçote do motor Scania. Assim, é especificado como '*Low Performance/Ported, Large Valves*', que representa cabeçotes de ferro fundido comuns a motores *standard*, de duas válvulas por cilindro, com dutos de admissão e escape mais restringidos. Todavia, como as válvulas do Scania têm diâmetro grande, selecionamos a opção '*Large Valves*', inserindo as suas medidas: 54 mm para válvulas de admissão e 45 mm para válvulas de escape.

- Taxa de Compressão (*Compression*):

Nesse setor é especificada a taxa de compressão a ser utilizada no motor (14:1, conforme determinado anteriormente). O programa fornece o volume total do cilindro, e o volume da câmara de combustão.

- Indução (*Induction*):

Nesse setor são inseridas as informações sobre o sistema de admissão do motor e o combustível utilizado (no caso LNG – gás natural). Em '*Induction Flow*' é requisitado o valor fluxo de indução de mistura ar/combustível no regime de trabalho do motor. O cálculo é realizado de acordo com a equação 7<sup>8</sup>:

$$CFM = (CID \times RPM) \times Padm/Patm / 1728 / 2 \quad (7)$$

$$CFM = (672,48 \times 1800) \times 1,7 / 1728 / 2 = 595,4 \text{ ft}^3$$

Onde:

CFM – Fluxo de mistura ar-combustível admitida [ft<sup>3</sup>]

CID – Volume total do motor [in<sup>3</sup>]

RPM – regime de trabalho em rotações por minuto

Padm/Patm – Razão entre as pressões de saída e entrada da turbina do motor. Onde a pressão do turbo é igual a 0,7 bar.

É selecionada a opção de 3,0 inHg, referente a diferença de pressão de medição do fluxo de indução, medido em coluna de mercúrio. Essa opção é indicada, segundo o manual do Dynosim, para os motores alimentados com no máximo dois carburadores. A opção de 1,5 inHg é indicada apenas para motores alimentados por quatro carburadores, e modelos equipados com injeção eletrônica.

Em '*Manifold Type*', que trata das opções de sistemas de admissão do motor, selecionamos a opção referente a motores turbinados ('*Forced Induction*'). Nas opções do programa existem 33 modelos diferentes de turbina a serem aplicadas. Segundo o fabricante, a turbina para o motor DSI 11 pode ser fabricada pelas empresas Garret, Lacombe ou Shwitzer. Todavia, para a configuração do Scania aplicamos a opção customizada '*custom turbo*'. Para o '*Island Flow*', que é o fluxo no qual a turbina tem o seu maior rendimento, aplicamos o mesmo fluxo de indução calculado para o motor, já que a turbina é projetada especificamente para esse motor.

Em '*Pressure Ratio*' aplicamos a razão entre a pressão de admissão e a pressão atmosférica. Como o turbo trabalha a 0,7 bar a 1800 rpm, segundo o catálogo do motor, temos uma razão total de 1,7.

Para as opções, '*Surge Flow*' (fluxo no qual a turbina pode entrar em ressonância, causando queda de eficiência), '*Peak Efficiency*' (pico de eficiência) e '*Boost Limit*' (pressão limite do turbo), utilizamos os valores do modelo Shwitzer disponível nas opções do programa, que mais se assemelha ao modelo do Scania, trabalhando a um fluxo de admissão bem próximo (modelo 4LE556, a 600cfm).

Para o intercooler selecionamos uma eficiência de 25%, referente a modelos ar-ar, conforme indicado pelo manual do Dynosim.

- Eixo Comando de Válvulas (*Camshaft*):

Nessa janela do programa, se definem as características do eixo comando de válvulas. Como não há um eixo como ponto de partida, já que o original Diesel difere dos eixos ciclo Otto, é estabelecido um novo eixo comando.

Como o objetivo é apenas encontrar um diagrama de válvulas adequado ao motor otolizado, mantém-se as outras características originais do eixo. Assim, em '*Lift At Valve*' determinamos as mesmas alturas de abertura das válvulas de admissão (14,6mm) e escape (15,1mm) originais, de acordo com o manual do fabricante.

Em '*Lifter Type*', selecionamos a opção *solid*, referente a eixos com acionamento de tucho mecânico, característica do Scania DSI 11.

Em '*Lifter Acceleration Rate*', selecionamos a opção 3, referente a média em motores Otto. O Scania original apresenta uma taxa de aceleração distinta, característica de motores Diesel. Todavia, no novo eixo comando de válvulas será fabricado um novo perfil de came, com aceleração compatível aos motores Otto.

Em '*Valve Open/ Closed Based On*' determina-se o método de medição do diagrama de válvulas. É selecionada a opção '*Seat-to-Seat*' correspondente ao método mais comum de medição, segundo o manual do Dynosim.

Para o diagrama de válvulas inicial, que servirá como ponto de partida para o teste, define-se um padrão quatro tempos. Ou seja, graus zero para a abertura e fechamento das válvulas de admissão e escape. Onde:

<sup>8</sup> Ver Anexo III, para dimensionamento de misturadores Woodward.

IVO – *intake valve open* (abertura das válvulas de admissão)- 0° BTDC (antes do PMS)  
 IVC – *intake valve close* (fechamento das válvulas de admissão). – 0° ABDC (depois do PMI).  
 EVO – *exhaust valve open* (abertura das válvulas de escape) – 0° BBDC (antes do PMI)  
 EVC – *exhaust valve close* (fechamento das válvulas de escape) – 0° ATDC (depois do PMS).  
 - ProIterator

Após a entrada dos dados do motor, ajustamos então os parâmetros para realização da simulação dos diagramas de válvulas com a ferramenta ProIterator, conforme figura 17.

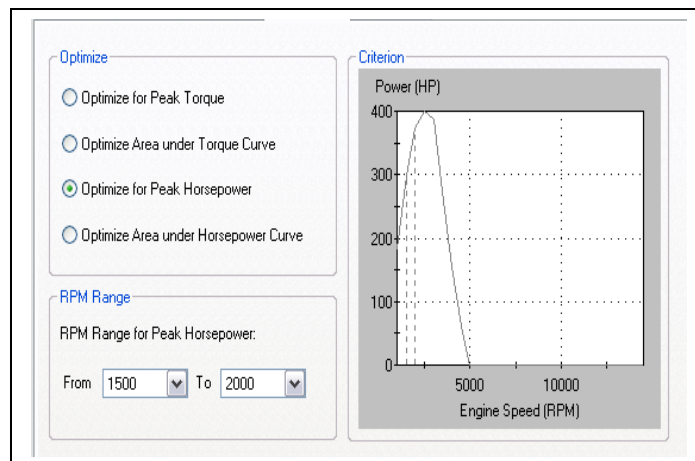


Figura 17 – Setor do programa para estabelecimento dos critérios de otimização do diagrama de válvulas.

O teste é realizado em duas fases. Na primeira ajusta-se um intervalo máximo de 64° (+/-32°) para cada um dos quatro pontos do diagrama: IVO, IVC, EVO e EVC. Sendo essa variação feita de grau a grau (*step value* = 1). Para essa etapa são testadas 1.185.921 combinações diferentes de diagramas de válvulas para o eixo comando.

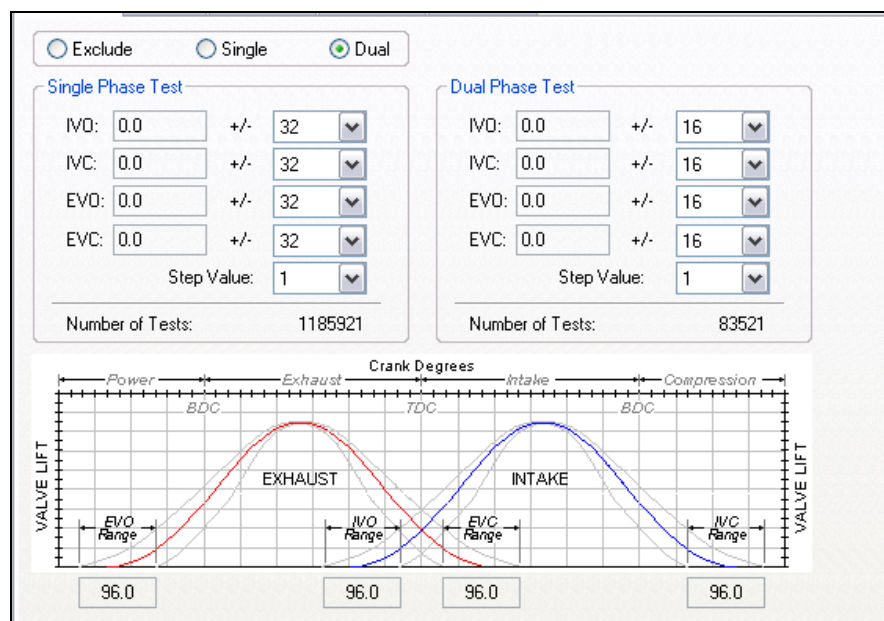


Figura 18 – Ajuste dos Parâmetros para o ProIterator.

Na segunda fase, ajusta-se um intervalo máximo de 32° (+/-16°) para cada um dos pontos do diagrama, com variação feita grau a grau. Para essa etapa final são testadas mais 83.521 combinações diferentes de diagramas de válvulas, totalizando 1.269.442 iterações ao final da simulação.

## 6.1.2. Resultados

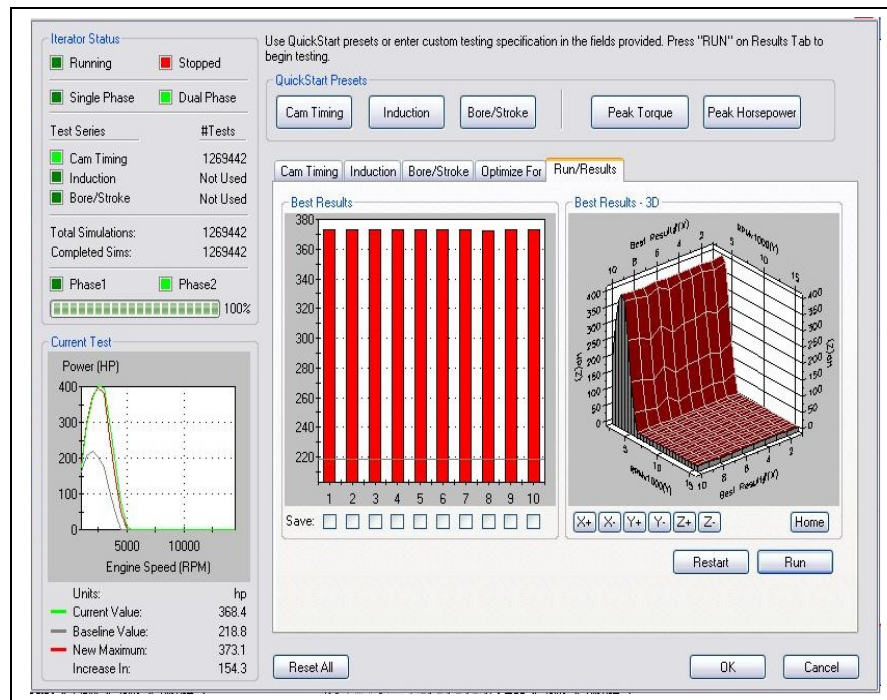


Figura 19 – Apresentação dos 10 melhores resultados da simulação do diagrama de válvulas.

Na figura 19 pode-se notar a apresentação dos resultados obtidos ao final das 1.269.442 iterações realizadas na simulação para eixo comando de válvulas. O pico de potência obtido foi de 373,1 HP. Um aumento de 154,3 HP em relação ao valor base de 218,8 HP, referente à configuração de graus igual a zero.

Os 10 melhores resultados são então destacados nas barras em vermelho, representando as configurações que apresentaram o melhor desempenho. O diagrama de cada uma dessas opções pode ser avaliado na tabela 10.

Tabela 10 - As 10 Melhores Configurações de Eixo Comando de Válvulas.

Eixo comando de Válvulas	Potência a 1500rpm (HP)	Potência a 2000rpm (HP)	IVO(BTDC)	IVC(ABDC)	EVO(BBDC)	EVC(ATDC)	Tempo de Admissão	Tempo de Exaustão	Overlap
best1	298	373	28°	40°	40°	26°	248°	246°	54°
best2	298	373	31°	40°	40°	23°	251°	243°	54°
best3	297	373	30°	40°	40°	25°	250°	245°	55°
best4	297	373	31°	40°	40°	24°	251°	244°	55°
best5	298	373	30°	40°	40°	24°	250°	244°	54°
best6	297	373	32°	40°	40°	22°	252°	242°	54°
best7	298	373	27°	40°	40°	27°	247°	247°	54°
best8	297	373	32°	40°	40°	23°	252°	243°	55°
best9	298	373	29°	40°	40°	25°	249°	245°	54°
best10	297	373	29°	40°	40°	26°	249°	246°	55°

Analisando os resultados obtidos, deve-se optar pela configuração mais vantajosa para o projeto. Nota-se que a potência obtida foi praticamente a mesma para as dez opções. O cruzamento de válvulas (*overlap*) também é semelhante.

Todavia, para uma mesma potência e um mesmo *overlap*, nota-se que a opção ‘best7’ apresenta o menor tempo de admissão (247°). Isso significa que, para um mesmo desempenho, essa configuração pode apresentar, na teoria, uma maior economia de combustível. Como as válvulas de admissão permanecem menos tempo abertas, uma menor quantidade de mistura ar/combustível é admitida pelo motor por ciclo.

O diagrama ‘best7’ apresenta também o maior tempo de exaustão (247°). Essa característica melhora o escapamento dos gases de combustão, facilitando a entrada de mistura ar/combustível nova no cilindro, melhorando assim o rendimento volumétrico do motor em relação às outras opções. Esse fator compensa o menor tempo de admissão apresentado para esse diagrama, resultando no mesmo desempenho das outras opções.

Por essas razões optamos pela configuração ‘best7’, como o diagrama de válvulas a ser adotado no novo eixo comando para o motor Scania DSI 11 otolizado.



CAMSHAFT			
Cam Name: Scania DS11 - GNV			
Intake Lift At Valve:	14.80 mm	Lifter Type:	Solid
Exhaust Lift At Valve:	15.10 mm	Lifter Acceleration Rate:	3.00
Valve Opening/Closing Based On: Seat-To-Seat			
Primary Timing (Seat-to-Seat):	IVO: 27.0	IVC: 40.0	EVO: 40.0 EVC: 27.0
Secondary Timing (0.050-inch):	IVO: ***	IVC: ***	EVO: *** EVC: ***
Cam Installed Advanced(+)/Retarded(-): 0.0			
True IVO:	27.0	True EVO:	40.0
True IVC:	40.0	True ICA:	96.5
True EVC:	27.0	True ECA:	96.5
Cam Timing Summary:			
Intake Duration:	247.0	Exhaust Duration:	247.0
Intake Centerline Angle:	96.5	Exhaust Centerline Angle:	96.5
Lobe Centerline Angle:	96.5	Valve Overlap:	54.0

Figura 20 – Dados do Eixo Comando para o DSI 11 Ciclo Otto.

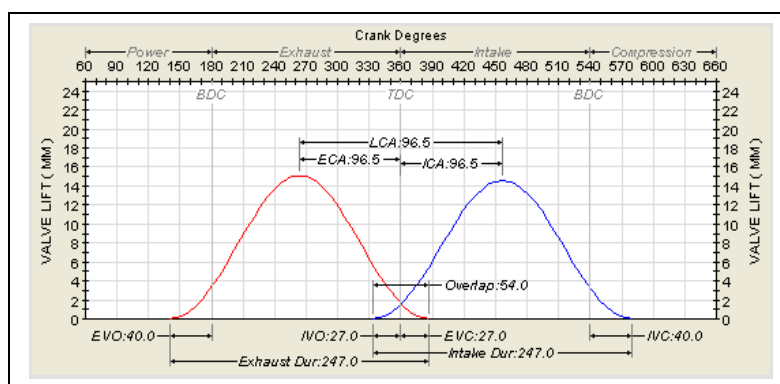


Figura 21 - Diagrama de válvulas para o Scania DSI 11 a gás natural.

Na figura 22 é possível notar as diferenças entre os diagramas de válvulas do motor a diesel e o para o motor a gás natural. O eixo comando do motor ottolizado apresenta 4° a menos de cruzamento de válvulas.

O tempo de escape se inicia após e se encerra antes do tempo apresentado no diagrama de válvulas do motor ciclo diesel. Isso resulta numa diferença de 25° no tempo de escape. A admissão por sua vez, fecha 14° depois do motor original, o que significa que o motor permanece mais tempo admitindo.

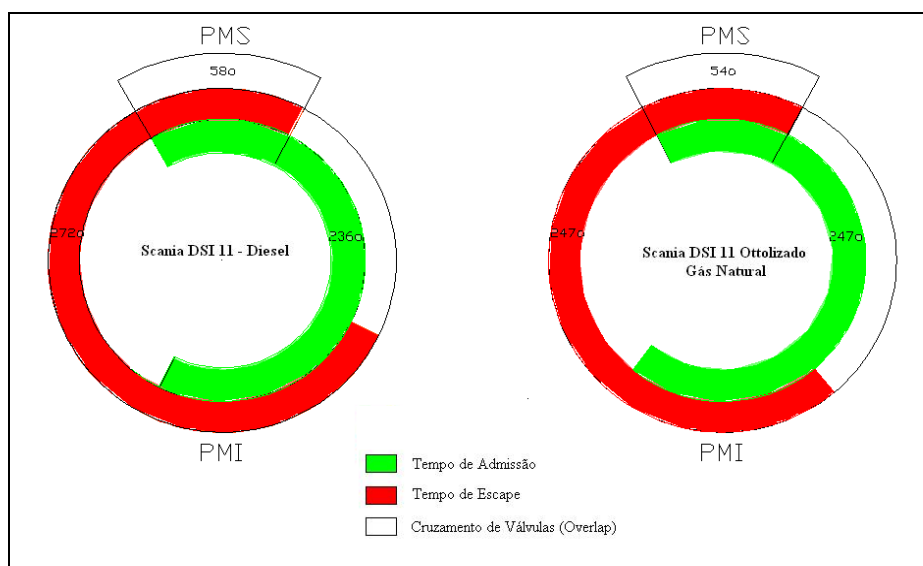


Figura 22 – Representação dos diagramas de válvulas para o motor DSI 11 a diesel e a Gás Natural

## 6.2. Determinação do Perfil dos Cames de Admissão e Escape

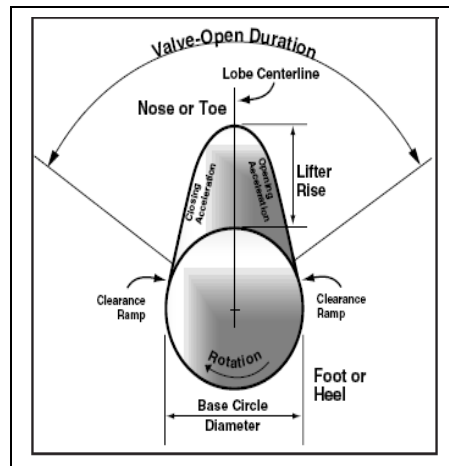


Figura 23 – O perfil do came.

Fonte: Manual Dynosim [16].

Com o diagrama de válvulas calculado, deve-se então determinar o perfil para os cames de admissão e escape, afim que o eixo comando acione as válvulas no tempo estipulado.

O cilindro de um motor quatro tempos admite apenas uma vez a cada duas voltas do eixo virabrequim. Por sua vez, o eixo comando aciona a válvula de admissão uma vez a cada 360°. Devido a essa diferença, em um motor quatro tempos, a relação entre eixo virabrequim e eixo comando de válvulas é sempre 2:1. Ou seja, a cada duas rotações do motor, o eixo comando gira uma vez.

Com essa relação em mãos, significa que, o tempo de válvula calculado para o virabrequim é equivalente a metade no perfil do came. Logo:

- Tempo de válvula de admissão:  $123^{\circ} 30'$
- Posicionamento da linha de centro do came no virabrequim (em relação ao PMS):  
 $\theta_1 = 123,5^{\circ} - 27^{\circ} = 96^{\circ} 30'$  (figura)
- Tempo de válvula de escape:  $123^{\circ} 30'$
- Posicionamento da linha de centro do came no virabrequim (em relação ao PMS):  
 $\theta_2 = 27^{\circ} - 123,5^{\circ} = -96^{\circ} 30'$  (figura)
- Cruzamento de válvulas (*overlap*):  $27^{\circ}$

A altura do came (*Lifter Rise*, figura 23) deve ser proporcional à medida de abertura máxima das válvulas originais do motor: admissão (14,6mm) e escape (15,1mm). Como o eixo comando do motor Scania DSI 11 tem seu acionamento por tucho mecânico, essa relação é definida pelas medidas do balancim.

Todavia, como a medida de abertura das válvulas não deve ser alterada na otolização, esses valores são os mesmo dos originais:

- Altura do came de admissão: 8,4 mm
- Altura do came de escape: 8,7 mm

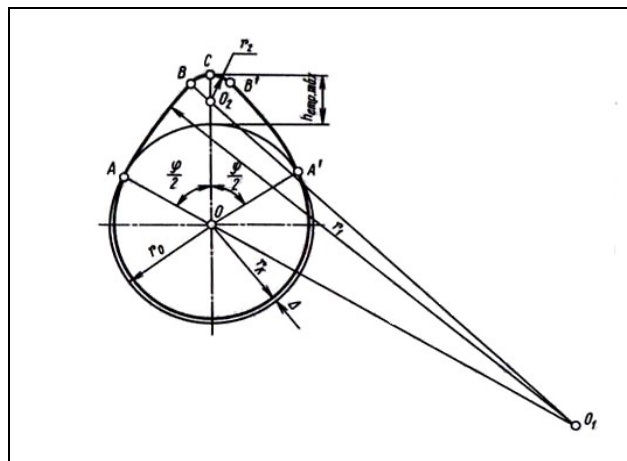


Figura 24 – Geometria do perfil do came.

Fonte: Vsórov.

Na figura 24 é possível notar a geometria do perfil do came para o eixo comando de válvulas, e suas principais medidas, onde:

$h_{emp,max}$  – altura máxima do came ( 8,7mm para o escape e 8,4mm para admissão).

$\varphi$  - ângulo referente ao tempo de abertura da válvula ( $123^{\circ}30'$  para ambas as válvulas).

$r_0$  – raio base do came (24,1mm).

$r_1$  – raio da rampa de aceleração da abertura e fechamento das válvulas.

$r_2$  – raio da ponta do came.

Para o motor DSI 11 otolizado, já são determinados os parâmetros  $h_{emp,max}$  e  $r_0$  que correspondem aos mesmo valores originais do motor. O ângulo  $\varphi$  provém do diagrama de válvulas calculado anteriormente. Os valores restantes a se determinar são os raios  $r_1$  e  $r_2$ .

O raio  $r_1$  é o raio da rampa de aceleração de abertura e fechamento das válvulas. É esse raio que determina com que rapidez a válvula é aberta ou fechada. No motor original, ciclo diesel, essa aceleração é elevada devido ao fato do motor admitir somente ar. Ou seja, enquanto a válvula de admissão se abre rapidamente, a de escape também se fecha rapidamente. Essa característica, aliada ao grande cruzamento de válvulas, permite que esses motores tenham bom rendimento volumétrico.

No motor ciclo Otto os raios de rampa de aceleração são menores, já que esses motores devem ter cruzamento de válvulas menor, e, portanto, devem permanecer menos tempo com ambas as válvulas abertas. Com as válvulas se abrindo e se fechando mais lentamente, uma menor quantidade de mistura ar/combustível pode ser desperdiçada pelo escapamento.

Para o motor DSI 11 otolizado é necessário utilizar um raio  $r_1$  comum aos motores ciclo Otto tradicionais. Para isso, utiliza-se como base o perfil do came do motor GM Brasil (que equipa o automóvel Opala 6 cilindros).

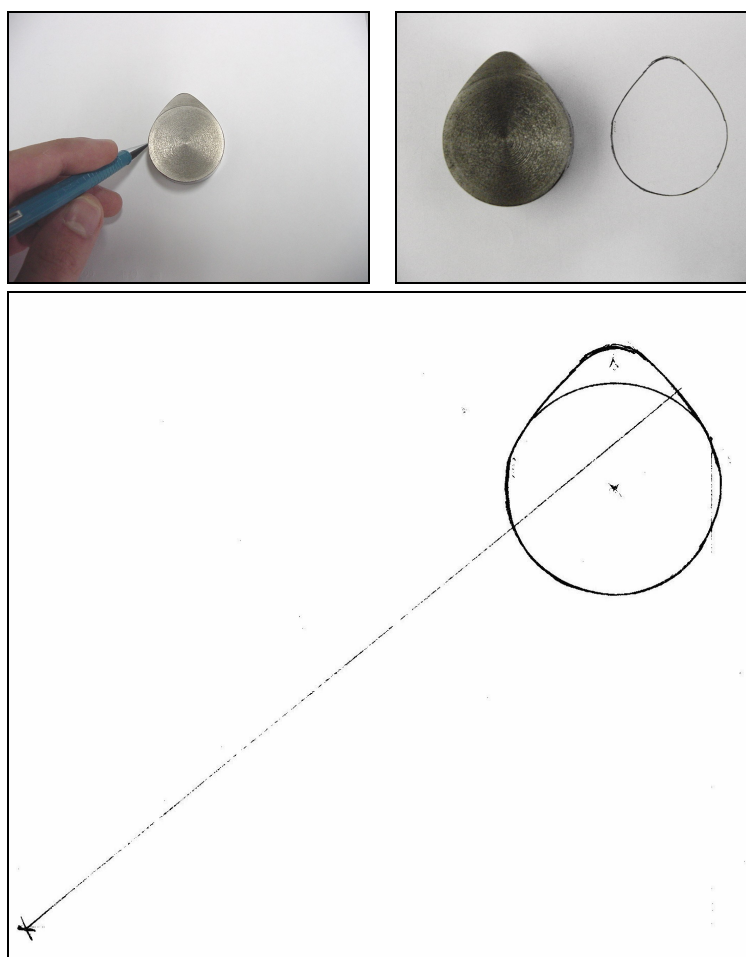


Figura 25 – Medição do raio de aceleração do came.

Conforme mostrado na figura 25, é utilizado um came seccionado do motor GM Brasil, para ter traçado seu perfil num papel. Com esse perfil obtido, mensura-se então o raio  $r_1$  do came: 141,5 mm. Fazendo uma proporção em relação ao diâmetro do eixo, obtém-se o valor de  $r_1$  a ser aplicado, conforme a equação 7:

$$\frac{r_{1,GM}}{D_{GM}} = \frac{r_{1,DSI11}}{D_{DSI11}} \quad (7)$$

Onde:  $r_{1,GM}$  – raio de aceleração do came do eixo comando do motor GM=141,5mm.

$D_{GM}$  – diâmetro do eixo comando do motor GM = 36 mm.

$r_{1,DSI11}$  – raio de aceleração do came para o eixo comando do motor DSI 11.

$D_{DSI11}$  – diâmetro do eixo comando do motor DSI 11 = 48,2 mm

Da equação acima, temos  $r_{1,DSI11} = 189,5$  mm. Utiliza-se então esse valor para os cames de admissão e escape do motor DSI 11 otolizado, que é mais adequado para trabalhar no funcionamento com o gás natural, do que os valores originais.

Para obtenção do raio da ponta do came é utilizada a mesma regra de três, aplicando o raio  $r_2$  medido para o came do motor GM (6,5mm). Dessa relação se obtém, para o motor Scania,  $r_2 = 8,7$  mm.

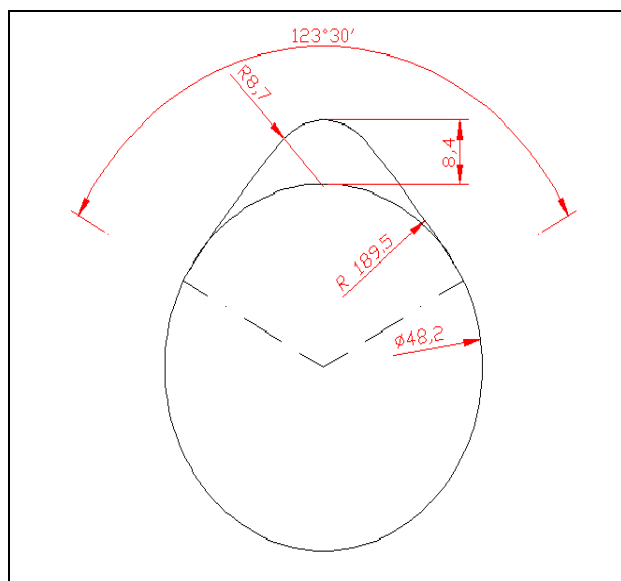


Figura 26 - Perfil do came de admissão para o DSI 11 Ottolizado [mm].

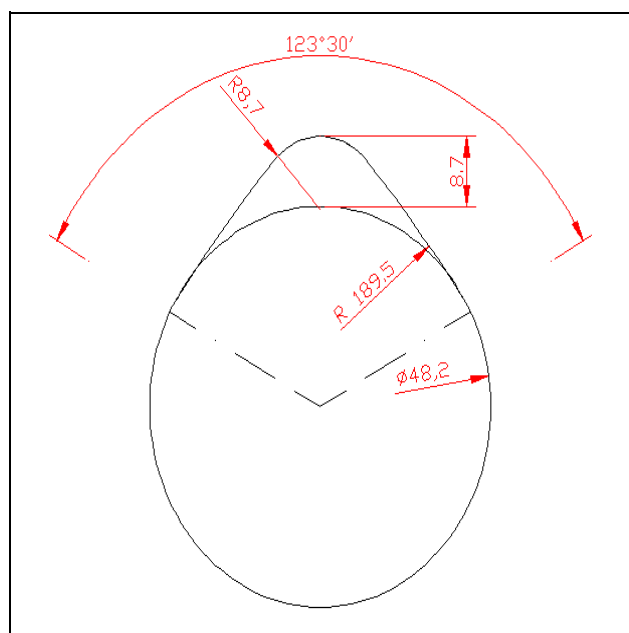


Figura 27 - Perfil do came de escape para o motor DSI 11 Ottolizado [mm].

### 6.3. Definição do Posicionamento dos Cames no Eixo Comando de Válvulas

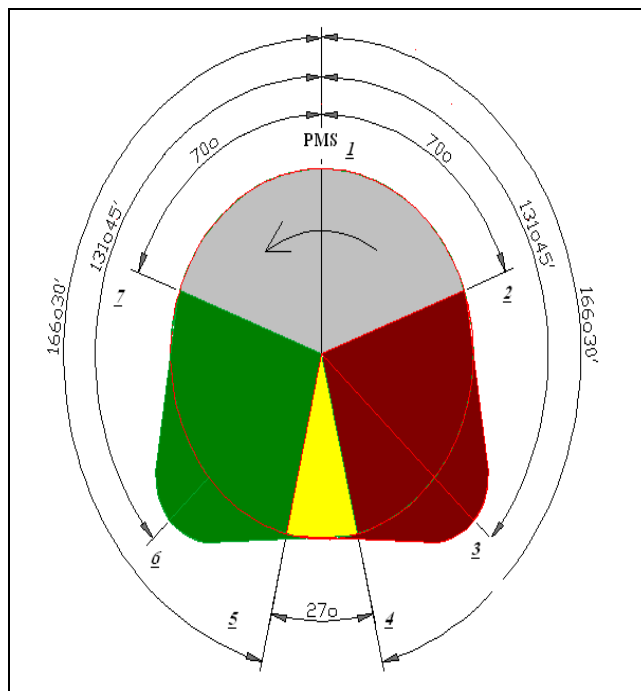


Figura 28 – Posicionamento dos cames de admissão e escape no eixo comando de válvulas.

Na figura 28 visualiza-se o posicionamento dos cames no eixo comando de válvulas. Em verde tem-se o came de admissão, em vermelho o came de escape, e em amarelo a intersecção dos dois cames, correspondendo ao cruzamento de válvulas.

De acordo com a configuração das engrenagens do motor Scania DSI 11, o eixo comando gira no sentido anti-horário, mesmo sentido do eixo virabrequim. Na lista abaixo está descrita uma volta completa do eixo comando, de acordo com a numeração da figura, representando um ciclo completo do motor (correspondentes a duas voltas do virabrequim):

- 1- Combustão: ponto do eixo comando correspondente ao pistão no ponto morto superior (PMS), na fase de combustão. Nessa fase as válvulas encontram-se fechadas.
- 2- Início da exaustão: após rotacionar  $70^\circ$ , correspondentes a  $140^\circ$  no eixo virabrequim (tempo de válvula de  $40^\circ$  antes do PMI), o came de escape inicia a abertura da válvula, liberando a saída dos gases.
- 3- Pico de exaustão: após rotacionar  $131^\circ45'$ , o came de escape encontra-se na posição vertical, acionando o tucho mecânico em sua amplitude máxima.
- 4- Início da admissão: após girar  $166^\circ30'$ , correspondentes a  $333^\circ$  do eixo virabrequim (tempo de válvula de  $27^\circ$  antes do PMS), o came de admissão inicia a abertura da válvula, liberando a entrada de mistura ar-combustível. Como a válvula de escape se mantém em fase de fechamento, nesse ponto se inicia o cruzamento de válvulas.
- 5- Fim da exaustão: rotacionando mais  $27^\circ$  no sentido anti-horário, termina a passagem do came de escape no acionamento do tucho mecânico, fechando por completo a válvula e encerrando a fase de escapamento. Encerra-se também o cruzamento de válvulas.
- 6- Pico de admissão: após girar mais  $34^\circ45'$  em relação ao ponto anterior, o came de admissão encontra-se na posição vertical, acionando o tucho mecânico em sua amplitude máxima.
- 7- Fim da admissão. Após rotacionar até o ponto onde o PMS encontra-se a  $70^\circ$  de sua posição inicial, termina a passagem do came de admissão no acionamento do tucho, fechando por completo a válvula e finalizando a fase de admissão.

Os cames referentes aos outros cilindros devem estar deslocados a  $60^\circ$  no sentido horário em relação aos cames do primeiro cilindro, de acordo com a seqüência de combustão do motor. Isso se deve ao fato das explosões ocorrerem num intervalo de  $120^\circ$  do eixo virabrequim, para motores de 6 cilindros.

Com essas medidas especificadas, tem-se toda a configuração do eixo comando de válvulas a ser fabricado para o motor Scania DSI 11 a gás natural. Logicamente, todas as outras medidas do eixo não descritas acima, devem ser as mesmas do eixo original do motor.

### 6.4. Fabricação do Eixo Comando

Para a fabricação do novo eixo comando utiliza-se como base o eixo original do motor DSI 11, visto que o custo para a fabricação de um eixo inteiramente novo torna-se proibitivo para um projeto específico como a conversão de um motor.

Assim, os novos cames são produzidos no eixo original através de soldagem TIG (solda por eletrodo de tungstênio) de alta dureza e resistência, que dispensa inclusive o tratamento térmico do eixo após o processo.

Após a soldagem, o eixo passa por um processo de retificação, onde a massa metálica referente ao came original é retirada, produzindo o perfil projetado anteriormente. Na figura 29 notamos, em imagem feita do eixo comando após o processo de soldagem e retífica, o perfil do came antigo (1) e o came novo (2).

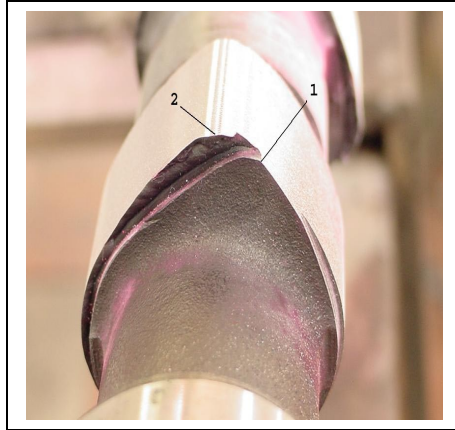


Figura 29 – O perfil do came original (1) e o novo came (2).

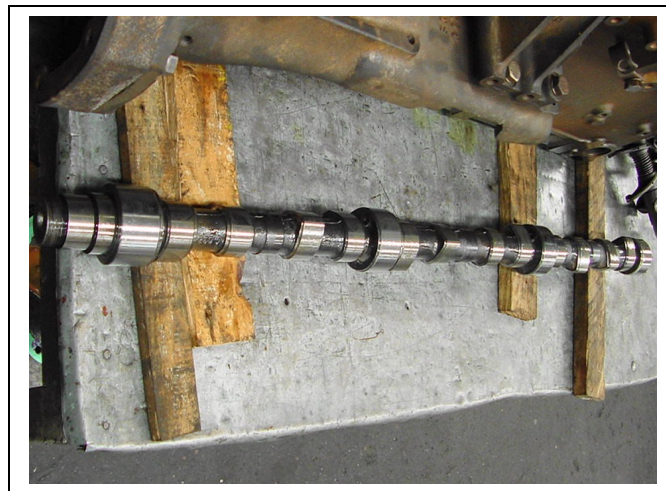


Figura 30 – O novo eixo comando de válvulas para o motor Scania

## 7. Sistema de Ignição Elétrica

Num motor de combustão interna, para que a mistura ar/combustível se inflame no interior do cilindro, produzindo assim a força mecânica que o movimenta, é preciso um ponto de partida. Nos motores diesel esse início da queima se dá pela injeção do combustível no ar comprimido no interior da câmara, o que o caracteriza como motor de ignição por compressão (ICO).

No motor ciclo Otto o início da queima se dá por uma faísca provocada pela vela de ignição, caracterizando-o como motor de ignição por centelha elétrica (ICE). Portanto, a parte fundamental do projeto de ottolização é a adaptação do sistema de ignição elétrica em substituição ao sistema de injeção de diesel na câmara de combustão do motor Scania DSI 11.

### 7.1. Funcionamento do Sistema de Ignição Elétrica.

A finalidade do sistema de ignição é gerar uma centelha nas velas, para que o combustível seja inflamado. Os sistemas de ignição utilizam diversos componentes que vêm passando por alterações no decorrer dos tempos.

A bateria, neste sistema, é a fonte primária de energia, fornecendo uma tensão de 12, 24 ou 36 volts. Essa tensão, por ser muito baixa, não pode produzir faíscas. Para que ocorra uma centelha é preciso que a eletricidade rompa a rigidez dielétrica do ar. O ar, em condições normais é um isolante, mas se a tensão elétrica gerada for muito elevada, essa característica isolante é vencida e uma centelha é produzida.

Para o ar seco, em condições normais, a rigidez dielétrica é da ordem de 10.000 volts por centímetros. Para o caso das velas de ignição convencionais (automotivas), uma faísca com menos de 0,5 cm é suficiente para inflamar a mistura, de modo que uma tensão da ordem de 4.000 volts é suficiente.

Para elevar a tensão da bateria são necessários dois componentes básicos: o controlador de ignição e a bobina.

A bobina de ignição é na realidade um transformador que possui enrolamentos de fios de cobre num núcleo de ferro. Ela possui como função elevar os 12 volts da bateria para uma tensão de até 20.000 volts, que são transmitidos para as velas.

O módulo de ignição, por sua vez, é responsável por transmitir a corrente elétrica para as bobinas, no tempo em que é solicitada, pelo ponto de ignição do motor em cada um dos cilindros.

O elo final da cadeia é formado por um conjunto de velas. Como já vimos, a finalidade das velas é produzir as faíscas que inflamam a mistura de ar com combustível no interior dos cilindros.

## 7.2. O Sistema de Ignição do Scania DSI 11 Ottolizado

Para especificação do sistema de ignição do projeto de ottolização contamos com o apoio da Woodward, empresa especializada no fornecimento de equipamentos para motores de grande porte.

O sistema completo de ignição conta com os seguintes equipamentos a serem fornecidos pela Woodward:

- Controlador de ignição IC-100
- Sensor de fase
- Disco de fase
- 6 bobinas
- Cabos de alta e baixa tensão para as bobinas

## 7.3. Controlador de Ignição IC-100

O controlador de ignição IC-100 da Woodward é um equipamento dotado de um microprocessador que é responsável pela distribuição da corrente elétrica para cada uma das bobinas do motor, no momento exato em que são programadas, de acordo com o ponto de ignição determinado para o motor. O sistema é capaz de suprir motores de 1 a 8 cilindros.

Com esse equipamento é possível programar o ponto de ignição desejado, até 38° antes do ponto morto superior. Permite também estabelecer diferentes curvas de avanço de acordo com a rotação do motor, sendo totalmente configurável por computador, através de porta serial, ou mecanicamente por chave seletora.

O controlador capta o sinal elétrico de um sensor de fase magnético (*pick-up*) ligado a um disco de fase (roda com 7 furos) conectado à engrenagem do eixo comando ou do eixo virabrequim. Com a passagem dos furos pelo sensor, o controlador calcula o momento exato para transmitir a corrente para a bobina correta, que, conectada à saída do controlador, transformará a corrente de baixa para alta tensão, para gerar a centelha no eletrodo da vela de ignição.

### 7.3.1. Disco de Fase

Para funcionamento do controlador de ignição é fundamental a fabricação e instalação de um disco de fase conectado ao motor. Esse disco deve ter diâmetro mínimo de 100 mm, e deve ser furado em 7 posições determinadas (o número de furos deve ser sempre uma unidade a mais que o número de cilindros), de acordo com a recomendação da Woodward.

A função do disco é produzir um sinal elétrico, a ser enviado para o controlador, por meio de um sensor magnético, que, quando da passagem do furo, provoca alteração no campo magnético do mesmo.

O disco pode ser instalado de duas maneiras:

- No virabrequim: é o local adequado para motores que requerem uma ignição por cilindro para cada rotação do motor, como os motores dois tempos.
- No eixo comando de válvulas: é o local adequado para motores que requerem uma ignição por cilindro a cada duas rotações do motor, como os motores quatro tempos.

Essa diferença de configuração se deve basicamente a relação de 2:1 entre as rotações do eixo virabrequim e do eixo comando de válvulas. No Scania DSI 11, o disco de fase deve ser instalado na engrenagem do eixo comando.

#### 7.4. Ponto de Ignição

Com o sistema de ignição especificado para o Scania DSI 11 otolizado, torna-se necessário avaliar qual é o ponto de ignição ideal, a ser ajustado no controlador de ignição, para o funcionamento do motor.

O ponto de ignição nada mais é que o momento no qual ocorre a centelha na vela, provocando o início da combustão. O ponto é especificado em graus medidos antes ou após o ponto morto superior do pistão.

De um modo geral, o ponto ideal deve considerar a velocidade de queima da mistura ar/combustível, e a rotação do motor, de modo que a frente de chama atinja a cabeça do pistão no momento em que o mesmo se encontra no ponto morto superior. Esse ponto corresponde ao de máximo torque do motor (*MTB-maximum brake torque timing*). Esse ponto também é o de maior potência e o de menor consumo específico de combustível. Todavia, o mesmo só pode ser medido com precisão em testes com dinamômetro.

Na teoria, motores a gás natural, por terem uma mistura ar/combustível mais pobre que os motores a gasolina (mais ar na mistura), por exemplo, requerem um maior avanço no ponto de ignição. Na figura 31, notamos a relação entre a mistura ar/combustível e ponto de ignição ideal, e como o avanço aumenta para misturas mais pobres ( $\lambda > 1$ ), para diferentes valores de corrente elétrica.

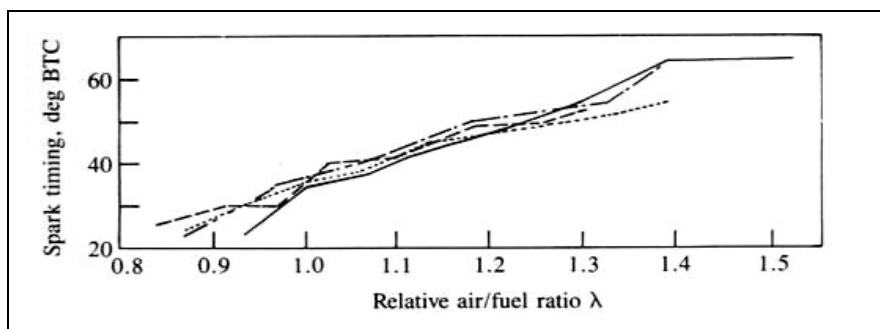


Figura 31 – Relação entre o ponto de ignição e a mistura ar/combustível para motores Otto.

Fonte: Heywood.

#### 7.5. Preparação do Cabeçote

Para um projeto de otolização torna-se primordial a adaptação da vela de ignição no cabeçote do motor. A vela deve ser instalada no cabeçote do motor, na posição ocupada originalmente pelo bico injetor. Por ser estruturalmente conveniente, sendo necessário basicamente a usinagem de alojamento e rosca para abrigar a vela, e por manter as características de combustão semelhantes, visto que a frente de chama se originará do mesmo ponto na câmara.

Na figura 32 observa-se o corte transversal do cabeçote do motor Scania DSI11. Em vermelho, no centro, está o alojamento original do bico injetor que abrigará a vela de ignição conforme indicado. E em azul estão os canais de refrigeração do cabeçote.

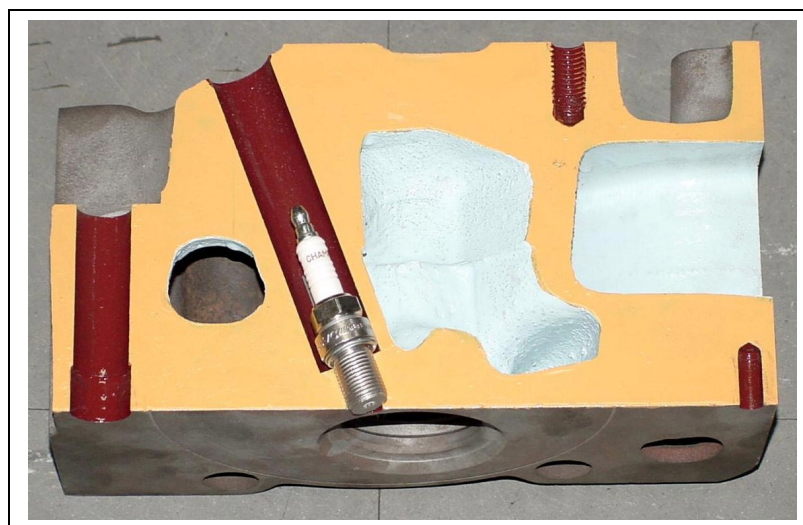


Figura 32 – Corte transversal do cabeçote do motor Scania DS 11.



O trabalho a ser feito para preparação do cabeçote consiste em duas operações de usinagem. A primeira trata-se da abertura do alojamento do bico injetor para que o mesmo seja capaz de abrigar a vela, e também um soquete sextavado, para colocação e retirada da mesma. A segunda consiste na abertura da rosca da vela no compartimento mais estreito do alojamento.

Analisando as medidas do alojamento, torna-se necessário retirar a menor quantidade de metal possível, visto que a parede para o canal de refrigeração é estreita. A usinagem de um diâmetro muito grande acarretaria no estreitamento excessivo da parede do alojamento, baixando a resistência do cabeçote e possibilitando o aparecimento de trincas no mesmo. Para não alterar de maneira indevida a estrutura do cabeçote, é necessário encontrar no mercado uma vela de tamanho reduzido para o motor.

Na figura 33 pode-se notar as medidas do alojamento, que apresenta 10 mm diâmetro na sua base e 21 mm de diâmetro na parte superior. Essas medidas são de suma importância pois determinarão o diâmetro da rosca e a medida do sextavado para a vela que equipará o motor. O cabeçote apresenta 5 mm de espessura de parede entre o alojamento do bico e o canal de refrigeração. Essa medida será o fator limitante na usinagem, pois a mesma não pode sofrer grandes alterações.

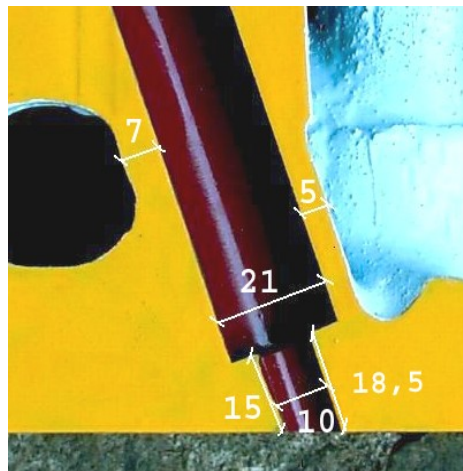


Figura 33 – Medidas do alojamento do bico injetor original [mm].

Segundo a tabela da figura 34, da fabricante NGK, existem velas com rosca de 12 mm, ideal para o furo de 10 mm original do bico injetor, visto que não necessitaria a abertura de um furo maior para abrigar a vela.

	Diâmetro da rosca	Medida do Hexágono
A	18mm	25.4mm
B	14mm	20.8mm
C	10mm	16.0mm
D	12mm	18.0mm
E	8mm	13.0mm
G	PF 1/2	23.8mm
J	12mm	18.0mm
AB	18mm	20.8mm
BC	14mm	16.0mm
BK	14mm	16.0mm
DC	12mm	16.0mm

	Comprimento da Rosca
E	19.0mm
H	12.7mm
L	11.2mm
EH	Medida da rosca Total: 19.0mm Rosca: 12.7mm
F	Tipo assento cônico Tipo A-F 10.5mm Tipo B-F 11.2mm Tipo B-Ef 17.5mm

Figura 34 – Tabela de especificação das medidas principais das velas de ignição

Fonte: NKG.

Analisando a medida da maior espessura da base do alojamento, de 18,5 mm define-se o comprimento da rosca da vela de 19 mm. Com essa medida, a vela ficará com a sua parte inferior contida na câmara de combustão: 0,5 mm do lado direito e 4 mm do lado esquerdo. Essa configuração é preferível em relação ao comprimento da rosca de 12,7 mm, porque, a utilização dessa segunda medida de vela ocasionaria o início da queima da mistura praticamente no interior do alojamento do bico injetor, podendo ocasionar trincas e perda de resistência na face do cabeçote.

Para a parte superior do alojamento, que possui 21 mm de diâmetro, o dado a ser considerado é a medida do hexágono da vela a ser aplicada no motor. Além de abrigar o sextavado essa área do cabeçote deve apresentar folga suficiente para a entrada de um soquete, para instalação e desmontagem da vela de ignição. Nesse caso, a menor medida possível é desejada para o hexágono da vela, o que demandaria uma menor retirada de material do alojamento, ou até mesmo, dependendo da medida do soquete, dispensaria a usinagem do alojamento, preservando a resistência da parede do mesmo.

Para uma rosca de 12 mm, nota-se na tabela que a menor medida de sextavado é de 16 mm, na especificação DC para velas NGK, definindo assim a medida da vela a ser aplicada.

Após consulta ao catálogo de ferramentas da fabricante Gedore, foi encontrada a medida do menor soquete para sextavado de 16 mm. Trata-se de um soquete estriado longo, cujo diâmetro externo é de 22,5 mm. Considerando mais uma folga de 0,5 mm para a movimentação do soquete no alojamento, temos um diâmetro total de 23 mm.

Para preservar a resistência do cabeçote optou-se então pela usinagem do soquete. Com isso, é possível adaptá-lo para o trabalho na medida original do alojamento, de 21 mm. O soquete sofre então torneamento de 22,5 mm para 20,5 mm, mantendo a medida original do alojamento do bico injetor no cabeçote.

Essa medida, além de manter a resistência do cabeçote, torna a operação mais simples, pois apenas um soquete para vela de ignição é usinado em substituição à usinagem dos seis alojamentos de bico injetor do motor.

Com base nesses cálculos, são definidas as alterações a serem feitas para preparação do cabeçote na adaptação do sistema de ignição elétrica:

-Adoção da vela de ignição com especificação DC (NGK) para equipar o motor, ou outra similar com 12 mm de rosca e 16 mm de sextavado. O comprimento da rosca deve ser de 19 mm.

-Adoção de soquete estriado longo de sextavado 16 mm, da marca Gedore, com 22,5 mm de diâmetro externo, ou outro similar de menor medida.

-Abertura de rosca de 12 mm em toda a extensão da base dos alojamentos dos bicos injetores (diâmetro original de 10 mm).

-Torneamento do soquete para 20,5 mm de diâmetro.

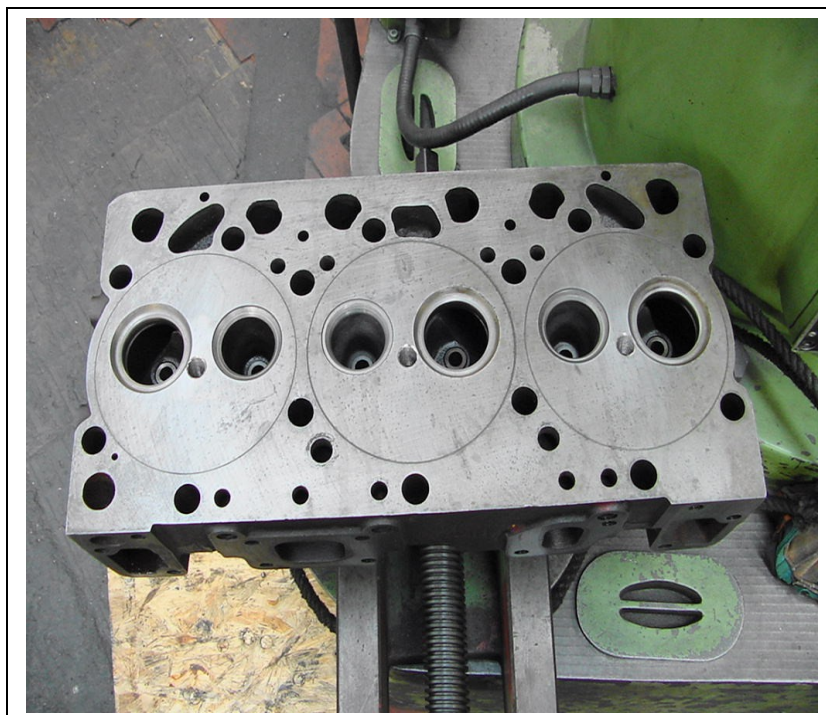


Figura 35 – Cabeçote do motor Scania DSI 11 com roscas usinadas.

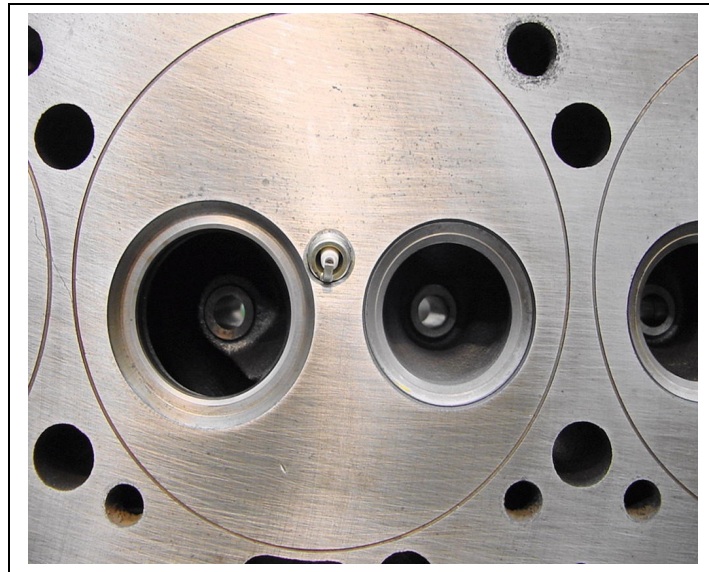


Figura 36 – Vela de ignição instalada no cabeçote.

## 7.6. Vela de Ignição

A vela tem tradicionalmente duas funções num motor Otto: provocar ignição da mistura e remover calor da câmara de combustão. A temperatura da vela tem que ser fria o suficiente para prevenir a pré-ignição e quente o bastante para prevenir o acúmulo de depósitos na mesma, o que provocariam falhas. A essa característica de remover calor da câmara denominamos de grau térmico, que é determinado pelo comprimento do isolante de cerâmica central e sua habilidade de absorver e transmitir calor. Portanto, uma vela fria tem um isolador mais curto e absorve mais calor da câmara. Esse calor é dissipado mais rapidamente, permitindo que a vela trabalhe a uma temperatura mais baixa.

Para o motor a gás natural, é desejável a utilização de uma vela fria. Por ser um combustível de maior poder calorífico que o Diesel, o gás natural libera mais calor em sua combustão. Essa característica, aliada a alta compressão do motor, torna a câmara de combustão mais quente. Com isso, a vela deve dissipar o calor o mais rapidamente possível para que não ocorra o surgimento de pontos quentes no eletrodo, o que causaria pré-ignição da mistura.

Todavia, como o aporte de calor no motor convertido a gás não pode ser avaliado teoricamente, o grau térmico ideal para a vela de ignição do motor Scania DSI 11 otolizado deve ser determinado através de testes de funcionamento em dinamômetro.

## 8. O Sistema de Alimentação

O sistema de alimentação é aquele na qual ocorre o maior número de modificações numa conversão dedicada. Na otolização, o motor passa a funcionar exclusivamente com gás natural, dispensando por completo o uso de óleo diesel. Com isso, abdica-se de todas as peças do circuito de alimentação original do motor, tais como bomba injetora, filtro de óleo, bicos injetores e etc.

Em substituição a esse circuito se utilizará o sistema de alimentação do gás natural no motor. Esse novo sistema apresenta muitas diferenças em relação ao original, primeiramente por trabalhar com um combustível no estado gasoso, e também pelo fato de, ao invés de ser injetado diretamente na câmara de combustão, como o óleo diesel, esse combustível passará a formar mistura com o ar no coletor de admissão, característica dos motores ciclo Otto.

### 8.1. O Misturador

O misturador é o dispositivo mais tradicional de alimentação a gás natural, e equipa atualmente a maioria dos automóveis convertidos a gás natural. Trata-se de um venturi para passagem do ar, que possui furos distribuídos por seu diâmetro, por onde o gás é injetado. Alguns modelos também possuem barras cruzadas no venturi (figura 37), com furos, para que uma melhor mistura com o ar seja formada. A entrada do gás pode ser controlada através de um motor de passo, uma válvula borboleta controlada eletronicamente, ou através de um parafuso ajustado mecanicamente para motores estacionários. Os misturadores são especialmente dimensionados para cada modelo de motor.



Figura 37 – Misturador de gás natural.

Fonte: Woodward.

## 8.2. Sistemas de Alta e Baixa Pressão

Existem dois tipos básicos de sistemas de alimentação a gás natural: os de alta pressão e os de baixa pressão.

### 8.2.1 - Sistema de Alta de Pressão (Veicular)

Os sistemas de alta pressão são aqueles adotados em motores veiculares, que necessitam da estocagem do gás natural em cilindros de alta pressão.

O gás natural tem uma densidade energética mais baixa que os combustíveis líquidos, ou seja, para uma mesma quantidade de energia, o gás ocupa um volume maior a pressão ambiente. Esse fator traz complicações quando o mesmo deve ser armazenado em tanques, o que torna necessário a sua compressão em cilindros de alta pressão (200 bar).

O circuito de alimentação precisa então reduzir toda essa pressão elevada do gás contido no cilindro, para que o mesmo seja misturado ao ar a baixas pressões (menores que a atmosférica). Desse modo, o sistema deve ter três válvulas redutoras de pressão do gás:

- 1º estágio: redução de pressão do gás natural de 200 bar para 7 bar.
- 2º estágio: redução de pressão do gás natural de 7 bar para 3 bar.
- 3º estágio: redução de pressão do gás natural de 3 bar para valores próximos a zero.

No primeiro estágio, a grande redução de pressão provoca uma queda brusca na temperatura do gás, ocasionando risco de formação de gelo. Assim, torna-se necessário uma circulação de água quente, proveniente do circuito de refrigeração do motor pelo redutor de pressão, o que evita a cristalização de água.

No terceiro estágio, o gás tem sua pressão reduzida a valores abaixo da pressão atmosférica, sendo esse admitido pelo coletor devido à depressão formada pelo deslocamento dos pistões, quando a válvula de admissão se encontra aberta.

Na saída do cilindro de alta pressão, há uma válvula de abastecimento, que recebe o gás natural comprimido para estocagem.

A autonomia do sistema depende basicamente do motor a ser alimentado e da quantidade de cilindros que armazenarão o gás natural. Todavia, esse sistema não é indicado para motores estacionários, pois o mesmo demandaria a adoção de grande quantidade de cilindros, além de necessitar ser abastecido constantemente.

### 8.2.2 - Sistema de Baixa Pressão (Estacionário)

O sistema de baixa pressão é o mais apropriado para alimentação de motores estacionários. Nele, o motor passa a ser alimentado pelo gás natural canalizado, fornecido pela companhia distribuidora de gás.

Devido à baixa pressão do gás canalizado, já que o mesmo não necessita ser comprimido, esse sistema dispensa grande parte das peças adotadas no sistema de alta pressão, como cilindros de alta pressão, válvulas de abastecimento e válvulas redutoras de alta pressão, o que torna esse sistema mais barato.

Outro detalhe interessante desse sistema está na ausência abastecimento periódico de combustível. Ao contrário dos motores estacionários a diesel, ou a gás natural comprimido, o motor alimentado a gás canalizado dispensa toda a logística necessária para o suprimento periódico de combustível, o que o torna extremamente interessante para a geração de energia.

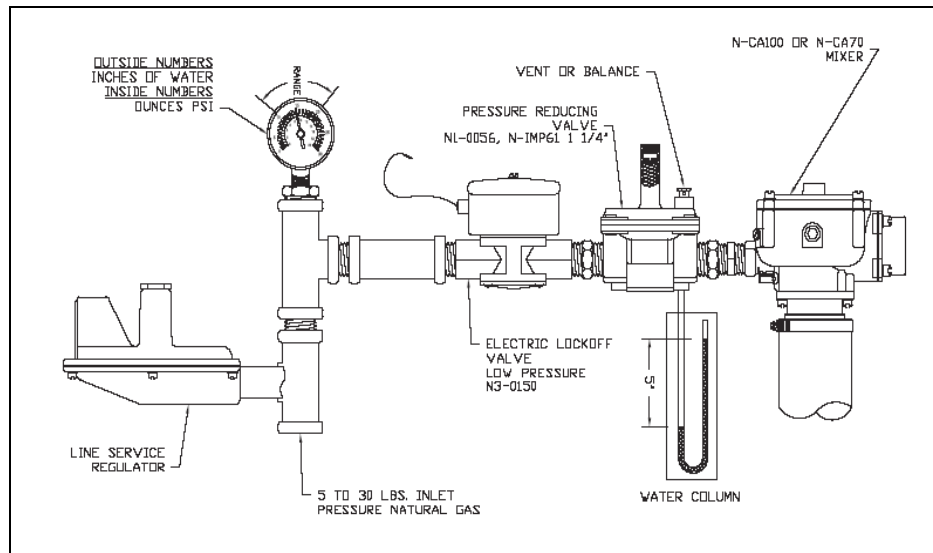


Figura 38 – Linha de alimentação para gás natural canalizado (baixa pressão).

Fonte: Catálogo Woodward.

Conforme descrito na figura 38, a linha de alimentação é conectada em sua extremidade ao duto de alimentação de gás natural, proveniente do sistema instalado pela companhia fornecedora de gás. Após essa conexão, instala-se um manômetro para controle da pressão de entrada do combustível.

O gás é então dirigido a uma válvula de desligamento (*lockoff*) que fecha o abastecimento de gás em caso de parada do motor. Após essa válvula encontra-se o redutor de baixa pressão, que reduz a pressão inicial do gás, que varia de acordo com as condições de fornecimento estabelecidas pela companhia fornecedora de gás natural. Essa pressão pode ter valores de 0,3 a 2 bar, e é reduzida para 0,012 bar (5" de coluna d'água).

Com isso, o misturador é alimentado com gás à pressão baixa. A mistura ar/combustível é formada então no venturi pela depressão no coletor de admissão, formada pelo deslocamento dos pistões no motor e pela sucção da turbina.

Por ser o sistema mais vantajoso na aplicação em motores estacionários, é a opção adotada na alimentação do Scania DSI 11 otolizado.

### 8.3. Sistema de Controle de Velocidade

A aceleração num motor ciclo diesel é controlada basicamente pela injeção de óleo, através da bomba injetora. Quanto maior for a carga, maior quantidade de combustível é injetada na câmara de combustão.

Nos motores ciclo Otto, a aceleração é controlada pela quantidade de mistura ar/combustível admitida pelos cilindros, através do corpo de borboleta do acelerador. Esse dispositivo nada mais é do que uma válvula ligada a um venturi, que abre e fecha de acordo com as necessidades do motor, controlando a entrada de mistura.

Em cargas elevadas, a borboleta encontra-se na posição horizontal, permitindo a passagem da vazão máxima de mistura. Já em baixas velocidades, a borboleta restringe a passagem, permitindo a admissão de pequena quantidade de mistura ar/combustível.

Com isso, se torna necessário a adoção de uma válvula borboleta para controle de velocidade, ligada a um atuador eletrônico, no circuito de alimentação do motor Scania DSI 11 otolizado, após o misturador de gás natural.

#### 8.3.1. Controlador Digital de Velocidade

Para o controle da válvula borboleta, o motor a gás natural contará com um sistema digital SG2D, da fabricante Woodward. Esse equipamento conta com um módulo eletrônico conectado a um atuador elétrico ligado ao corpo de borboleta. O módulo colhe informações recebidas através de um sensor *pick-up* magnético (indutivo) ligado ao eixo virabrequim para medição da velocidade do motor. Com base nessa informação, o módulo ajusta o posicionamento da borboleta para obtenção da velocidade desejada.

O módulo possui display digital e botões frontais para regulagem da velocidade de trabalho do motor, e configuração de rampas de aceleração, ajuste de proteção de sobre-velocidade e limite máximo de combustível.

O ajuste da velocidade também pode ser feito via PC, conectado por cabo serial ao módulo de controle de velocidade.

#### 8.4. Sistema de Controle de Mistura Ar/Combustível

O controle eletrônico da mistura ar/combustível utiliza uma válvula borboleta ligada a um atuador, semelhante àquela do controlador de velocidade, na linha de alimentação do gás, controlada por um módulo eletrônico (figura 39).

O módulo é conectado à sonda lambda e recebe desta os sinais elétricos indicativos dos teores de oxigênio da mistura. Com base nesses sinais, o módulo automaticamente executa a abertura ou o fechamento da válvula borboleta, até que o sinal recebido da sonda lambda seja referente à mistura estequiométrica. Esse sistema é semelhante ao controle de mistura dos motores veiculares equipados com injeção eletrônica de combustível. Sendo que, nesse caso, ao invés de bicos injetores, é uma válvula borboleta que controla a passagem do gás natural para o misturador que formará a mistura com o ar.

O corpo de borboleta é então dimensionado para, quando o motor estiver em rotação máxima e a válvula estiver totalmente aberta, a quantidade de gás natural liberada seja capaz de formar uma mistura estequiométrica com o ar à vazão máxima.

Esse sistema é comumente chamado de controle de circuito fechado (*close loop*), pois a mistura é controlada sem interferência externa. O fato de o ajuste ser realizado automaticamente, no ponto estequiométrico, se reflete em grande economia de combustível, além de ser o sistema ideal para futura instalação de catalisador de três vias no sistema de escape, conforme visto no capítulo 4. O conjunto desse sistema com o catalisador possibilita o melhor tipo de conversão para monóxido de carbono e óxidos de nitrogênio.



Figura 39 – Atuador eletrônico ligado a um corpo de borboleta para controle de mistura.

Fonte: Catálogo Woodward [14].

#### 8.5. Dimensionamento do Sistema de Alimentação

O dimensionamento do sistema de alimentação do Scania DSI 11 a gás natural foi realizado com o apoio da Woodward, empresa especializada na produção de kits de alimentação de gás natural para motores de grande porte.

Como ponto de partida para o dimensionamento e especificação das peças, deve-se calcular a vazão de mistura ar/combustível necessária para alimentar o motor à rotação de trabalho.

Calcula-se a vazão em CFM (*cubic feet per minute*), para motores turbinados:

$$\text{CFM} = (\text{CID} \times \text{RPM}) \times \text{P}_{\text{adm}}/\text{P}_{\text{atm}} \times 1 / 1728 / 2$$

$$\text{CFM} = \frac{(672,5 \times 1800) \times 1,7}{1728 \times 2} = 595,4 \text{ ft}^3/\text{min} = 16,8 \text{ m}^3/\text{min}$$

Onde:

CFM – Fluxo de mistura ar/combustível admitida [ $\text{ft}^3/\text{min}$ ]

CID – Volume total do motor [ $\text{in}^3$ ] = 672,5  $\text{in}^3$

RPM – regime de trabalho em rotações por minuto = 1800 rpm.

$\text{P}_{\text{adm}}/\text{P}_{\text{atm}}$  – Razão entre as pressões de saída e entrada da turbina do motor. Onde a pressão do turbo é igual a 0,7 bar.

Na equação, temos que, a pressão de admissão é aquela medida no coletor, após a turbina. Ela equivale a soma das pressões atmosférica (1 bar) e a do turbo (0,7 bar). Essa razão de pressão é responsável pelo acréscimo de vazão de admissão nos motores turbinados.

No cálculo da vazão de mistura, o valor é dividido por dois para motores quatro tempos. Isso porque a admissão ocorre nos cilindros a cada duas voltas do eixo virabrequim. Assim, para a rotação de trabalho (1800 rpm), ocorrem 900 admissões por minuto, para cada cilindro.

A vazão de 16,8 m<sup>3</sup>/min equivale à quantidade máxima de mistura ar/combustível admitida para a rotação de trabalho do motor estacionário. Para obter a vazão do gás natural, que deve ser suprida pelo sistema de alimentação a essas condições, aplicamos a razão ar/combustível volumétrica estequiométrica para o combustível:

$$\frac{A/C_{vol}}{V_{GN}} = \frac{V_{ar}}{V_{GN}} = 9,5 \quad (8)$$

$$V'_{GN} = \frac{(CFM - V'_{GN})}{9,5} \quad (9)$$

$$V'_{GN} = \frac{CFM}{10,5} = 56,7 \text{ ft}^3/\text{min} = 1,6 \text{ m}^3/\text{min}$$

Onde:

$A/C_{vol}$  – Relação ar/combustível volumétrica estequiométrica do gás natural.

$V_{ar}$  – volume de ar.

$V_{GN}$  – volume de gás natural

$V'_{GN}$  – vazão de gás natural.

Assim, todo o circuito de alimentação de gás natural para o motor DSI 11 otolizado deve ser dimensionado para funcionar a vazão de 1,6 m<sup>3</sup>/min.

Esse valor equivale ao consumo máximo de gás natural do motor por minuto.

### 8.5.1. Misturador do Motor Scania

O misturador para alimentação do motor Scania DSI 11 é dimensionado com base nos seguintes dados:

- Vazão máxima de mistura ar/combustível: 16,8 m<sup>3</sup>/min
- Vazão máxima de gás natural: 1,6 m<sup>3</sup>/min
- Cilindrada do motor: 11,02 litros
- Potência estimada do motor: 231 kW
- Rotação de trabalho do motor: 1.800 rpm

Essas informações são então inseridas em um programa de computador, de propriedade da Woodward, que, baseado em cálculos matemáticos, nos dá como resultado a geometria do misturador ideal para alimentar o motor. São obtidos dados como: diâmetro do venturi, número de barras transversais misturadoras (podendo ter de zero a três barras), número e diâmetro dos furos de injeção de gás natural. Para o Scania DSI 11 otolizado, foram obtidas as seguintes dimensões:

- Diâmetro do venturi - 82 mm
- Número de barras transversais misturadoras - 2 barras cruzadas (cross) de 16 mm de espessura.
- Furos de injeção de gás natural – 36 furos de 2 mm de diâmetro.

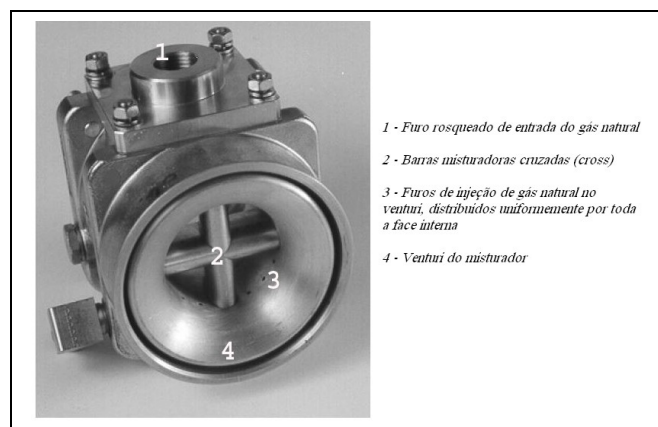


Figura 40 – Misturador Woodward com barras cruzadas (cross).

Na figura 40, temos um misturador de barras misturadoras cruzadas, com configuração semelhante ao especificado para o motor Scania. Os furos de injeção são dispostos diametralmente no corpo do misturador, e nas barras cruzadas, conforme dimensionamento do programa, para otimizar a formação da mistura ar/combustível. A entrada do gás natural se dá pelo furo rosqueado na parte superior do misturador.

### 8.5.2. Válvula Reguladora de Pressão Zero

A válvula reguladora é a responsável pela redução da pressão do gás natural proveniente da linha de abastecimento. Esse gás é fornecido pela companhia distribuidora a uma pressão de até 1 bar, podendo ser alterado esse valor, de acordo com as condições de fornecimento estabelecidas.

Todavia, o gás que alimenta o misturador deve estar a pressões baixas, bem próximas a zero, para que o sistema tenha capacidade de admitir o gás por sucção, já que o ar se encontra a pressão baixa, devido a depressão formada no coletor de admissão, quando a válvula de admissão do motor encontra-se aberta e o pistão está em curso descendente no cilindro ou pela sucção da turbina.

Assim, essa válvula redutora é chamada de ‘zero’ pois é destinada a reduzir, a valores mínimos, a pressão de entrada do gás. A pressão máxima de entrada na válvula é de 5 psig (0,340 bar).

Segundo dimensionamento em conjunto com a Woodward, para o sistema de alimentação do Scania DSI 11 a gás natural, tem-se:

- Modelo da válvula redutora: 210D

- Diâmetro do tubo do circuito do gás: 1”

Para cálculo da pressão de saída da válvula, correspondente àquela na qual o gás será misturado com o ar, devemos calcular a vazão horária de gás natural do sistema em CFH (*cubic feet per hour*), que equivale a:

$$CFH = 60 \times V'_{GN} = 60 \times 56,7 = 3402 \text{ ft}^3/\text{h} \quad (10)$$

Com base nesse valor, consultamos a tabela 11, que especifica a pressão de saída da válvula para o modelo selecionado (210D 1”). Como dados de entrada temos a pressão de entrada da linha do gás (*Inlet Pressure* - até 5 psi, para o modelo selecionado) e a vazão horária de gás natural (da ordem de 3500 CFH). Como pressão de saída a tabela nos fornece 2 polegadas de coluna d’água (0,005 bar).

Assim, o gás natural para alimentação do Scania DSI 11 otolizado formará mistura com o ar no misturador a uma pressão de 0,005 bar.

Tabela 11 – Cálculo da Pressão de Saída da Válvula Reguladora de Gás.

Inlet Pressure	Outlet Pressure - Inches w.c.								
	2	4	6	9	12	16	20	24	28
<b>210D 1”</b>									
8.0" w.c.	2,400	1,900	1,300						
0.5 psi	3,400	3,100	2,700	2,200					
0.75 psi	3,500	4,000	3,800	3,400	2,900	2,200			
1.0 psi	3,500	4,000	4,500	4,300	3,900	3,400	2,700	1,900	
1.5 psi	3,500	4,000	4,500	4,800	4,800	5,000	4,600	4,100	3,600
2.0 psi	3,500	4,000	4,500	4,800	4,800	5,000	5,000	5,000	5,000
3.0 psi	3,500	4,000	4,500	4,800	4,800	5,000	5,000	5,000	5,000
5.0 psi	3,500	4,000	4,500	4,800	4,800	5,000	5,000	5,000	5,000
7.5 psi	3,500	4,000	4,500	4,800	4,800	5,000	5,000	5,000	5,000
10.0 psi	3,500	4,000	4,500	4,800	4,800	5,000	5,000	5,000	5,000

Fonte: Catálogo Woodward.

### 8.5.3. Controlador de Velocidade

O sistema dimensionado para o Scania DSI 11 otolizado, com apoio da Woodward, conta com o controlador digital SG2D-T. Conforme visto na seção 8.3, a responsabilidade desse sistema é manter a rotação constante programada, no caso 1800 rpm, conforme haja aplicação ou retirada de carga no motor.

Para medição da rotação do motor, o sistema eletrônico deve contar com um sensor magnético de velocidade (*pick-up*), instalado na engrenagem do motor, que converte o movimento dos dentes em sinal elétrico, a ser enviado para o controlador SG2D-T. Quando o material magnético dos dentes da engrenagem atravessa o campo magnético do sensor, é gerada uma voltagem. A frequência dessa voltagem é então medida pelo controlador digital.

A rotação medida é comparada com a rotação desejada, e, caso necessário, o controlador aciona o atuador elétrico do corpo de borboleta, admitindo uma maior ou menor quantidade de mistura para o motor, afim que se alcance a velocidade especificada inicialmente.

O corpo de borboleta dimensionado pela Woodward, com base na vazão máxima de mistura ar/combustível do Scania DSI 11 (vazão de 594,5 ft<sup>3</sup>/min) tem diâmetro de 68 mm.



Assim, temos que o sistema de controle de velocidade deve contar com os seguintes equipamentos fornecidos pela Woodward:

- Controlador Digital de Velocidade SD2G-T
- Sensor de Velocidade
- Atuador Elétrico com Corpo de Borboleta Integrado Flo-Tech™ (68 mm)
- Conectores Elétricos

#### 8.5.4 - Controlador de Mistura Ar/Gás Natural

Conforme descrito na seção 8.4, a mistura ar/combustível do motor a gás natural pode ser feita eletrônica ou mecanicamente.

Para o controle eletrônico da mistura ar/combustível do motor Scania DSI 11 otolizado, utiliza-se o módulo eletrônico ST-3, da Woodward. O aparelho é conectado à sonda lambda, ligada ao coletor de escapamento, e recebe desta os sinais elétricos referentes aos teores de oxigênio da mistura. Como o motor funcionará com mistura estequiométrica, o mesmo é calibrado para ler uma voltagem do sensor, de 0,7 a 0,8 volts.

O módulo ST-3 apresenta display luminoso indicando a relação ar/combustível do motor, e é ligado ao atuador integrado ao corpo de borboleta para controle de mistura da Woodward, o qual regulará a entrada de gás natural para o misturador, até que se obtenha uma mistura estequiométrica, indicada no display do módulo eletrônico pela cor verde.



Figura 41– Módulo ST-3 da Woodward.

Fonte: Catálogo Woodward.

O corpo de borboleta para controle da mistura é então dimensionado, com o apoio da Woodward, baseado nos valores já definidos anteriormente para vazão de gás natural e de mistura ar/combustível do motor Scania, com 30 mm de diâmetro.

Com a atuação do controlador de mistura em conjunto com o corpo de borboleta dimensionado para a linha de alimentação do gás natural, a mistura estequiométrica é obtida automaticamente para qualquer regime de rotação do motor Scania DSI 11 otolizado.

As peças que compõem o sistema de controle de mistura ar/gás natural do motor Scania DSI 11 são as seguintes:

- Controlador de Mistura ST-3
- Atuador Elétrico com Corpo de Borboleta Integrado L-Series de 30 mm
- Sonda Lambda
- Conversor para Aquecimento da Sonda Lambda
- Conectores Elétricos para os Equipamentos

#### 8.6. Circuito de Alimentação

Com o sistema de alimentação dimensionado, deve-se esquematizar o circuito de alimentação para instalação no motor (figura 42). Como o projeto foi definido para trabalhar com gás natural à baixa pressão (gás canalizado), e por ser o DSI 11 um modelo turbo-alimentado, torna-se inviável a formação da mistura ar/combustível após a turbina de admissão, pois nesse setor o ar encontra-se comprimido.

Assim, o misturador, ligado à linha de alimentação do gás natural, deve ser instalado antes da turbina e do intercooler, para que ocorra a formação da mistura com a depressão localizada. Ou seja, a turbina passará a comprimir mistura, e não apenas o ar na admissão.

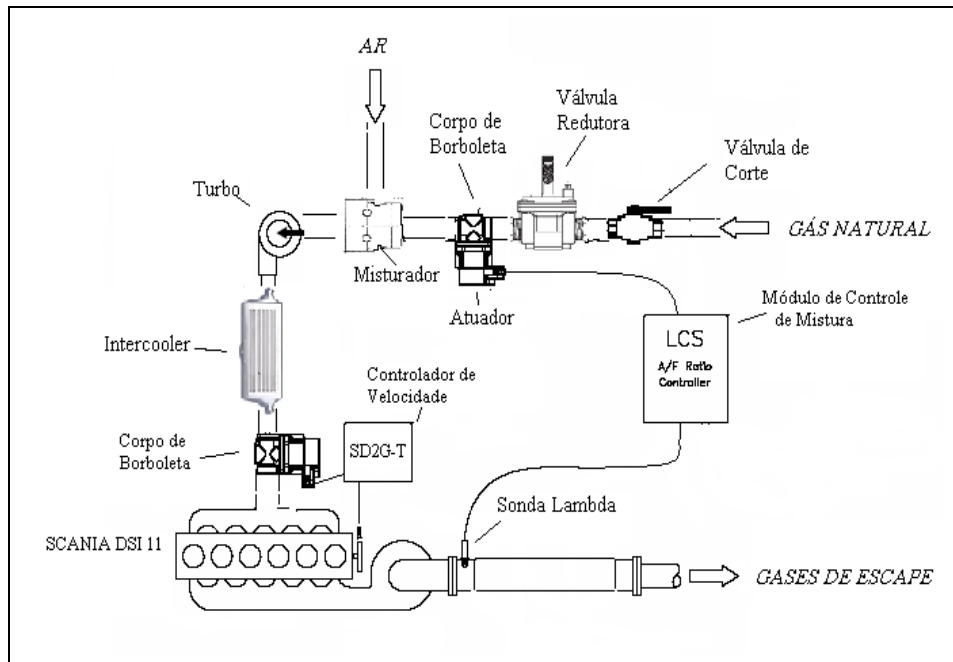


Figura 42 – Circuito de alimentação de gás natural do motor Scania DSI 11 otolizado.

## 9. O Sistema de Arrefecimento

O gás natural possui poder calorífico inferior de cerca de 49.081 kJ/kg, enquanto o óleo diesel possui 43.419 kJ/kg (tabela 1). Ou seja, o gás libera uma maior quantidade de energia para uma mesma massa de combustível.

Essa característica é interessante por poder representar um aumento de potência nos motores convertidos, desde que acompanhados de modificações que otimizem a utilização do gás natural como combustível, tal qual os projetos de conversão dedicada.

Em contrapartida, esse maior aporte de energia se reflete em aumento no calor gerado pela combustão, e conseqüentemente, elevação do calor transmitido para as peças do motor e para o sistema de arrefecimento.

Essa sobrecarga de calor só pode ser avaliada precisamente através de testes em dinamômetro utilizando termopares para medição da temperatura em diferentes pontos do motor. Todavia, descrevemos nesse capítulo algumas alterações a serem realizadas caso esse maior aporte de calor seja verificado na prática.

### 9.1. Alterações no Sistema de Arrefecimento

Existem diversas alternativas para melhorar a eficiência do sistema de arrefecimento do motor Scania DSI 11, para que a resistência do equipamento não seja comprometida pela utilização do gás natural.

A própria adoção do intercooler, no sistema de admissão, contribui na redução da temperatura de funcionamento do motor, visto que é admitida uma mistura ar/combustível mais fria, auxiliando no resfriamento do cilindro, além de proporcionar redução na temperatura média do ciclo de combustão.

O motor DSI 11 é refrigerado por radiador de água, com ventilador do tipo soprante, para retirada do calor absorvido pelo líquido de arrefecimento, além do calor irradiado para o ambiente (convecção e radiação).

- Radiador:

Existem diversas configurações de radiadores disponíveis para motores estacionários. Uma alternativa é adotar um radiador de maior porte, com maior área de troca de calor.

Um detalhe importante a considerar é que o ar que passa através da colméia do radiador não deve retornar. A recirculação do ar aquecido produz queda no rendimento do sistema de arrefecimento, aumentando a temperatura do líquido refrigerante, e a temperatura do motor por conseqüência. Com isso, uma medida para aumentar a eficiência é canalizar a saída do radiador para o exterior do ambiente onde o motor será instalado, por meio de um duto flexível (usualmente lona), com área interna de 1,3 vezes a área da colméia do radiador (Pereira).

Outra medida é a instalação de revestimento termo-isolante nos tubos de escapamento, que atinge temperaturas elevadas durante o funcionamento. Isso reduz consideravelmente o calor irradiado pelo motor, baixando a temperatura ambiente, e melhorando a eficiência do sistema.

O conjunto dessas modificações pode reduzir consideravelmente a temperatura de funcionamento do motor a gás natural.

- Ventilador:

O ventilador, assim como o radiador, de motores estacionários é projetado para uma capacidade 30% superior às necessidades do motor original, prevendo a sua utilização em ambientes pouco arejados. Assim há uma margem razoável de utilização dos mesmos em motores convertidos ao uso do gás natural, desde que haja uma boa renovação do ar no ambiente no qual o motor será utilizado.

Todavia, caso haja elevação considerável na temperatura do motor, uma boa solução é a substituição do ventilador original por outro de maior diâmetro e maior número de pás, aumentando a dissipação do calor na colméia do radiador, e também do calor irradiado pela superfície externa do motor. Os fabricantes de motores Diesel disponibilizam no mercado diferentes modelos de ventiladores, para atender necessidades específicas inerentes à instalações especiais.

- Dutos de Refrigeração:

Outra opção para diminuir a temperatura de funcionamento do motor Scania DSI 11 a gás natural é aumentar o volume dos dutos de refrigeração no cabeçote do motor, próximos às câmaras de combustão. Essa medida aumenta a área de troca de calor entre o líquido refrigerante, melhorando a dissipação do calor proveniente da combustão do gás, além de alojar maior massa de água para a refrigeração, além da capacidade original de 56 litros.

Para o aumento do volume dos dutos torna-se necessária a usinagem do cabeçote. Essa modificação no sistema é a mais dispendiosa, e só deve ser adotada caso as outras alterações não se mostrarem eficientes na diminuição da temperatura de funcionamento do motor.

## 10. Conclusão

Após análise dos resultados obtidos nota-se a grande vantagem na utilização do motor Scania DSI 11 convertido a gás natural na geração de energia.

Com a adoção dos sistemas de ignição e de alimentação controlados eletronicamente, pode-se obter um melhor aproveitamento do combustível, gerando desempenho e economia, além de serem equipamentos otimizados para funcionar em conjunto com catalisadores, que podem reduzir as emissões de poluentes a níveis abaixo das normas vigentes, tornando a geração de energia menos danosa ao meio ambiente.

O sistema de alimentação, com a utilização de gás natural canalizado, proporciona comodidade e economia em gastos relativos à logística de abastecimento periódico de óleo diesel para grupos geradores. Além de alimentar o motor com um combustível mais barato e teoricamente mais limpo que o óleo diesel.

A adoção de um diagrama de válvulas adequado mostrou-se importante para um maior controle das emissões de poluentes do motor, além de proporcionar uma maior economia de combustível. O custo de usinagem e retífica do eixo comando de válvulas, é consideravelmente baixo em relação aos benefícios de se dispor de um diagrama adequado aos motores ciclo Otto.

Todavia, a grande vantagem notada é a possibilidade de ganhos de desempenho proporcionados com a conversão, ao utilizar uma taxa de compressão adequada a motores a gás natural. Essa medida faz com que o rendimento térmico do motor ciclo Otto se aproxime do motor ciclo Diesel, gerando um melhor aproveitamento da energia do combustível, que é mais elevada que a do óleo diesel. Essa característica, aliada ao baixo custo do gás natural industrial, fornece um custo específico do combustível para a geração de energia consideravelmente abaixo do custo das outras fontes de energia elétrica.

O custo do projeto de otolização, avaliado em R\$ 29.528,60, proporciona uma grande economia em termos de investimento, devido ao seu baixo custo perante aos de aquisição de motores similares a gás natural importados. O motor Cummins Série C (estacionário, a gás natural) de 8,5 litros e 171 kW de potência (cerca de 60% da potência estimada para o DSI 11 a gás), é avaliado atualmente em US\$ 35.000,00 (R\$ 78.400,00)<sup>9</sup>. Considerando o valor do motor Scania DSI 11 novo, no mercado, tem-se um motor estacionário alimentado a gás natural, de maior potência, avaliado em R\$ 74.528,60.

O retorno de investimento da conversão de geradores a diesel para gás natural, calculado para o consumo máximo de energia em horário de ponta, se dá em 16 meses. Da mesma forma, o retorno de investimento da compra de um motor Scania DSI 11 a gás natural, para utilização em geradores em substituição da energia da rede elétrica, se dá em 6,5 meses.

Por essas razões, podemos considerar a otolização do motor Scania DSI 11 para uso de gás natural como combustível, uma alternativa viável, econômica e extremamente atraente para a geração de energia.

## 11. Referências

BRUN, R., 1984. "*Science et Technique du Moteur Diesel Industriel et de Transport*". Paris: Éditions Technip.

<sup>9</sup> Consulta realizada a Cummins Distribuidora de Motores Diesel e Equipamentos Ltda em 23 de novembro de 2005 (dólar comercial – R\$ 2,24).

- CABRAL, S. D.; OLIVEIRA, L. B.; DE MATTOS, L. B.; SAMPAIO, M. R., 2001 “*Transporte Sustentável – Alternativa para Ônibus Urbanos*”. Rio de Janeiro: COPPE/UFRJ.
- FARAH, M. A., S/D. “*Caracterização do Petróleo e Seus Produtos – Petróleo e Combustíveis*”. Petrobrás.
- HEYWOOD, J. B., 1988. “*Internal Combustion Engine Fundamentals*”. Massachussets: Mc. Graw Hill Inc.
- IANGV – International Association for Natural Gás Vehicles. *Exhaust Emissions from Natural Gas Vehicles*. Report prepared for the IANGV Technical Committee, 2001.
- KHOVAKH, M., 1971. “*Motor Vehicle Engines*”. Moscou: Mir Publishers.
- PEREIRA, J. C. “*Motores e Geradores – Princípios de Funcionamento, Instalação, Operação e Manutenção de Grupos Diesel Geradores.*” [www.joseclaudio.eng.br](http://www.joseclaudio.eng.br), acesso em novembro de 2005.
- RIBEIRO, S. K., 2001. “*Estudo das Vantagens Ambientais do Gás Natural Veicular: O Caso do Rio de Janeiro*”. Rio de Janeiro: COPPE/UFRJ.
- SCANIA, 1980. “*Manual do Operador – D11/DS11/DS14*”. São Bernardo do Campo.
- SMITH, P. H., 1974. “*The Design and Tuning of Competition Engines*”. Massachussets: Robert Bentley Inc.
- VSÓROV, B. A., 1981. “*Manual de Motores Diesel para Tratores*”. Moscou: Editorial Mir Moscú.
- WOODWARD., 2004. “*Full Line Catalog*”.
- ANP - Agencia Nacional do Petróleo. [www.anp.gov.br](http://www.anp.gov.br), acesso em abril de 2005.
- CEG – Companhia Estadual de Gás – Portal Gás Natural. [www.portal.gasnatural.com](http://www.portal.gasnatural.com), acesso em julho de 2005.
- Woodward. [www.woodward.com](http://www.woodward.com), acesso em agosto de 2005.
- NGK – Fabricante de Velas de Ignição. [www.ngk.com.br](http://www.ngk.com.br), acesso em maio de 2005.
- IANGV – International Association for Natural Gás Vehicles. [www.iangv.org](http://www.iangv.org), acesso em junho de 2005.

## COMPARAÇÃO ENTRE RESULTADOS EXPERIMENTAIS E TEORICOS DE UM FLUXO REATIVO NUM COMBUSTOR CICLÔNICO

### Adriano Akel Vasconcelos

Campus Universitário do Guamá, Lab. de Eng. Mecânica - LABGAS, Sala 5. Belém-PA-Brasil, CEP: 66075-110  
akel@ufpa.br

### Antonio Geraldo de Paula Oliveira

Campus Universitário do Guamá, Lab. de Eng. Mecânica - LABGAS, Sala 5. Belém-PA-Brasil, CEP: 66075-110  
ageraldo@ufpa.br

### Jessé Luis Padilha

Campus Universitário do Guamá, Lab. de Eng. Mecânica - LABGAS, Sala 3. Belém-PA-Brasil, CEP: 66075-110  
jessepilha@hotmail.com

### Manoel Fernandes Martins Nogueira

Campus Universitário do Guamá, Lab. de Eng. Mecânica; Sala 202. Belém-PA-Brasil, CEP: 66075-110  
mfmn@ufpa.br

### Daniel Onofre de Almeida Cruz

Campus Universitário do Guamá, Lab. de Eng. Mecânica; Sala 204. Belém-PA-Brasil, CEP: 66075-110  
doac@ufpa.br

**Resumo.** A otimização dos parâmetros construtivos de um combustor ciclônico permite a combustão eficiente de serragem em suspensão, maximizando a taxa de consumo de biomassa e minimizando o volume do combustor e as taxas de emissão de gases poluentes para a atmosfera. Este trabalho avalia a eficiência de um combustor ciclônico de 84cm de diâmetro e 4m de altura, construído no laboratório de vapor da UFPa, devidamente instrumentado para medir os perfis de temperatura, tanto na parede interna da câmara de combustão quanto na saída do combustor. Os resultados obtidos foram confrontados com simulações computacionais, utilizando-se o pacote computacional Fluent V 6.2.16. Foram realizadas dois regimes de queima para razões de equivalência diferentes. Os resultados estão apresentados na forma de gráficos que mostram os perfis de temperatura para as dadas razões de equivalência.

**Palavras chave.** combustor ciclônico, Fluent, combustão de biomassa .

### 1. Introdução

São grandes os números de queimadores de biomassa aplicados a indústrias madeireiras na Região amazônica. Grande parte deles queima resíduos de madeira lentamente e com alta produção de poluentes, tais como o CO e hidrocarbonetos. A combustão ciclônica é uma solução tecnicamente viável, de bom desempenho e adequado para substituir a queima convencional, além de possuir a vantagem de poder operar com diversos tipos de combustíveis como cavacos e casca de madeira (USHIMA, 1998).

O combustor ciclônico é basicamente uma câmara cilíndrica na qual o combustível sólido particulado queima em um movimento ciclônico devido o ar que é introduzido tangencialmente na mesma. Esse tipo de injeção de ar provoca velocidades relativas gás-partícula elevadas, o que ocasiona elevados valores de coeficientes de troca de calor e massa, desta forma as taxas de combustão volumétrica são muito intensas, da ordem de 4 a 8 MW/m<sup>3</sup> (USHIMA, 1998). Geralmente as superfícies deste tipo de combustor são cobertas com refratário, pois a temperatura dos gases fica em torno de 1650°C. Esta temperatura é suficiente para derreter a cinza e transforma-la em uma escória fundida nas paredes do cilindro (BORMAN e RAGLAND, 1998). O escoamento no interior deste tipo de combustor é dito fortemente rotacional (swirling). O vigor com que a ação ciclônica acontece, forçando as partículas para a parede do ciclone facilita a combustão rápida que, segundo Tillman (1991) ocorre na camada limite perto da parede. Syred et al (1974) relata que o escoamento rotacional aumenta consideravelmente os limites de estabilidade da maioria das chamas, além de prover tempos de residência muito longos para a mistura ar/combustível. Este estudo demonstrou que ao contrário de muitas suposições prévias, o escoamento isotérmico não é freqüentemente axi-simétrico mas tridimensional transiente.

Kops et al (2004) relatou modelagem e simulação da queima de pó de madeira em queimadores ciclônicos. As características operacionais de um queimador de pó típico foram analisadas através de simulação numérica tridimensional utilizando o pacote comercial CFD Fluent, onde foram examinadas as características do escoamento, assim como as principais espécies e campos de temperatura.

Este trabalho apresenta resultados de medições experimentais do perfil de temperatura longitudinal, na parede de um combustor cilíndrico real queimando serragem na presença de ar para duas razões de equivalência ( $\Phi=1,0$  e  $\Phi=$

0,7). Para a primeira foram obtidos resultados de simulações numéricas efetuadas pelo código computacional Fluent V6.2.16 no laboratório de Engenharia Mecânica da UFPA.

## 2. Combustor ciclônico, e aparatos de medição.

O combustor, conforme mostrado na Fig. 1, pode ser dividido em três partes: a primeira é o sistema de alimentação ar/serragem seguido da câmara de combustão e finalmente o sistema de limpeza dos gases de exaustão. O sistema de alimentação ar/serragem é constituído de duas entradas: uma para combustível (serragem) e outra para oxidante (ar atmosférico), as quais desembocam em uma única seção de alimentação onde os elementos citados se misturam e são injetados na câmara de combustão. O tanque de combustível é cilíndrico, aberto no topo por onde se deposita a biomassa e com um pequeno rasgo retangular no fundo por onde a serragem é induzida à seção de alimentação. Este tanque possui na parte interna, no fundo, um conjunto de pás giratórias que estão acopladas a um motor elétrico localizado logo abaixo do reservatório pelo lado de fora. Essas pás promovem uma mistura da serragem e também possibilitam com que essa biomassa seja direcionada ao rasgo no fundo, caindo em um duto que possui uma rosca sem-fim em seu interior. Acionada por outro motor, esta rosca empurra o combustível para se misturar com o ar no duto de sucção.

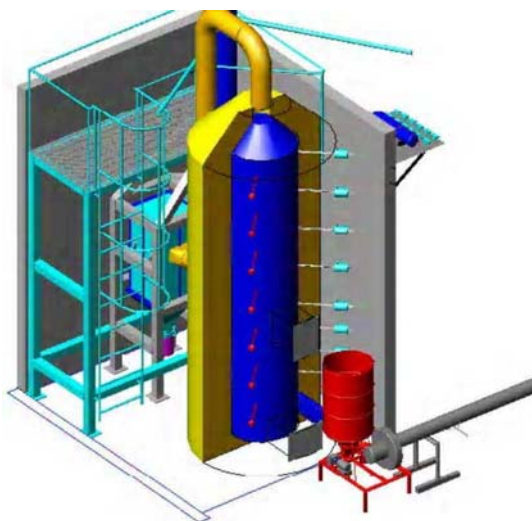


Figura 1: Representação gráfica do combustor ciclônico do EBMA

Ao lado e ligeiramente abaixo do tanque de reserva da biomassa fica um tubo de 150 mm de diâmetro no qual uma das extremidades está livre para a atmosfera e a outra está ligada a um ventilador centrífugo que succiona o ar de alimentação. Esse ar é misturado a serragem ao passar pelo ventilador e essa mistura é injetada tangencialmente dentro da câmara de combustão.

A câmara de combustão é basicamente constituída por uma torre de tijolos maciços de argila fixados por uma argamassa de cimento refratário, cimento comum, barro e areia. Esta estrutura apresenta-se em geometria cilíndrica com 840mm de diâmetro interno e 1660mm de diâmetros externo. Em sua base existem duas aberturas: a entrada da mistura ar/serragem e uma janela de inspeção. Ao longo da parede do combustor estão dispostos 7 orifícios onde estão alocados 7 termopares tipo S com liga de platina (90%) + Ródio (10%) e platina pura (-) distantes 50cm entre si, numerados de cima para baixo de 1 à 7, estando o primeiro a 3,5 e o sétimo a 0,5m do fundo do combustor.

No topo do combustor foi adicionada uma estrutura com vergalhões de aço e tijolos que possibilitaram um formato cônico ao cume do forno por onde sai um tubo que leva os gases e particulados ao sistema de filtragem, o qual é composto por coletores ciclônicos projetados para reter partículas em suspensão com dimensões maiores de 5 microns. Estas partículas são depositadas por gravidade em um reservatório acoplado abaixo dos filtros e os gases são liberados para a atmosfera.

Através do Centro de Comando e Monitoramento (CCM) é possível monitorar e controlar o sistema de alimentação ar/serragem e ainda registrar as temperaturas medidas em cada termopar.

## 3. Procedimento experimental

Primeiramente o ensaio experimental visava gerar dados para comparação com os resultados numéricos que tinham sido obtidos. Esses resultados indicavam que a razão ar/serragem de alimentação deveria ser tal que estivesse próxima da razão estequiométrica, ou seja, para um fluxo de ar de 0,2565kg/s seria usado 0,03963kg/s de biomassa. Porém este

procedimento gerou elevadas temperaturas no interior da câmara, comprometendo sua estrutura física, causando alterações na estrutura da parede.

Para reduzir a temperatura optou-se por efetuar medidas experimentais com a razão de equivalência de alimentação igual a 0,72, ou seja, uma mistura com excesso de ar. A razão dessa escolha foi devido à estabilidade da queima e limpeza dos gases efluentes do combustor. Nessa condição o fluxo de ar era de 0.2565kg/s e o de serragem era de 0.03051kg/s. O forno foi mantido sob alimentação estável por quatro horas e as temperaturas foram registradas no CCM. O queimador operava a pressão levemente superior a pressão atmosférica e o ar de alimentação tinha sua temperatura variando entre 28 e 32°C.

#### 4. Caracterização da biomassa utilizada

A serragem foi obtida junto a serrarias na região metropolitana de Belém que trabalham com madeira pós-secagem. A granulometria da serragem foi determinada nos laboratórios da UFPA através da distribuição de Rossin-Rammler sendo obtido os seguintes diâmetros:  $d_{min} = 20\mu m$ ,  $d_{max} = 400\mu m$ ,  $d = 184\mu m$  e  $n = 2.64$ .

A caracterização da biomassa usada foi determinada no Laboratório de Energia, Biomassa e Meio Ambiente, EBMA, da UFPA onde foram obtidas suas propriedades físicas conforme as tabelas abaixo.

Tabela 1. Propriedades físicas da Biomassa na base mássica.

Análise Elementar (%)		Propriedades físicas (%)	
C	52,70	Voláteis	31,5
H	6,01	Carbono fixo	44
O	41,23	Cinzas	1,99
N	-	Teor de Umidade	23,5
Cl	-	PCS(MJ/kg)	19,77

A tabela 2 mostra as Propriedades físicas adotadas para Biomassa e suas respectivas referências.

Tabela 2. Propriedades físicas adotadas para Biomassa na base mássica.

Propriedades físicas		Referências
Densidade (kg/m <sup>3</sup> )	500	Ragland (1991)
Calor Específico (J/kg-K)	1.760	Van Wvlen (1993)
Condutividade térmica(W/m-K)	0,173	Ragland (1998)
Temperatura de Pirolise (K)	473	Ushima (1998)

#### 5. Modelagem matemática

As simulações numéricas foram executadas no código de fluidodinâmica computacional Fluent v.6.2.16. o qual possui modelos que possibilitam a simulação de escoamento de fluidos, transferência de calor, combustão, escoamentos multifásicos e reações químicas em múltiplos sistemas de referência e com geometrias complexas. Neste código as equações governantes são resolvidas utilizando o método de volumes finitos em um sistema de malhas não-estruturadas. No método de volumes finitos as equações diferenciais governantes são integradas de forma conservativa em volumes de controle, gerando desta forma um sistema de equações algébricas. Este sistema de equações é resolvido no Fluent de forma iterativa. Por isso, antes de iniciar uma simulação deve-se prover os cálculos com uma estimativa inicial para a solução do campo de escoamento, quanto melhor for a estimativa inicial mais rápido será alcançada a solução desejada.

Os cálculos para malha na entrada do combustor foram iniciados com um campo de velocidade na direção axial, o que agilizou os cálculos. Foram utilizados os modelos para altos números Reynolds devido os mesmos estarem mais desenvolvidos e, para suprir certas deficiências do cálculo próximo da região de parede, foram utilizados modelos de leis de parede empíricas. Como sugere (Fluente 2003) para os fluxos com número de vórtices alto foi empregada a

metodologia PRESTO para interpolação aplicada a equação de pressão. O esquema de *upwind* de segunda-ordem foi aplicado à equação de impulso, modelo turbulento, fração de mistura e fração de discrepância de mistura. SIMPLES foi o algoritmo aplicado para acoplar pressão e velocidade. O modelo adotado para troca de calor por radiação foi o DO (ordenada discreta). Para emissividade das partículas foi adotado um fator de espalhamento igual 0.9 (FLUENT. 2003). Perto da parede do combustor usou-se função de parede para computar a velocidade, temperatura e campos de concentração de espécies. Esta região vai ortogonal da parede até a metade do volume adjacente da malha.

Antes do cálculo de combustão devem ser processados dados que contribuirão para o cálculo da rotina de Pré-PDF. Este é um pré-processo que pede uma lista de espécies trabalhando juntamente com a composição elementar delas, propriedades térmicas das substâncias química, poder calorífico inferior, calor específico e a temperatura de entrada. O Pré-PDF usa esta informação para calcular a fração molar, entalpia de formação, concentrações de equilíbrio e entalpia para todas as espécies nas condições de entrada. Os dados de saída são tabulados em valores de fração de massa, densidade e temperatura para todas as espécies como função da media de fração de massa, variando a entalpia.

O escoamento turbulento foi simulado utilizando os modelos de tensão de Reynolds (RSM) e a combustão foi simulada utilizando o modelo de fração de mistura.

### 5.1. Modelo das tensões de Reynolds (RSM)

Neste modelo são resolvidas equações de transporte para cada um dos termos no tensor de tensão de Reynolds. Além disso, uma equação de determinação de escala adicional (para  $\epsilon$ ) também é resolvida (FLUENT. 2001). As equações de transporte do modelo das tensões de Reynolds são dadas por:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\overline{\rho u_i u_j}) + C_{ij} = D_{T,ij} + P_{ij} + G_{ij} + \Phi_{ij} + \epsilon_{ij} \quad (1)$$

onde a convecção é dada por  $C_{ij} = \frac{\partial}{\partial x_k}(\overline{\rho u_k u_i u_j})$ ; a difusão turbulenta é calculada por

$D_{T,ij} = \frac{\partial}{\partial x_k} \left[ \overline{\rho u_k u_i u_j u_k} + p(\delta_{ij} \overline{u_i} + \delta_{ik} \overline{u_j}) \right]$ ; a geração de tensão é  $P_{ij} = -\rho \left( \overline{u_i u_k} \frac{\partial u_j}{\partial x_k} + \overline{u_j u_k} \frac{\partial u_i}{\partial x_k} \right)$ ; a

produção de empuxo pode ser obtida por  $G_{ij} = -\rho \beta \left( \overline{g_i u_j \theta} + \overline{g_j u_i \theta} \right)$ ; e ainda a redistribuição de energia por

$$\frac{\partial}{\partial t}(\overline{\rho u_i u_j}) + \Phi_{ij} = p \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \text{ e finalmente a dissipação dada por } \epsilon_{ij} = 2\mu \frac{\partial u_i}{\partial x_k} \frac{\partial u_j}{\partial x_k}.$$

Os termos  $C_{ij}$  e  $P_{ij}$  podem ser calculados, já os termos  $D_{T,ij}$ ,  $G_{ij}$ ,  $\Phi_{ij}$  e  $\epsilon_{ij}$  necessitam de modelagem para que as equações possam ser resolvidas, sendo esta modelagem descrita no manual do Fluent (2003).

O termo de difusão turbulenta é simplificado como:

$$D_{T,ij} = \frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{\mu_t}{\sigma_k} \frac{\partial u_i u_j}{\partial x_k} \right) \quad (2)$$

onde a viscosidade turbulenta é calculada como  $\mu_t = \rho C_\mu \frac{k^2}{\epsilon}$  e  $\sigma_k = 0,82$ .

### 5.2. Modelo de combustão: fração de mistura

Este método é baseado na solução para a equação de transporte de dois escalares conservados nomeados de fração de mistura,  $f$  e sua variação  $\overline{f'^2}$ , obtido em um formulário PDF, onde as flutuações dos escalares é supostamente conservada. Para um sistema de combustível/oxigênio a fração de mistura é definida como:



$$f = \frac{m_c}{m_c + m_{Ox}} \quad (2)$$

Onde  $m_c$  é a massa de combustível  $m_{Ox}$  a massa de oxidante.

### 5.3. Equações matemáticas

Para fluxo turbulento têm-se uma difusão de massa turbulenta de grande ordem. Em todo caso é razoável considerar que a difusividade térmica é igual à difusão molecular, onde o número de Lewis = 1 (FLUENT 2003). e conseqüentemente todas as equações de conservação reduzem-se somente a uma função: a da fração média da mistura  $\bar{f}$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \bar{f}) + \nabla(\rho \bar{v} \bar{f}) = \nabla \left( \frac{\mu_t}{\sigma_t} \nabla \bar{f} \right) + S_m \quad (3)$$

onde  $\bar{v}$  é a velocidade,  $\rho$  é a uma densidade do ar,  $\mu_t$  é a viscosidade turbulenta,  $\sigma_t$  é o número de Prandtl. A manutenção do termo fonte  $S_m$  é devida unicamente à transferência mássica das partículas contínuas na fase gasosa. O modelo de fração de mistura  $\bar{f}^2$  requer também uma solução vinda da seguinte equação de conservação obtida:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left( \rho \bar{f}^2 \right) + \nabla \left( \rho \bar{v} \bar{f}^2 \right) = \nabla \left( \frac{\mu_t}{\sigma_t} \nabla \bar{f}^2 \right) + C_g \mu_t (\nabla^2 \bar{f}) - C_d \rho \frac{\epsilon}{k} \bar{f}^2 \quad (4)$$

onde  $f' = f - \bar{f}$  é a flutuação temporal,  $f$ ,  $\sigma_t$ ,  $C_g$  e  $C_d$  são constantes com valores 0,85, 2,86 e 2,0, definidos respectivamente no manual FLUENT 2003.  $\epsilon$  e  $k$  são respectivamente a taxa de eddy dissipation e a energia cinética turbulenta.

Os valores médios escalares devidos sua variação durante as flutuações turbulentas tais como a concentração, a densidade e a temperatura da espécie, foram avaliados com a ajuda da PDF. Esta função descreve a flutuação do tempo devido os efeitos da reação química e do fluxo turbulento. Neste trabalho a PDF foi modelada como uma função beta de dois momentos,  $p(f)$ , dado para a seguinte expressão:

$$p(f) = \frac{f^{\alpha-1} (1-f)^{\beta-1}}{\int_0^1 f^{\alpha-1} (1-f)^{\beta-1} df} \quad (5)$$

onde:  $\alpha = \bar{f} \left[ \bar{f}(1-\bar{f}) / \bar{f}^2 - 1 \right]$  e  $\beta = (1-\bar{f}) \left[ \bar{f}(1-\bar{f}) / \bar{f}^2 - 1 \right]$

### 5.4. Modelagem para o fluxo da fase sólida

O FLUENT descreve as equações de Lagrange para o fluxo da fase sólida e mudando as propriedades durante sua transição para a fase gasosa o mesmo é calculado por um jogo de equações diferenciais ordinárias que representam as equações de conservação de massa, impulso e energia. Nesta descrição, as propriedades da fase sólidas são condições iniciais para começar o cálculo. Os resultados dos cálculos são: o fluxo de calor e a transferência de massa, que na fase sólida e na dispersão da fase gasosa são determinados pelo modelo estocástico. As equações de aquecimento, volatilização e oxidação de carbono são integradas pelo caminho da partícula que foi calculada. O cálculo começa com a secagem da partícula, que em seguida volatiliza e finalmente oxida e se transforma em carvão, sendo a oxidação o processo que dura mais tempo (Ragland et al. 1998). O modelo adotado para descrever o volatilização é uma reação de primeira ordem com uma única taxa cinética.

$$-\frac{dm_p}{dt} = k \left[ m_p - (1 - f_{v,0}) m_{p,0} \right] \quad (6)$$

Onde  $m_p$  é a massa de partícula temporal (kg),  $f_{v,0}$  são as frações mássicas de voláteis contidas nas partículas  $m_{p,0}$  é a massa inicial da partícula (kg).  $k$  é a constante [ $s^{-1}$ ] seguindo a definição de Arrhenius para a taxa constante:  $k = A_1 \cdot e^{-(E/RT)}$ . Neste trabalho  $A_1$  e  $E$  são definidos respectivamente como  $7,0s-1E+7$  e  $1.2964E+8$  J/kgmol (Ragland 1998).

A reação de superfície é para as espécies de oxidantes e espécies de produtos contidos na fase gasosa (Neste trabalho, foi adotado um modelo controlado pela competição entre cinemática química ou difusão de espécies) sendo a reação heterogênea na superfície da partícula representada pela equação:

$$\frac{dm_p}{dt} = -A_p P_{ox} \frac{D_0 \mathfrak{R}}{D_0 + \mathfrak{R}} \quad (7)$$

Onde  $A_p$  é a área superficial da partícula ( $\pi d_p^2$ ),  $P_{ox}$  é a pressão parcial do oxidante de uma partícula. A taxa cinética  $\mathfrak{R} = C_2 e^{-(E/RT_p)}$  incorpora os efeitos de reação química na superfície interna da partícula de carvão, resíduo de volatilização de biomassa e difusão de poro ( $C_2 = 2E-3$ ). A difusão do oxidante gasoso para a superfície da partícula é determinada por,

$$D_0 = C_1 \left[ \frac{(T_p - T_\infty)}{2} \right]^{0.75} / d_p \quad (8)$$

Onde  $T_p$  é a temperatura de partícula é.  $T_\infty$  é a temperatura fluida local e  $C_1$  é a difusão de massa onde a mesma foi considerada com o valor de  $5E-12$  adotada.

### 5.5 Geometria da malha

Foram obtidos todos os parâmetros físicos necessários a partir do combustor ciclônico real, sendo a malha desenvolvida com o auxílio do software Gambit. A dimensão do primeiro volume adjacente à parede foi ajustada para 1mm, os volumes subseqüentes aumentavam de tamanho com um fator de 1,1. Com isso a malha do combustor ficou com um total de 173.079 volumes, Fig. 2(a). As paredes sólidas também foram inseridas no combustor, Fig. 2(b). Para tornar mais real a entrada do escoamento no domínio uma parte maior do duto de alimentação de ar foi considerada na malha, figura 2(c).

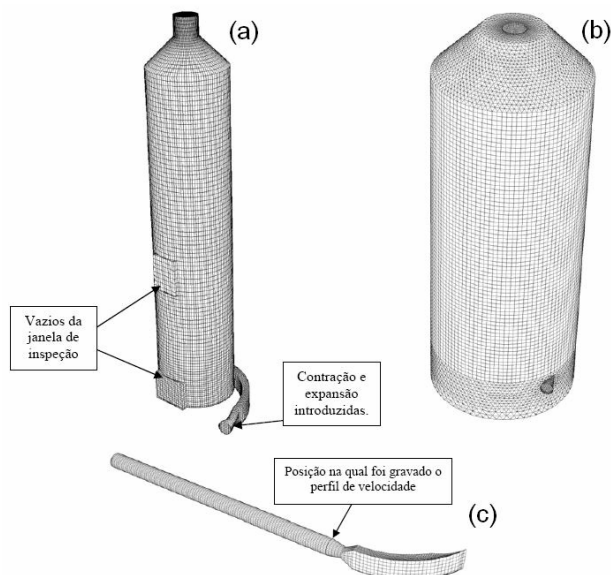


Figura 2: Malha computacional – Câmara (a); parede (b) e entrada (c).

### 5.6. Estratégias para obter a convergência das simulações

O cálculo começou sem o modelo de radiação. Depois que o cálculo convergiu, o modelo de radiação foi adicionado e então executado novamente com o cuidado para obter reduções sucessivas através dos fatores de sub-

relaxamento para evitar divergência. Foram utilizadas 76.800 trajetórias para as partículas sólidas, porque quanto mais alto o número de trajetórias melhor a estabilidade do cálculo (Fluente 2003).

Os critérios de convergência para cada volume de controle foram referentes à adição de resíduos absolutos para cada parâmetro, devendo este ser menor que  $10^{-4}$  com exceção desta regra para os resíduos de energia e radiação, pois estes obedeciam a critérios que os resíduos fossem menores que  $1,5 \times 10^{-6}$ .

## 6. Condições de contorno e parâmetros físicos e químicos.

Nenhuma condição de deslizamento foi adotada na parede do Combustor, que era tido como adiabático. foram assumidas fração de mistura e discrepâncias de relação serragem/ar tendendo para zero. O perfil de velocidade de ar na entrada era tido como turbulento com uma escala de 0,00609 e intensidade turbulenta de 5%. Na saída, a intensidade turbulenta foi assumida também 5%, e um diâmetro hidráulico que 0.25 m e seu perfil de pressão avaliaram pela seguinte expressão.

$$\frac{\partial p}{\partial r} = \frac{\rho v_{\theta}^2}{r} \text{ e } p(r = 0) = p_0 \quad (9)$$

onde  $r$  é a distância radial do combustor ao centro  $v_{\theta}$  é o componente tangencial da velocidade e  $p_0$  é a pressão no centro, assumiu-se ser a pressão atmosférica (101.325 kPa). foram adotadas 76.800 trajetórias para as partículas sólida durante o cálculo, sendo adotado que partículas que batiam nas paredes de forno voltam com 50% de seu impulso ao fluxo gasosos.

## 7. Resultados obtidos

Para a condição de combustão com  $\Phi_{\text{méd}} = 1,016$  foram obtidos perfis de temperatura axial na região próxima a parede segundo medidas experimentais conforme obtidas (CUNHA, 2005) mostrado na Fig. 3. as temperaturas mostradas representam uma média retirada entre um intervalo de operação em que o combustor ciclônico apresentava um regime de operação estável.

Perfil Axial de Temperatura Exp. para  $\Phi = 1,016$

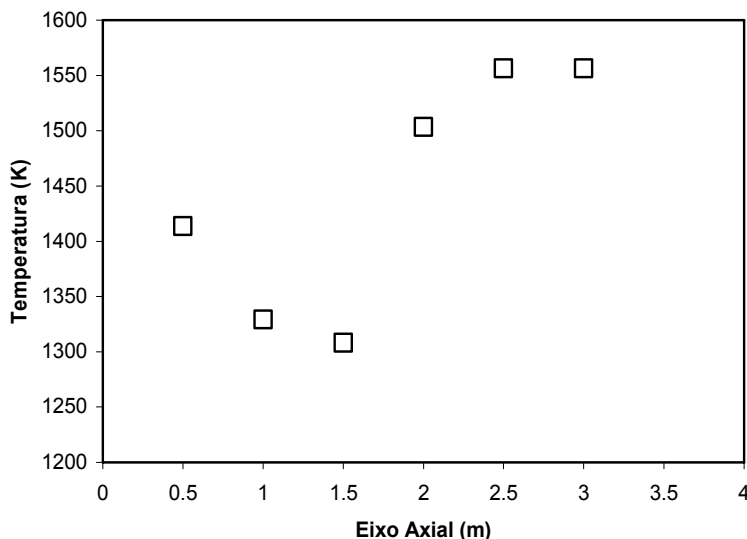


Figura 3: Perfil axial de temperatura obtido experimentalmente.

Para as condições citadas acima tem-se os seguintes dados computacionais do perfil de temperatura axial na região próxima a parede obtidos de simulação no software Fluent comorme mostrado por (CUNHA, 2005) na Fig. 4

### Perfil Axial de Temperatura Comp. para $\Phi = 1,016$

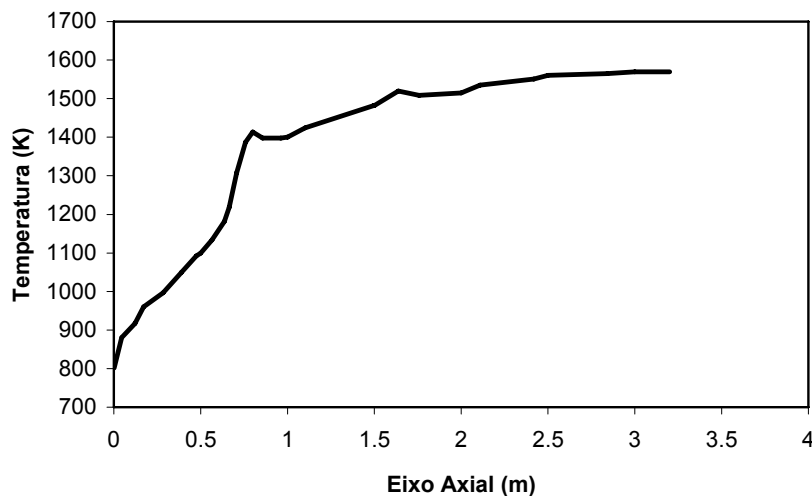


Figura 4: Perfil axial de temperatura calculado computacionalmente

Para uma segunda condição de combustão  $\Phi_{\text{méd}} = 0,720$  foram obtidos os seguintes resultados experimentais do perfil de temperatura axial na região próxima a parede do combustor conforme mostrado na Fig. 5. Resultados computacionais para esta condição não foram obtidos devido dificuldade de convergência dos cálculos.

### Perfil Axial de Temperatura Exp. para $\Phi = 0,720$

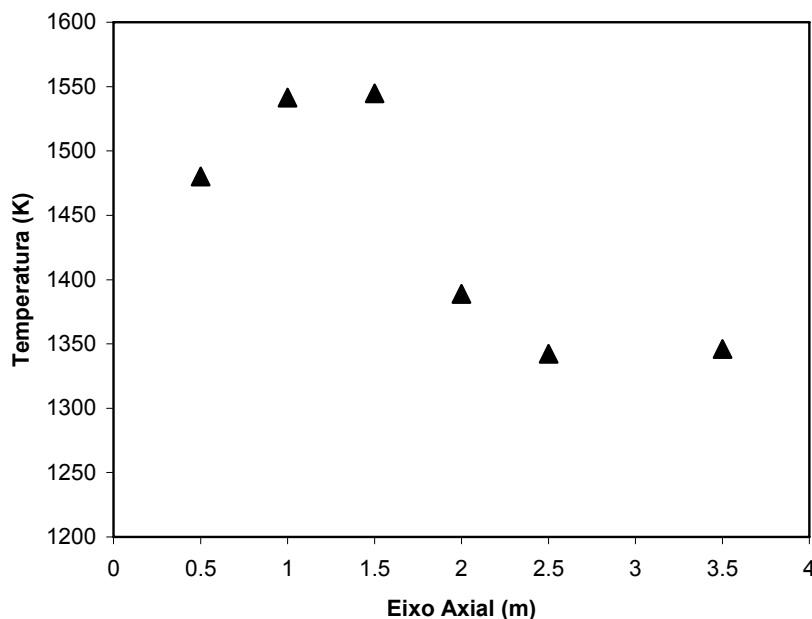


Figura 5: Perfil axial de temperatura obtido experimentalmente.

## 8. Conclusões

Com os resultados obtidos até o momento pode-se verificar que a utilização do código computacional fluente para prever a temperatura de combustão da serragem dentro do combustor ciclônico é promissora conforme pode ser observado na Fig. 6 que apresenta boas concordâncias de resultados no perfil de temperatura próximo a parede na metade superior do combustor.

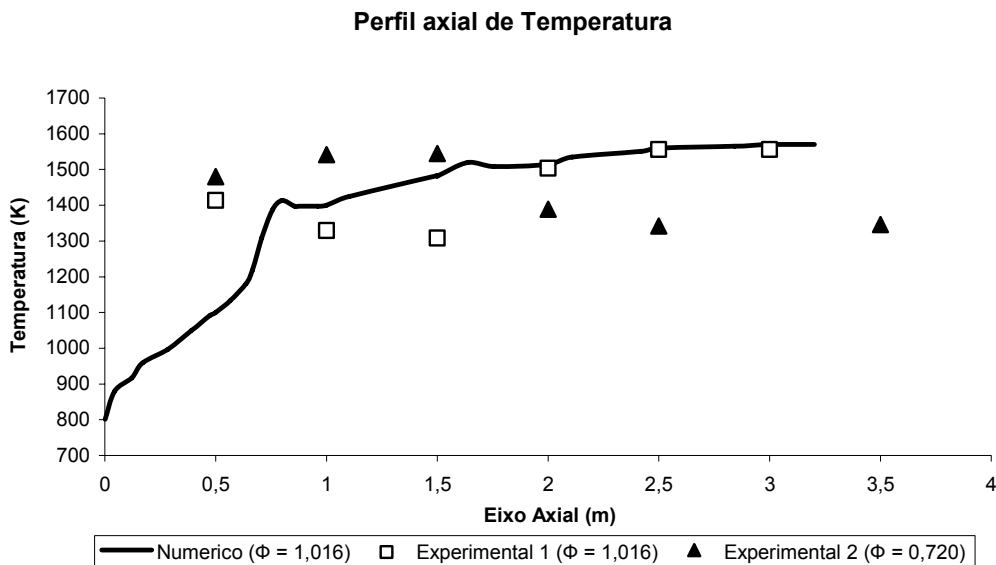


Figura 6: Comparativo dos perfis axiais de temperatura

As discordâncias dos resultados na metade inferior indicam que o modelo utilizado não foi capaz de prever de forma favorável os resultados provenientes do que se chama de região de secagem e pirólise indicadas por estarem a temperaturas inferiores. Tal diferença pode ser fruto da má estimativa da taxa de liberação de calor das partículas, que neste trecho, deve estar mais associado à taxa de volatilização das mesmas. Além disso, como a entrada do escoamento no domínio se aproxima a um jato de parede, as leis de parede utilizadas podem estar inserindo erro na predição da troca de calor na região afetada pelo jato.

Com a redução da razão de equivalência de  $\Phi_{\text{méd}} = 1,016$  para  $\Phi_{\text{méd}} = 0,720$  pode-se verificar que as a região de combustão está na metade inferior do combustor conforme mostrado na Fig. 6. Esta mudança pode ter influência do escoamento, razão de equivalência, diâmetro da partícula de biomassa, etc, mas análises mais precisas só podem ser realizadas com resultados numéricos para a segunda razão de equivalência.

## 9. Agradecimentos

Os autores agradecem o apoio do CNPq no financiamento do projeto Câmara de Combustão Ciclônica para Resíduos da Indústria Madeireira, através do processo n.º. 401105/2004-O, a Rede Nacional de Combustão e a Guenther Krieger Filho pelo apoio e discussões esclarecedoras.

## 10. Referências

- BOYSAN, F. WEBER, R. SWITENBANK, J. LAWN. C. J. Modeling coal-fired cyclone combustors. *Combustion and Flame*, v. 63, p. 73-86. 1986.
- CUNHA, F. A. D. Análise Experimental e Simulação Numérica da Combustão de Serragem em um Combustor Ciclônico. Engenharia Mecânica, UFPA, Belém, 2005.
- KOPS, S. M. B. MALTER, P. C. Simulation and Modeling of Wood Dust Combustion in Cyclone Burners. Final Technical Report Prepared for U. S. Department of Energy, 2004. 140
- MALISKA, C. R., Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional. 2 ed. Rio de Janeiro: LTC. 2004.
- RAGLAND, K. W. AERTS, D. J.; BAKER, A. J. Properties of Wood for Combustion Analysis. *Bioresource Technol.* v. 37, p. 161-168. 1991.
- RAGLAND, K. W; BOERGER, C. B. BAKER, A. J. A model of chunkwood combustion. *Forest Products Journal*. v. 38, p. 27-32. February 1988.
- RAGLAND, K. W. BORMAN, G. L. *Combustion Engineering*. McGraw-Hill, USA. 1998.
- RAGLAND, K. W YANG, Jing-Tang. Combustion of Millimeter Sized Coal Particles in Convective Flow. *Combustion And Flame*. v. 60, p.285-297. 1985.
- RENDEIRO, G. Técnicas de Medidas em Termo-ciências — Notas de Aula. Universidade Federal do Pará. Centro Tecnológico. Departamento de Engenharia Mecânica. 1999.

SYRED, N. BEER, J. M. Combustion in Swirling Flows: A review. *Combustion and Flame*, v. 23. p. 143- 201, 1974.

USHIMA. A. H. Combustão de Sólidos. In: IPT - Curso de Combustão Industrial - AET, 1999.

USHIMA. A. H., 2000. Curso de Combustão Industrial., Brasil.

VAN WYLEN, G. J.: SONNTAG. R. E. Fundamentos da Termodinâmica Clássica. Edgard Blucher, 1976.

FLUENT Inc., 2003. FLUENT 6.1, User's Guide Volume., vol. 1-4. Lebanon, USA.

FREDRIKSSON, CHISTIAN, 1999. Exploratory Experimental and Theoretical Studies of Cyclone Gasification of Wood Powder., Doctoral Thesis. Division of Energy Engineering, Department of Mechanical Engineering, Lulea University of Technology.

URNS. S. R., 2004. An Introduction to Combustion., McGraw-Hill. USA..

## **COMPARISON BETWEEN EXPERIMENTAL AND CALCULATION RESULTS FOR A REACTIVE FLOW IN A CYCLONE FURNACE**

Adriano Akel Vasconcelos

Campus Universitário do Guamá, Lab. de Eng. Mecânica - LABGAS, Sala 5. Belém-PA-Brasil, CEP: 66075-110  
akel@ufpa.br

Antonio Geraldo de Paula Oliveira

Campus Universitário do Guamá, Lab. de Eng. Mecânica - LABGAS, Sala 5. Belém-PA-Brasil, CEP: 66075-110  
ageraldo@ufpa.br

Jessé Luis Padilha

Campus Universitário do Guamá, Lab. de Eng. Mecânica - LABGAS, Sala 3. Belém-PA-Brasil, CEP: 66075-110  
jessepilha@hotmail.com

Manoel Fernandes Martins Nogueira

Campus Universitário do Guamá, Lab. de Eng. Mecânica; Sala 202. Belém-PA-Brasil, CEP: 66075-110  
mfmn@ufpa.br

Daniel Onofre de Almeida Cruz

Campus Universitário do Guamá, Lab. de Eng. Mecânica; Sala 204. Belém-PA-Brasil, CEP: 66075-110  
doac@ufpa.br

### **Abstract**

Cyclone sawdust combustor promotes a more efficient combustion in a small reaction volume when compared with a fixed bed furnace. It is due the fact that the processes of drying, volatilization and combustion occur in a fluidized bed condition. This advantage rises interest in sawmills industries but difficulties to develop efficient designs has restrained an application of cyclone sawdust furnaces in large scale. In order to obtain an optimized design for this kind of furnace, which has a sophisticated flow pattern, the commercial CFD code Fluent CFD can be applied to simulate the reactive flow if experimental data is available to validate the calculation results. To obtain experimental data, a cyclone combustors was built at the EBMA laboratory with 4m height and 80cm of internal diameter and instrumented to obtain the gases longitudinal temperature, at the wall and at the furnace gas exit. FLUENT Code was used to define the optimum constructive and flow parameters for sawdust/air cyclone combustor, and the FLUENT numerical outputs were compared with experimental results. Numerical and experimental values of temperature were compared for two different inflow lean air/sawdust ratios.

Keywords: Cyclone combustor, Fluent, Biomass combustion

## ANÁLISE IMEDIATA DE BIOMASSAS AMAZÔNICAS

### Antonio Geraldo de Paula Oliveira

Campus Universitário do Guamá, Lab. de Eng. Mecânica - LABGAS, Sala 5. Belém-PA-Brasil, CEP: 66075-110  
ageraldo@ufpa.br

### Genésio Batista Feitosa Netto

Campus Universitário do Guamá, Lab. de Eng. Mecânica, Sala 105

### Manoel Fernandes Martins Nogueira

Campus Universitário do Guamá, Lab. de Eng. Mecânica; Sala 202. Belém-PA-Brasil, CEP: 66075-110  
mfmn@ufpa.br

### Hebert Willian Martins Coutinho

Campus Universitário do Guamá, Lab. de Eng. Mecânica, Sala 206

### Gonçalo Rendeiro

Campus Universitário do Guamá, Lab. de Eng. Mecânica – LABVAPOR, Sala 1, Belém-PA-Brasil, CEP: 66075-110  
rendeiro@ufpa.br

**Resumo.** Os sistemas isolados da Amazônia buscam uma alternativa a geração diesel. Dentre as energias renováveis, eventuais substitutas do petróleo, a biomassa é aquela capaz de fornecer grandes quantidades de energia tanto para transporte quanto para geração de eletricidade. Este trabalho apresenta os resultados da caracterização energética de 80 biomassas sólidas produzidos na Amazônia, através de análise imediata da biomassa seca (teor de voláteis, teor de carbono fixo e teor de cinzas), da determinação do poder calorífico superior e da densidade a granel. Essas informações são essenciais para a qualificação e quantificação do potencial energético disponível na biomassa residual amazônica.

*Palavras chave:* caracterização de biomassa, análise imediata, biomassa amazônica.

### 1. Introdução

Os sistemas isolados da Amazônia buscam uma alternativa a geração diesel. A biomassa vem ganhando espaço no cenário energético, pois dentre as fontes renováveis de energia ela possui potencial de suprir grandes quantidades de energia a preços competitivos e com um mínimo de impacto ambiental, a qualificando como candidato preferencial a substituto energético para os combustíveis fósil (Silva, Rocha et al., ; Rosilo-Calle e Bajay, 2000; Nogueira e Cruz, 2004). No Estado do Pará são processados aproximadamente 10,8 milhões de metros cúbicos de madeira por ano dos quais 3,6 milhões são economicamente viáveis de serem exploradas quando comparadas com a geração diesel perfazendo um total de geração anual de 160 MW médios (Pinheiro, Nunes et al., ; Pinheiro, Rendeiro et al., 2004).

Outra grande aplicação da biomassa é a produção de carvão vegetal fabricado a partir da lenha pelo processo de carbonização ou pirólise. O Brasil é o maior produtor mundial desse insumo energético. No setor industrial (quase 85% do consumo), o ferro-gusa, aço e ferro-ligas são os principais consumidores do carvão de lenha, que funciona como redutor (coque vegetal) e energético ao mesmo tempo. O setor residencial consome cerca de 9% seguido pelo setor comercial com 1,5%, representado por pizzarias, padarias e churrascarias (Infoener e Cenbio, 2006).

Essa qualificação e quantificação do potencial energético da biomassa só podem ser possíveis se estiverem disponíveis os seus parâmetros energéticos (Tillman, 1991). Essa caracterização é feita com a medição do poder calorífico superior, dos teores de voláteis, cinzas, carbono fixo e densidade a granel. Este trabalho apresenta o resultado da caracterização energética de 80 espécies de biomassas da região amazônica realizadas no laboratório do grupo de Energia, Biomassa e Meio Ambiente – EBMA – da Universidade Federal do Pará para dar suporte à determinação do potencial energético de resíduos de biomassa.

### 2. Metodologias Empregadas

A metodologia empregada será descrita separadamente para cada um dos ensaios realizados.

## 2.1 – Amostragem e Preparação das Amostras

A preparação das amostras foi feita obedecendo à norma NBR 6923 (Carvão Vegetal Amostragem e Preparação da Amostra). Este procedimento foi utilizado na preparação das amostras a serem utilizadas nos ensaios de teor de voláteis, cinzas, carbono fixo e também nos ensaios de poder calorífico superior e de densidade a granel. A aparelhagem e materiais utilizados foram:

- Triturador, mostrado na Figura 1;
- Balança analítica com capacidade de 5 kg;
- Saco plástico para freezer com fecho (33 x 41cm), com etiqueta de identificação;
- Saco de ráfia.



Figura 1 – Triturador de amostras (a) Fechado (b) Detalhe local de colocação da amostra

## 2.2 Determinação do Poder Calorífico Superior (PCS).

Os ensaios de determinação do poder calorífico superior foram realizados obedecendo à norma NBR 8633 (Carvão Vegetal Determinação do Poder Calorífico). Foi medido o poder calorífico superior em base seca da biomassa. A aparelhagem utilizada foi uma bomba calorimétrica digital (Modelo C2000 Control, Ike Werke), mostrada na Figura 2.



Figura 2 – Bomba calorimétrica digital

## 2.3 Determinação do Teor de Voláteis.

Os ensaios de determinação do teor de voláteis foram realizados obedecendo à norma NBR 8112 (Carvão Vegetal – Análise Imediata). A aparelhagem e materiais utilizados foram:

- Forno (mufla vertical) com temperatura controlada até 1100° C Mod. VMF / ASTM (Carbolite), mostrado na Figura 3;





Figura 3 – Forno mufla vertical

- Cadinho de aço inox ou porcelana com tampa;
- Espátula de aço inox;
- Balança analítica com sensibilidade de 0,001 g;
- Cronômetro;
- Luva de kevlar;
- Avental de raspa;
- Pinça metálica de cabo longo;
- Recipiente de cerâmica;
- Suporte metálico para o cadinho;
- Placa de amianto.

#### 2.4 - Determinação do Teor de Cinzas

Os ensaios de determinação do teor de voláteis foram realizados obedecendo à norma NBR 8112 (Carvão Vegetal – Análise Imediata). A aparelhagem e materiais utilizados foram:

- Forno (mufla horizontal) com temperatura controlada até 1100° C (Modelo AAF 1100 Carbolite), mostrado na Figura 4.



Figura 4 – Forno mufla

- Cadinho de aço inox ou porcelana com tampa;
- Espátula de aço inox;
- Balança analítica com sensibilidade de 0,001 g;
- Luva de kevlar;
- Avental de raspa;
- Pinça metálica de cabo longo;
- Recipiente cerâmico;
- Bandeja com cabo do forno.

## 2.5 - Determinação do Teor de Carbono Fixo

Os ensaios de determinação do teor de voláteis foram realizados obedecendo à norma NBR 8112 (Carvão Vegetal – Análise Imediata). A aparelhagem e materiais utilizados foram os mesmos do item 2.4.

## 2.6 - Determinação da Massa Específica (Densidade à Granel)

Os ensaios de determinação da massa específica foram realizados obedecendo à norma NBR 6922 (Ensaio Físico Determinação da Massa Específica). Os materiais utilizados foram:

- Balança com capacidade máxima igual a 130 kg e precisão de 50 gramas;
- Caixa de paredes rígidas com as seguintes dimensões internas. 600x600x600 mm, e de massa conhecida.

## 3. Resultados

A Tabela 1 mostra os resultados obtidos através dos ensaios realizados com as diferentes espécies de biomassa.

Tabela 1: Propriedades das espécies de biomassas ensaiadas.

ID	Nome Comercial	Nome científico:	PCS (kcal/kg)	Carbono Fixo (%)	Teor de Voláteis (%)	Teor de Cinzas (%)	Densidade à Granel (kg/m <sup>3</sup> )
1	Acapu		4944.30	20.907	78.718	0.3745	250.0
2	Amesclão	<i>Trattinnickia burseraefolia</i>	4500.00				255.00
3	Anani		4400.00				269.00
4	Andiroba	<i>Carapa guianensis</i> Aubl.	4720.67	10.14	89.86	0.00	290.00
5	Angelim		4183.33	15.13	70.01	14.86	280.00
6	Angelim fava		4200.00				260.00
7	Angelim Pedra	<i>Hymenolobium</i> spp.	4739.40	17.15	81.56	1.30	265.00
8	Angelim vermelho	<i>Dinizia excelsa</i>	4881.00	20.34	79.61	0.05	250.00
9	Araracanga	<i>Aspidosperma desmanthum</i>	4500.00				280.00
10	Bacuri	<i>Platonia insignis</i>	4600.00				280.00
11	Bambu		4533.67	17.78	81.34	0.88	267.00
12	Breo		4756.20	14.19	85.62	0.19	259.00
13	Buchas trituradas de dendê		4142.40	15.23	72.86	9.91	298.00
14	Cacho seco de amêndoa		4622.67	16.60	80.55	2.85	200.00

ID	Nome Comercial	Nome científico:	PCS (kcal/kg)	Carbono Fixo (%)	Teor de Voláteis (%)	Teor de Cinzas (%)	Densidade à Granel (kg/m <sup>3</sup> )
15	Cajuaçu	<i>Anacardium spp.</i>	4200.00				230.00
16	Caroço de açaí	NT	4576.00	19.45	79.44	1.11	240.00
17	Casca de amêndoa		5308.33	20.66	77.73	1.61	220.00
18	Casca de palmito		3864.67	18.00	76.14	5.86	240.00
19	Cascas de castanha do Pará		4843.60	27.07	71.04	1.88	240.00
20	Cascas de nozes		5039.00	22.49	75.86	1.65	260.00
21	Cedrinho	<i>Erisma uncinatum</i>	4400.00				235.00
22	Cedro		4827.20	15.27	84.63	0.10	249.00
23	Cedrorana	<i>Cedrelinga catenaeformis</i>	4300.00				250.00
24	Cedro-rosa		4400.00				260.00
25	Copaíba	<i>Copaifera spp.</i>	4755.00	9.05	90.87	0.08	250.00
26	Cumarú	<i>Dipteryx odorata</i>	4810.30	13.29	86.65	0.07	270.00
27	Cupiúba	<i>Goupia glabra</i>	4500.00				260.00
28	Curupixá	<i>Micropholis venulosa</i>	4600.00				255.00
29	Faieira	<i>Roupala montana</i>	4400.00				210.00
30	Falso Pau-Brasil		5257.20	21.42	78.39	0.19	220.00
31	Fava-Amargosa	<i>vatairea spp.</i>	4400.00				210.00
32	Faveira-Bolota	<i>Parkia pendula</i>	4300.00				213.00
33	Faveira-Branca	<i>Parkia spp.</i>	4400.00				235.00
34	Fibra de coco		4458.33	24.67	70.60	4.73	282.00
35	Fibra de dendê		3953.18	19.59	76.21	4.20	200.00
36	Frejól		4400.00				200.00
37	Garapa		4463.00	18.33	78.51	3.17	200.00
38	Goiabão	<i>Pouteria pachycarpa</i>	4300.00				250.00

<b>ID</b>	<b>Nome Comercial</b>	<b>Nome científico:</b>	<b>PCS (kcal/kg)</b>	<b>Carbono Fixo (%)</b>	<b>Teor de Voláteis (%)</b>	<b>Teor de Cinzas (%)</b>	<b>Densidade à Granel (kg/m<sup>3</sup>)</b>
39	Guariúba	<i>Clarisia racemosa</i>	4300.00				220.00
40	Ipê	<i>Tabebuia spp.</i>	4400.00				230.00
41	Jarana	<i>Lecythis lurida</i>	4500.00				220.00
42	Jatobá	<i>Hymenaea courbaril</i>	4636.60	19.99	79.63	0.38	200.00
43	Jutaí		4400.00				230.00
44	Louro	<i>Ocotea spp./Nectandra spp.</i>	4200.00				280.00
45	Louro-Faia	<i>Euplassa spp.</i>	4710.00	17.75	82.04	0.21	230.00
46	Louro-vermelho	<i>Nectandra rubra</i>	4000.00				220.00
47	Macacaúba	<i>Playmiscium spp.</i>	4100.00				200.00
48	Maçaranduba	<i>Manilkara spp.</i>	4804.33	17.36	82.43	0.20	373.00
49	Mandioqueira	<i>Qualea albiflora</i>	4705.30	16.04	83.23	0.73	200.00
50	Marupá	<i>Simarouba amara</i>	4739.00	14.81	84.91	0.27	230.00
51	Melancieiro		4770.67	5.36	93.87	0.77	220.00
52	Mogno		4740.20	19.72	78.43	1.84	250.00
53	Morototó	<i>Schefflera morototoni</i>	4200.00				230.00
54	Muirapiranga	<i>Brosimum spp.</i>	4000.00				260.00
55	Munguba-Grande-da-Terra-Firme	<i>Eriotheca longipedicellata</i>	4200.00				250.00
56	Orelha-de-Macaco	<i>Enterolobium schomburgkii</i>	4000.00				255.00
57	Palmito		3977.67	17.63	76.24	6.13	230.00
58	Parapará	<i>jacaranda copaia</i>	3900.00				220.00

ID	Nome Comercial	Nome científico:	PCS (kcal/kg)	Carbono Fixo (%)	Teor de Voláteis (%)	Teor de Cinzas (%)	Densidade à Granel (kg/m <sup>3</sup> )
59	Pau-Amarelo	<i>Euxylophora paraensis</i>	4000.00				200.00
60	Pau-marfim		4611.30	15.25	84.07	0.69	237.00
61	Pau-preto		5307.80	20.02	79.36	0.62	210.00
62	Pequiá	<i>Caryocar villosum</i>	4749.20	15.60	82.63	1.77	280.00
63	Pequiarana	<i>Caryocar glabrum</i>	3900.00				300.00
64	Pracuuba		4894.00	18.17	80.92	0.91	280.00
65	Quaruba	<i>Vochysia spp.</i>	4518.40	17.06	81.96	0.97	250.00
66	Quenga de coco		4908.67	19.30	79.74	0.95	300.00
67	Resíduo de favadanta		4774.70	19.08	76.86	4.06	313.00
68	Resíduo de uncária		4965.00	21.49	70.10	8.41	222.00
69	Roxinho	<i>Peltogyne spp.</i>	4740.00	19.59	80.08	0.33	230.00
70	Sapucaia	<i>Lecythis pisonis</i>	4000.00				240.00
71	Sucupira	<i>Bowdichia nitida</i>	4824.20	16.70	82.76	1.69	250.00
72	Sumaúma	<i>Ceiba pentandra</i>	3900.00				240.00
73	Talo de uncária		4663.70	22.32	74.81	2.87	230.00
74	Tamboril	<i>Enterolobium maximum</i>	3600.00				240.00
75	Tanimbuca	<i>Buchenavia spp.</i>	4679.40	19.80	78.01	2.26	200.00
76	Tatajuba	<i>Bagassa guianensis</i>	4570.33	17.58	81.81	0.61	240.00
77	Tauari	<i>Couratari spp.</i>	4745.80	16.75	82.56	0.69	200.00
78	Taxi	<i>Tachigali myrmecophila</i>	4000.00				200.00
79	Timborana	<i>piptadenia suaveolens</i>	4200.00				230.00
80	Uxi	<i>Endopleura uchi</i>	3900.00				200.00

#### 4. Conclusões

Pode-se observar na Figura 5 e na Figura 6 que as biomassas, no geral, apresentam consideráveis diferenças em suas composições.

O valor médio do poder calorífico superior (PCS) encontrado foi de 4691,06 kJ/kg, apresentando um desvio padrão de 312,09 kJ/kg, a espécie com o maior PCS foi a casca de Amêndoa com 5308,33 kJ/kg e o menor foi a casca de Palmito com 3864,67 kJ/kg. Como mostrado na Figura 5.

Quanto ao teor de voláteis, a média foi de 80,06%, apresentando um desvio padrão de 5,19%, a espécie com o maior teor de voláteis foi o Melanceiro com 93,87% e com o menor foi o Angelim com 70%.

O teor de carbono fixo médio foi de 17,77% com um desvio padrão de 3,87%, a espécie com o maior teor de carbono fixo foi a casca de Castanha do Pará com 27,07% e a que apresentou um menor teor foi o Melanceiro com 5,35% .

O teor de cinzas médio foi de 2,17% com um desvio padrão de 3% , tendo por espécie com maior teor de cinzas o Angelim com 14,85% e com menor o Angelim Vermelho com 0,05%.

A densidade a granel entre as espécies apresentou uma média de 246,63 kg/m<sup>3</sup> com um desvio padrão de 36,182 kg/m<sup>3</sup>, onde a espécie de maior densidade a granel foi a Maçaranduba com 373 kg/m<sup>3</sup> e a menor densidade obtive-se do Cacho Seco de Amêndoa com 200 kg/m<sup>3</sup>.

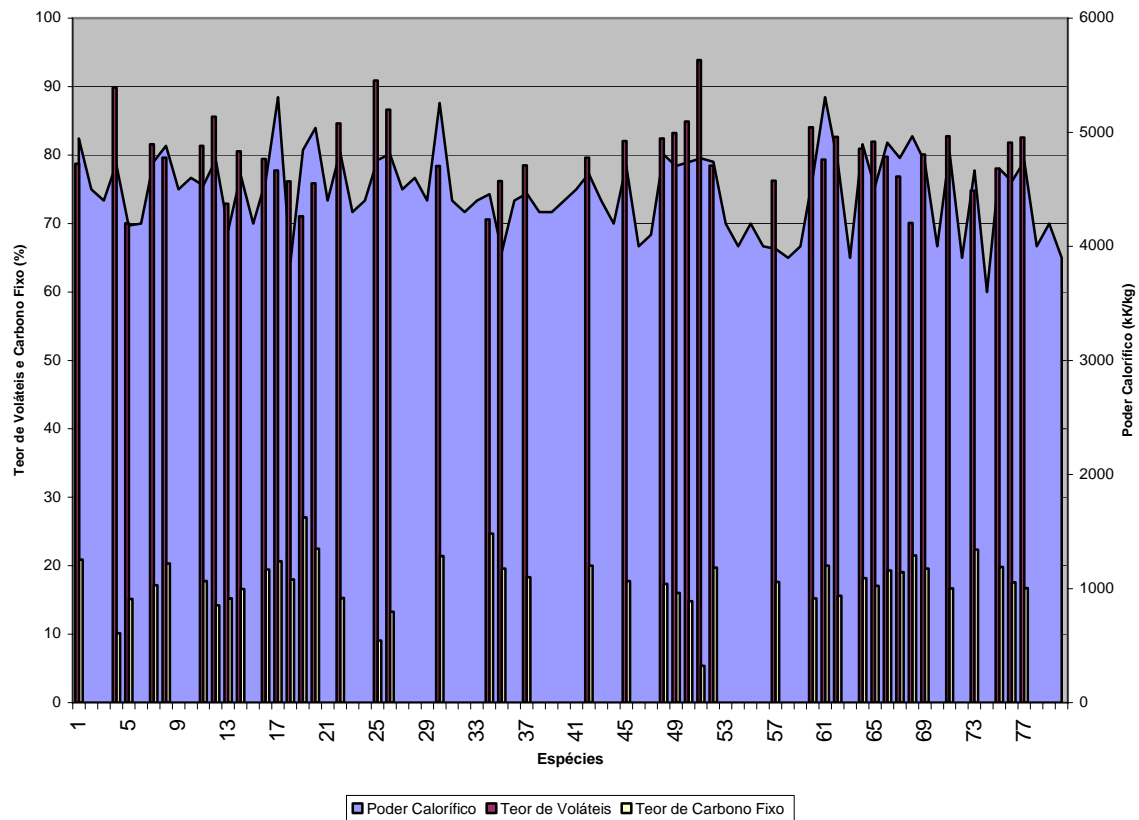


Figura 5: Gráfico das propriedades das espécies.

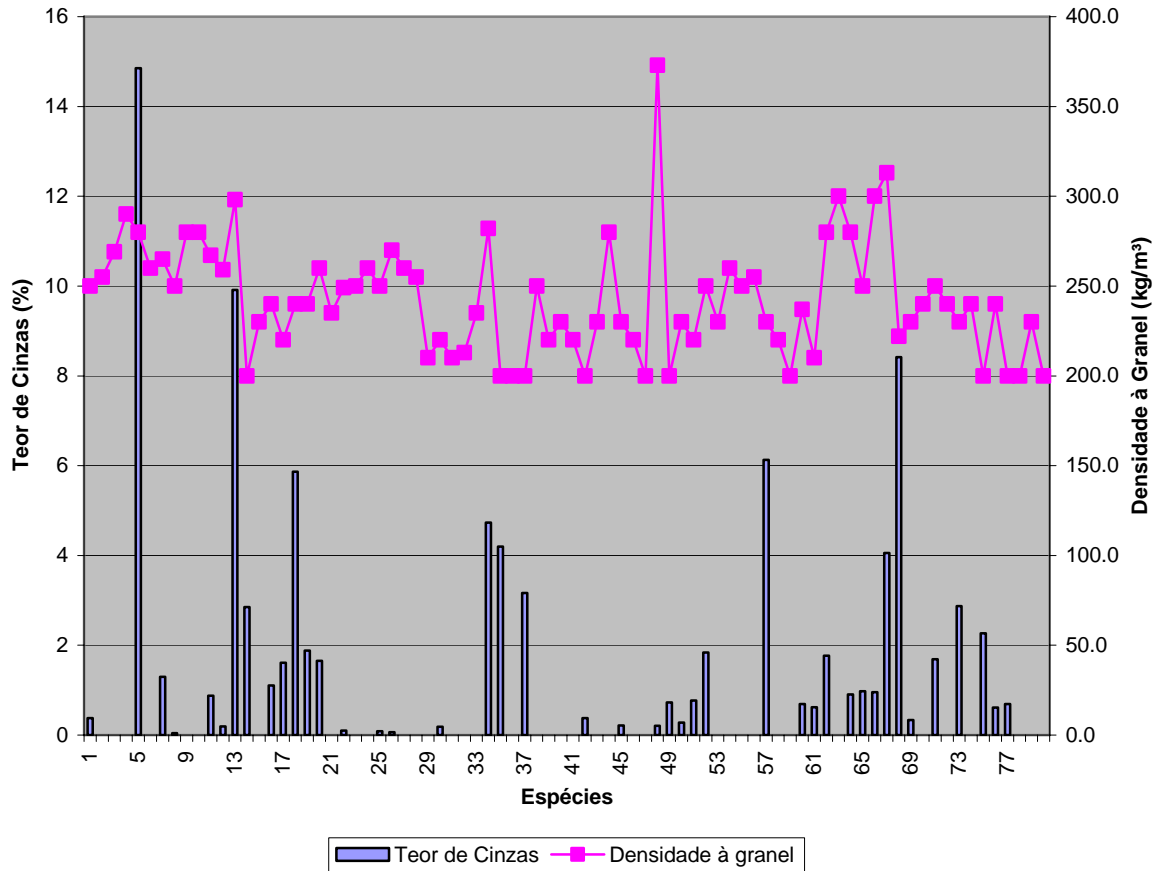


Figura 6: Gráfico das propriedades das espécies.

### Agradecimentos

Os autores agradecem o apoio do MME no financiamento do projeto de Implantação da Planta de Potência a Vapor, a Rede CELPA e ao CNPQ por conceder bolsa aos alunos.

### Referências Bibliográficas

- Infoener e Cenbio. Banco de Dados de Biomassa no Brasil - Carvão Vegetal: [http://infoener.iee.usp.br/scripts/biomassa/br\\_carvao.asp](http://infoener.iee.usp.br/scripts/biomassa/br_carvao.asp) 2006.
- Nogueira, M. F. M. e P. T. A. Cruz. Oportunidades para o Desenvolvimento da Biomassa Energética no Brasil. *Biomassa Energia*, v.1, n.2, p.29-36. 2004.
- Pinheiro, G., M. V. Nunes, et al. Qualidade de Energia na Geração Distribuída - Caso de Usina de Biomassa. UFPA. Belém:
- Pinheiro, G., G. Rendeiro, et al. Resíduos do Setor Madeireiro: Aproveitamento Energético. *Biomassa & Energia*, v.1, n.2, p.199-208. 2004.
- Rosilo-Calle, F. e S. V. Bajay. Uso da Biomassa para Produção de Energia na Indústria Brasileira. Campinas: editora Unicamp. 2000. 447 p.
- Silva, I. M. O. D., B. R. P. D. Rocha, et al. Biomass Residues for Energy Generation in Marajo Island, Brazil. UFPA. Belém:
- Tillman, D. A. The Combustion of Solid Fuels and wastes. San Diego: Academic Press. 1991. 378 p.

## **PROXIMATE ANALYSIS FOR AMAZON BIOMASSES**

Genésio Batista Feitosa Netto  
Campus Universitário do Guamá, Lab. de Eng. Mecânica, Sala 105

Antonio Geraldo de Paula Oliveira  
Campus Universitário do Guamá, Lab. de Eng. Mecânica-LABGAS, Sala 5  
ageraldo@ufpa.br

Manoel Fernandes Martins Nogueira  
Campus Universitário do Guamá, Lab. de Eng. Mecânica, Sala 201  
mfmn@ufpa.br

Hebert Willian Martins Coutinho  
Campus Universitário do Guamá, Lab. de Eng. Mecânica, Sala 206

Gonçalo Rendeiro  
Campus Universitário do Guamá, Lab. de Eng. Mecânica-LABVAPOR, Sala 1  
rendeiro@ufpa.br

### **Abstract**

In order to assess the potentiality of Amazon biomasses to generate power, either to supply electric energy to the grid or as fuel to plants supplying power for off-grid location, data for their proximate analysis must be available. A literature review on the subject indicated a lack of information and data concerning typical Amazon rain forest species. This work aimed to characterize (proximate analysis) 80 Amazon species in order to evaluate the energy resource from woody biomass wastes in Amazon region. Higher Heating Value, Carbon, Volatile and Ash contents were measured in a dry basis. The measurements were performed obeying the following Brazilian standards, NBR 6923, NBR 8112, NBR 8633, NBR 6922.

Keywords: proximate analysis, Amazon biomasses, biomass characterization



## THE EFFECT OF THERMAL RADIATION MODELS P-1 E DO ON THE CALCULATION OF TURBULENT REACTIVE FLOW MODELED WITH RSM OR RNG k- $\epsilon$ .

### Fábio Alfaia da Cunha

Departamento de Engenharia Mecânica, Centro Tecnológico, Universidade Federal do Pará.  
Rua Augusto Corrêa S/N, Guamá, Belém – PA – Brasil, CEP: 66075-110  
alfai@ufpa.br

### Pedro Andrey Cavalcante Sampaio

Departamento de Engenharia Mecânica, Centro Tecnológico, Universidade Federal do Pará.  
Rua Augusto Corrêa S/N, Guamá, Belém – PA – Brasil, CEP: 66075-110  
asampaio@ufpa.br

### Manoel Fernandes Martins Nogueira

Departamento de Engenharia Mecânica, Centro Tecnológico, Universidade Federal do Pará.  
Rua Augusto Corrêa S/N, Guamá, Belém – PA – Brasil, CEP: 66075-110  
mfmn@ufpa.br

### Daniel Onofre de Almeida Cruz

Departamento de Engenharia Mecânica, Centro Tecnológico, Universidade Federal do Pará.  
Rua Augusto Corrêa S/N, Guamá, Belém – PA – Brasil, CEP: 66075-110  
doac@ufpa.br

*abstract.* EBMA group seeks to use the CFD code Fluent to design efficient cyclone furnaces to carry out combustion of sawdust and air. The group is looking for a combination of models to represent the radiation heat transfer and turbulence phenomena in such way that they require a minimum of computing time and yet have an acceptable agreement with experimental data. This work performed a calculation for a two phase (solid and gas phases) flow in cyclone combustor modeling the chemical reaction with a Presumed PDF/mixture fraction model and evaluating solutions for four different combinations of thermal radiation (P-1 and Discrete Ordinate – DO) with turbulent models. The four results were compared and the pair RSM-DO was chosen as the model that produced most reasonable results and to be used in further calculations. P1-RNG k- $\epsilon$  and P1-RSM pair generated temperature above the adiabatic flame temperature or lower than the inflow air temperature. DO-RSM pair and DO-RNG k- $\epsilon$  models generated reasonable values. The option for DO-RSM was due the fact that this turbulence model has proved to predict results closer the experimental ones in cylindrical flows, what is the case in this study.

*Key words:* thermal radiation models, turbulence models, cyclone furnaces.

## 1. Introduction

Most of the furnaces, traditionally used in the Amazon region, are of large dimensions and low efficiency, high means, a low daily burning capacity. That limitation can be eliminated by some project optimization or by the use of some other furnace type. The cyclone furnace, for example, is one of the devices that can be used to burn solid particles in suspension. The cyclonic combustion represents an alternative for the conventional suspension combustion, it has the advantage to operate with various types of fuels like saw dust and many others agricultural disposals.

The correct prediction of the flow field is a very important parameter to be considered on the project of a cyclone furnace. Due to its tri-dimensional nature, the cyclonic flow is very complex. The mathematical model used to describe such flow is also very complex, and a very accurate and stable turbulence model must be used combined with a robust numerical method, in order to obtain consistent results. The present work shows the results obtained after the numerical simulation of the cyclonic chamber of the UFPa Energy, Biomass and environment Group Laboratory.

A comparison of two turbulence models RNG-k- $\epsilon$  and RSM was performed. Not only the accuracy of the above cited models is analyzed, but also their convergence capacity. Two radiation models are compared too, the P-1 model and the DO model. The FLUENT v 6.0 was used to carry out the calculations

## 2. The cyclone combustor

A cyclone combustor is a cylindrical chamber where air and solid particles follow a spiral flow path due to the tangential entrance of the inflow in the combustion chamber. This kind of entrance promotes high coefficients for heat

and mass transfer and also high volumetric reaction rates, with values in the range of 4 to 8 MW/m<sup>3</sup> (Ushima, 1999). This kind of furnace, shown in the figure 1, is in its final stage of construction at the Mechanical Engineering Laboratory of the UFPA. It is 4.0 m tall with 0.84 m internal diameter and will be used to produce experimental results to validate the computational calculations

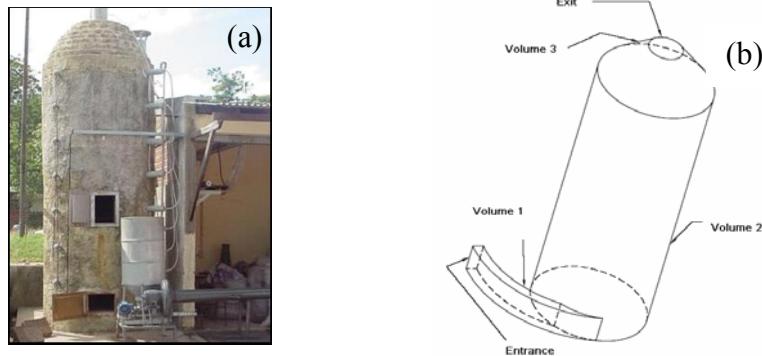


Figure 1. The cyclone furnace to obtain experimental data (a) and its geometry applied on calculations (b).

### 3. Geometry and mesh

All physical parameters needed were obtained from the cyclone furnace described in Figure 1(a) and the mesh needed for the Fluent to perform the calculation was built with the software Gambit. To simplify the mesh construction, the cyclone geometry was divided in three volumes: entrance, body and exit, as shown in Figure 1(b). Hexahedron cells were used to create the mesh. FLUENT (2003) directions to build a mesh for combustion case are: low EquiAngle Skew: <0.9, moderate aspect ratio (<10), smooth changing on cell volume (<30%), the cell boundary should be as orthogonal as possible. The mesh built has 0.66 as maximum EquiAngle skew and 7 as maximum Aspect ratio. The combustor mesh ended up with 105.000 cells.

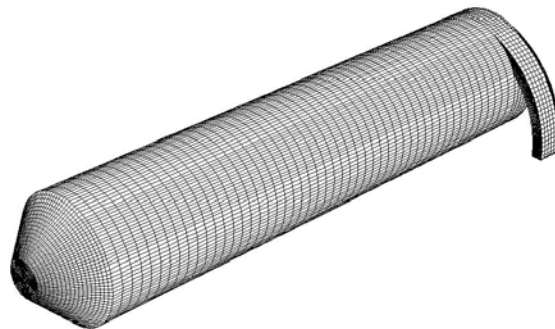


Figure 2. Combustor mesh.

### 4. Computational models

#### 4.1 Turbulence models

Reynolds equations describe the turbulent flow. The most common way to close the Reynolds average Navier-Stokes equations is applying the Boussinesq hypothesis to related Reynolds stress to the mean velocity gradient, and this work will also do so. On the other hand, this work will not apply the regular  $k$ - $\epsilon$  model. Instead, one of its derivatives named RNG  $k$ - $\epsilon$  model (Orszag et al 1993) model was applied. In this last model the scales on the Navier-Stoke equation are deduced using the renormalization group theory. The authors choose such derivative because this one is based on constants and functions theoretically deduced in opposite the empirical ones used on the standard  $k$ - $\epsilon$  model.

In the Reynolds stress turbulence model, the closure of the equations involves the solution of a transport equation for each term of the Reynolds stress tensor. Besides that, an additional equation for a scalar equation (usually for  $\epsilon$ ) is needed. This means that seven equations must be solved simultaneously for the 3D case, as described in FLUENT (2003).

#### 4.2. Model for combustion: Mixture fraction

The mixture fraction method is based on the solution for the transport equation for two conserved scalars named mixture fraction,  $f$ , and its variance,  $\overline{f'^2}$  in which a form for the PDF of the fluctuations in a conserved scalar is assumed (Sivathanu et al 1990). For a fuel/oxidizer system, the mixture fraction is defined as:

$$f = \frac{m_F}{m_F + m_{Ox}} \quad (1)$$

where  $m$  is mass, the subscript  $Ox$  denotes oxidizer and the subscript  $F$  means fuel.

#### 4.3. Mathematical equations

Turbulent flows have its turbulent mass convection a few orders of magnitude bigger than the mass diffusion. In this case is reasonable to consider that the thermal diffusivity is equal to the molecular diffusion, Lewis number = 1 (Jones 1982), therefore all the conservation equations reduce to only one as a function of the mean mixture fraction,  $\overline{f}$ .

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \overline{f}) + \nabla(\rho \overline{v} \overline{f}) = \nabla \left( \frac{\mu_t}{\sigma_t} \nabla \overline{f} \right) + S_m \quad (2)$$

where  $\overline{v}$  is velocity,  $\rho$  is air density,  $\mu_t$  is turbulent viscosity, and  $\sigma_t$  is turbulent Prandtl number. The source term  $S_m$  is due solely to mass transfer from solid particles into gas phase. The mixture fraction model also requires a solution for  $\overline{f'^2}$  coming from the following conservative equation must be obtained.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \overline{f'^2}) + \nabla(\rho \overline{v} \overline{f'^2}) = \nabla \left( \frac{\mu_t}{\sigma_t} \nabla \overline{f'^2} \right) + C_g \mu_t (\nabla^2 \overline{f}) - C_d \rho \frac{\varepsilon}{k} \overline{f'^2} \quad (3)$$

where  $f' = f - \overline{f}$ , temporal fluctuation of  $f$ .  $\sigma_t$ ,  $C_g$  and  $C_d$  are constants with values 0.85, 2.86 e 2.0, respectively defined at Fluent's manual 2003.  $\varepsilon$  and  $k$  are the eddy dissipation rate and turbulence kinetic energy. Scalar mean values due its variation during the turbulent fluctuations such as species concentration, density and temperature, they were evaluated with the help of the probability density function, PDF. This function describes the time fluctuation of  $f$  due the effects of chemical reaction and turbulent flow. In this work the PDF was modeled as a two-moment beta function,  $p(f)$ , given for the following expression.

$$p(f) = \frac{f^{\alpha-1} (1-f)^{\beta-1}}{\int_0^1 f^{\alpha-1} (1-f)^{\beta-1} df} \quad (4)$$

where:  $\alpha = \overline{f} \left[ \overline{f} (1-\overline{f}) / \overline{f'^2} - 1 \right]$  and  $\beta = (1-\overline{f}) \left[ \overline{f} (1-\overline{f}) / \overline{f'^2} - 1 \right]$

#### 4.4. Model for the flow of the solid phase

Fluent uses a Lagrange description for the solid phase flow. The changing in properties during its moving through the gas phase is calculated through a set of ordinary differential equations representing the conservation equations of mass, momentum and energy. In this description, the initial solid phase properties and conditions are the input to start the calculation. The calculation results are the flow path, heat and mass transfer. The solid phase is dispersion in the gas phase was determined through the stochastic tracking model. The equations of heating, volatilization and carbon oxidation are integrated through the calculated particle path. The calculation starts with the particle drying, than the its volatilization and finally the particle oxidation, what now is coal, being oxidation the process which last long (Ragland et al. 1998). The model adopted to describe the volatilization is a first order reaction with a single kinetic rate.

$$-\frac{dm_p}{dt} = k \left[ m_p - (1-f_{v,0}) m_{p,0} \right] \quad (5)$$

where  $m_p$  is the temporal particle mass (kg),  $f_{v,0}$  is the initial volatiles mass fraction in the particle,  $m_{p,0}$  is the initial mass particle (kg),  $k$  is the rate constant (s<sup>-1</sup>) following the Arrhenius definition for the rate constant:  $k = A_1 e^{-(E/RT)}$ . In this work A1 and E were defined as 7.0 E+7 s<sup>-1</sup> and 1.2964 E+8 J/kgmol respectively (Ragland 1998).

The surface reaction is a sink for the oxidant species and a source of products species to the gas phase. In this work, a kinetic/diffusion-limited model was adopted and a heterogeneous reaction on the particle surface is represented for the equation (6).

$$\frac{dm_p}{dt} = -A_p P_{ox} \frac{D_0 \mathfrak{R}}{D_0 + \mathfrak{R}} \quad (6)$$

where  $A_p$  is the superficial area of a particle ( $\pi d_p^2$ ),  $P_{ox}$  is the oxidant partial pressure that surrounds a particle. The kinetic rate,  $\mathfrak{R} = C_2 e^{-(E/RT_p)}$ , incorporate the effects of chemical reaction on the internal surface of the char particle, residue of biomass volatilization and pore diffusion ( $C_2 = 2E-3$ ). The diffusion of the gaseous oxidant to the surface of the particle is given by,

$$D_0 = C_1 \left[ \frac{T_p - T_\infty}{2} \right]^{0.75} / d_p \quad (7)$$

where  $T_p$  is the particle temperature,  $T_\infty$  is the local fluid temperature and  $C_1$  is the mass diffusion limited rate constant with adopted value 5E-12.

#### 4.5. Radiation models

The model P-1 is the simplest case of the P-N model which is based on the expansion of the radiation intensity on spherical harmonic orthogonal series FLUENT (2003). The model assumes that all the surfaces are diffuses, in other words, the reflection of the radiation that reaches some surface is isotropic. Besides that, the hypothesis of gray radiation is assumed. According to FLUENT (2003), for applications where the optical thickness is large the model P-1 works well. The optical thickness is defined as  $(a+\sigma_s) L$ , where  $L$  is an appropriate characteristic length, which could be the furnace diameter for example. The equations that describe the model P-1 are show in FLUENT (2003).

The DO (Discrete ordinates) model solves de radiation heat transfer equation for a finite number of discrete solid angles; each one is related to the direction vector  $\vec{S}$  defined at the global Cartesian system (x,y,z), the discrete mesh nodes are defined at the polar ( $\theta$ ,  $0 < \theta < \pi/2$ ) and the azimuthal ( $\Phi$ ,  $0 < \Phi < \pi/2$ ) directions. The model transforms the radiation heat transfer equation into a transport equation for the radiation intensities on the space coordinates (x,y,z), but the number of equations to be solved are less than the number of the vector  $\vec{S}$  directions. Each octet of the angular space  $4\pi$ , at any space location is divided in  $N_\phi \times N_\theta$  solid angles, each one having the width of  $\omega_i$  which is called as control angle. The total number of transport equations to be solved is  $8N_\phi N_\theta$ , in other words at least 8 equations are solved for each 3D space octet, the number o mesh nodes can be controlled by the Fluent v.6.0 user. The DO model assumes an anisotropic spread of the radiation and can be applied to any optical thickness which means that he model can be used for any degree of the medium opacity. The DO model is computationally, one of the most expensive

#### 5. Simulated cases

The P-1 and DO models are extensively used to numerically simulate combustion. The P-1 model has some limitations, basically related to the optical thickness, but it is very popular in practical situations due to its relatively low computational cost (Ilbas, 2005). It is well known that the DO model shows a superior performance, since it can be used for any degree of the medium opacity. But as mentioned before, the DO model needs more computational resources and is more expensive than the P-1 model.

To compare the predictions of the above cited models four combustion cases were simulated, as show in table 1.

Table 1. Simulated cases identification.

Models→ Cases↓	Turbulence model		Radiation model	
	RNG k-ε	RSM	P-1	DO
C1		x	x	
C2		x		x
C3	X		x	
C4	X			x

For all the simulated cases, the mixed fraction model /PDF for combustion were used. Based in some previous simulations, the angular mesh ( $N_\phi \times N_\theta$ ) of 6x6 was adopted this means, that the radiation heat transfer equation was solved for 288 (8x6x6) directions for each control volume. For the solid phase, a single rate model, equation (3.38) was used to simulate the particles volatilization and for the fixed carbon-oxygen reaction, the model described by equation (3.56) was used. To describe the turbulent particle dispersion the DRW modes was adopted. The particles mass was distributed in 76800 trajectories. The mass, heat and momentum exchanges between the gas and the solid particles are also considered while the calculations were performed. The wood characteristics and thermal parameters are show in the tables 2 and 3 respectively.

Table 2. Fuel chemical composition.

Elemental analysis (%)		Immediate Analysis (%)	
C	52,70	Volatiles	31,50
H	6,01	Fixed Carbon	44,00
O	41,23	Ashes	1,99
N	-	Humidity	23,50
Cl	-	Inferior caloric power (MJ/kg)	19,77

Table 3. Properties and .some parameters used at the simulation.

Parameter	Value	Data source
Fuel Flow Rate	0,02 kg/s	-
Air Flow Rate	0,1475 kg/s	-
Density	650kg/m3	-
Cp	1760 J/kg-K	Van Wylene (1993)
Thermal Conductivity	0,173 w/m-K	Ragland (1998)
Gases absorption factor	Calculated using the wsggm model	
Volatilization model (single rate)	A=7e7s-1 E=1.2964e+008 J/kgmol	Ragland and Aerts, 1991
Combustion model (kinetics/diffusion-limited)	C1=5e-12 C2=0.002 E=79000000	Fluent standard values

## 6. Boundary conditions.

The no slip condition was used at the wall furnace. In the near wall region a Non Equilibrium Wall Function (Fluent 2003) was used to calculate the mean velocity and the turbulent kinetic energy. An air mass rate of 0.144 kg/s was used as an inlet condition. At the entrance the turbulent intensity and the length scale are respectively 10% and 0.056.

At the chamber exit, the pressure filed was calculated using equation (8). This equation assumes that the centrifugal forces created buy the swirl flow are balanced by the pressure gradient (FLUENT 2003).

$$\frac{\partial p}{\partial r} = \frac{\rho v_\theta^2}{r} \quad (8)$$

$$p(r = 0) = p_0 \quad (9)$$

Where r is the radial coordinate  $v_\theta$  is the tangential velocity and  $p_0$  is the pressure at the centerline which was considered as 101325Pa. In this case, a specific pressure condition is applied only at  $r = 0$ . At the chamber exit the turbulent intensity was considered as 10% and the hydraulic diameter was equal 0.25.

The chamber walls are assumed as adiabatic with emissivity of 0.7. For the solid phase, the same parameters used in previous experiment performed at the UFPa Energy, Biomass and environment Group Laboratory cyclone furnace were used. It was represented by a ten diameter distribution between 20-40 $\mu\text{m}$ , each diameter is related to a mass fraction given by the Roisin-Rammler distribution function. The values of  $\bar{d} = 161\mu\text{m}$  and  $n = 3.67$  were obtained after some adjustments based on experimental data. The initial positions of the particles were at the entrance region, the initial velocities were:  $u_x = 1.97\text{m/s}$ ,  $u_y = -6.71\text{m/s}$  e  $u_z = 0$ . The initial temperature was 308K. A 0.5 restitution coefficient was adopted (Fredriksson (1999)) after the collision of the particles with the wall. The carbon emissivity was adopted for the particles in suspension, which is 0.8 (Raglan and Aerts (1991))

**7. Discussions and conclusion**

The calculations took approximately 7 days to converge for each case. Table 4 shows the mean values of the molar fraction of the following substances CO, CO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O and O<sub>2</sub>, calculated at chamber exit. No CO and H<sub>2</sub> were found at the chamber exit for the C1 case. The molar values of CO<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O and are of the same order of magnitude for each calculated case, in contrast, the values of CO and H<sub>2</sub> are much smaller.

Table 4. Mean molar fraction at the furnace exit

	C1 (RSM+P1)	C2 (RSM+DO)	C3 (KE+P1)	C4 (KE+DO)
XCO	0,000000	0,000757	0,003306	0,005203
XCO <sub>2</sub>	0,095864	0,104196	0,086722	0,095808
XH <sub>2</sub>	0,000000	0,000139	0,001446	0,002085
XN <sub>2</sub>	0,741980	0,737190	0,743040	0,736600
XH <sub>2</sub> O	0,065617	0,071579	0,060190	0,067010
XO <sub>2</sub>	0,096611	0,086279	0,105411	0,093461

Obs: KE represents the RNG k- $\epsilon$  model

In order to help the analysis of the simulated cases, the distributions of CO, CO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O and O<sub>2</sub> at the central chamber plane are show below.

It can be seen that concentrations of CO and CO<sub>2</sub> are higher at the chamber center, that is the region where the predictions between RNG/ $\kappa$ - $\epsilon$  and the RSN show the major difference. As can be seen in figure 3 the difference of the predictions for the mixture fraction field at the outlet region, given by the above cited modes, is remarkable. This fact is not really surprising since it is well known that the models which uses the turbulent viscosity concept are not adequate for swirl flows due to it's strong anisotropy (FREDRIKSSON, 1999).

In spite of the mean values of the molar fraction of CO<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O and O<sub>2</sub> are not so different at the outlet region for the four simulate cases, a closer inspection of the figures 5,6,7 and 9 reveals that the distribution inside of the furnace are greatly different for the C1,C2 and C3 cases. The C3 and C4 are the cases with closest results.

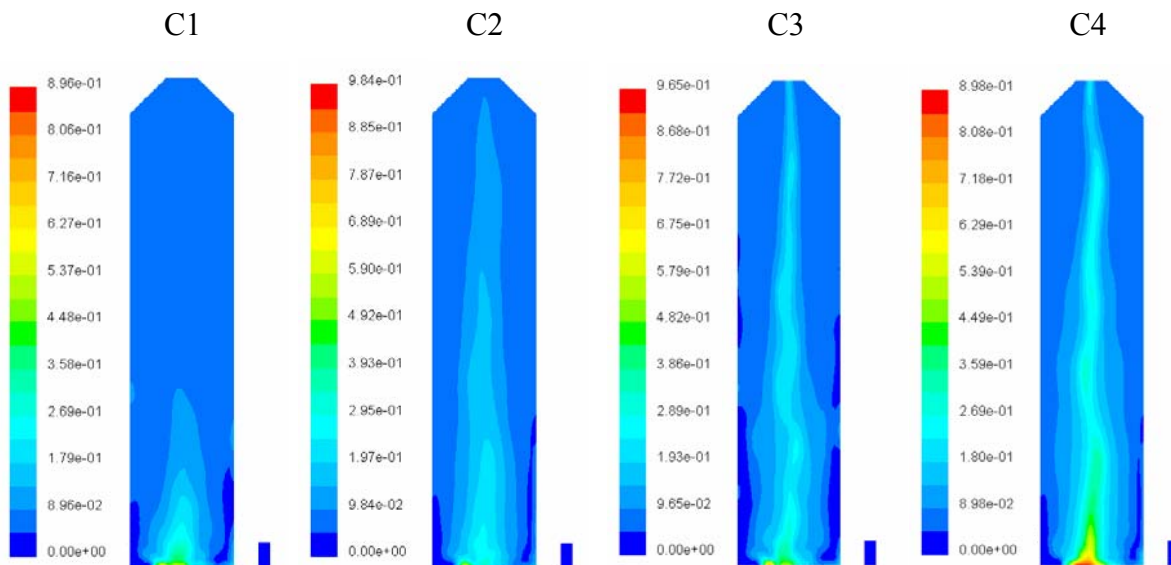


Figure 3. Mixture fraction distribution for C1, C2, C3 and C4 cases.

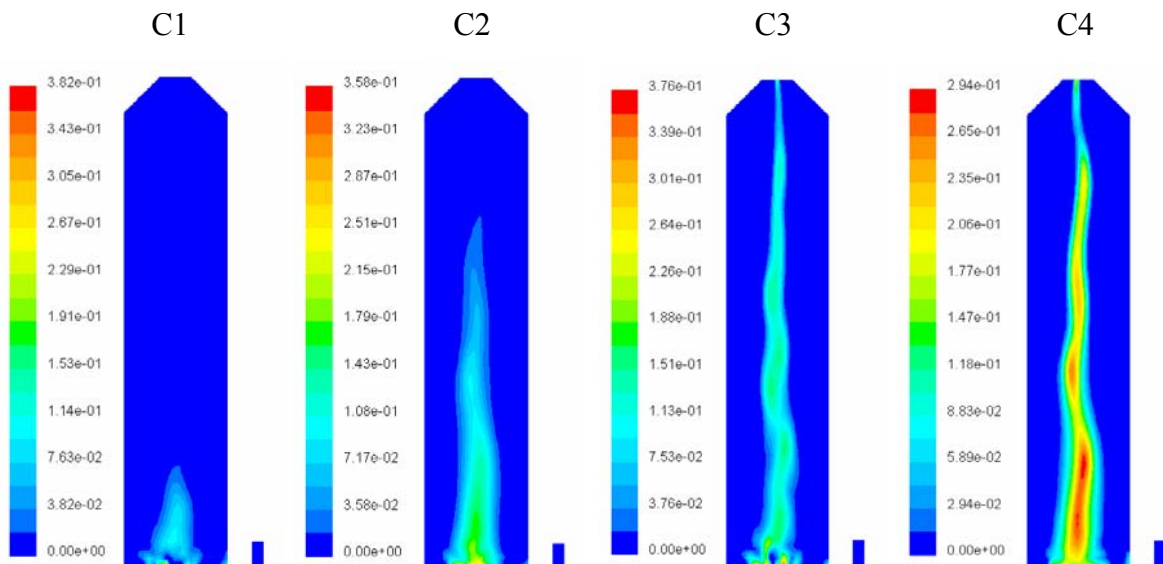


Figure 4. CO molar fraction distribution for C1, C2, C3 and C4 cases.

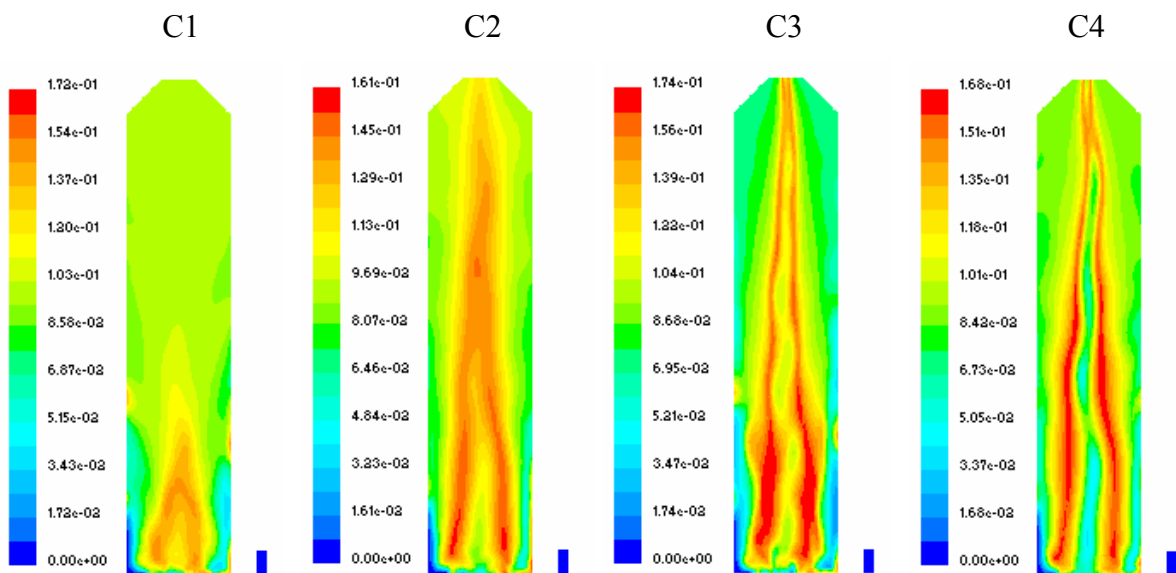


Figure 5. CO2 molar fraction distribution for C1, C2, C3 and C4 cases.

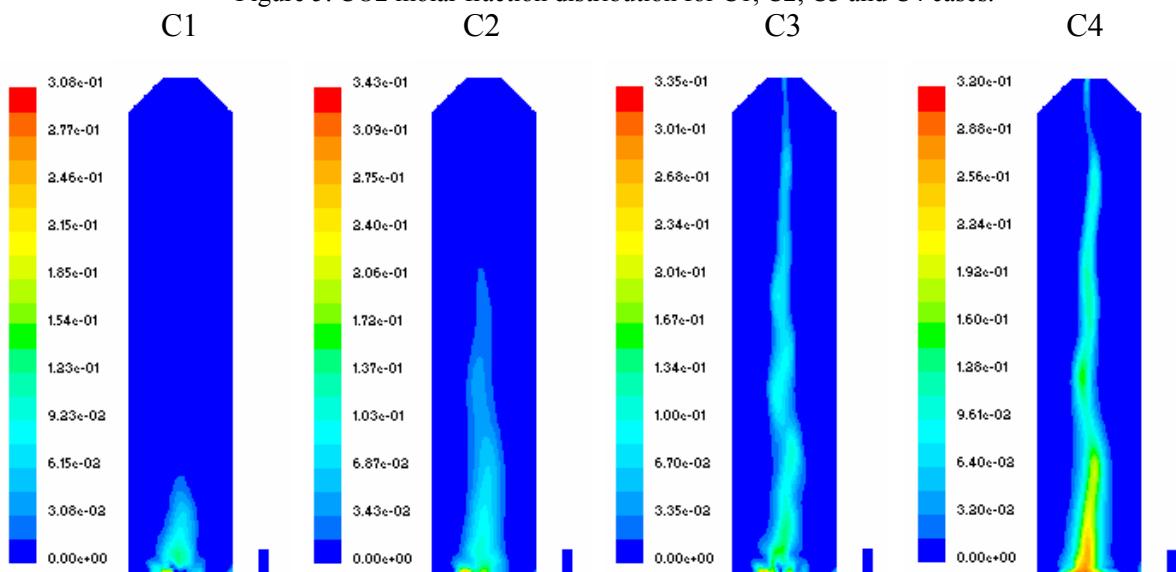


Figure 6. H2 molar fraction distribution for C1, C2, C3 and C4 cases.

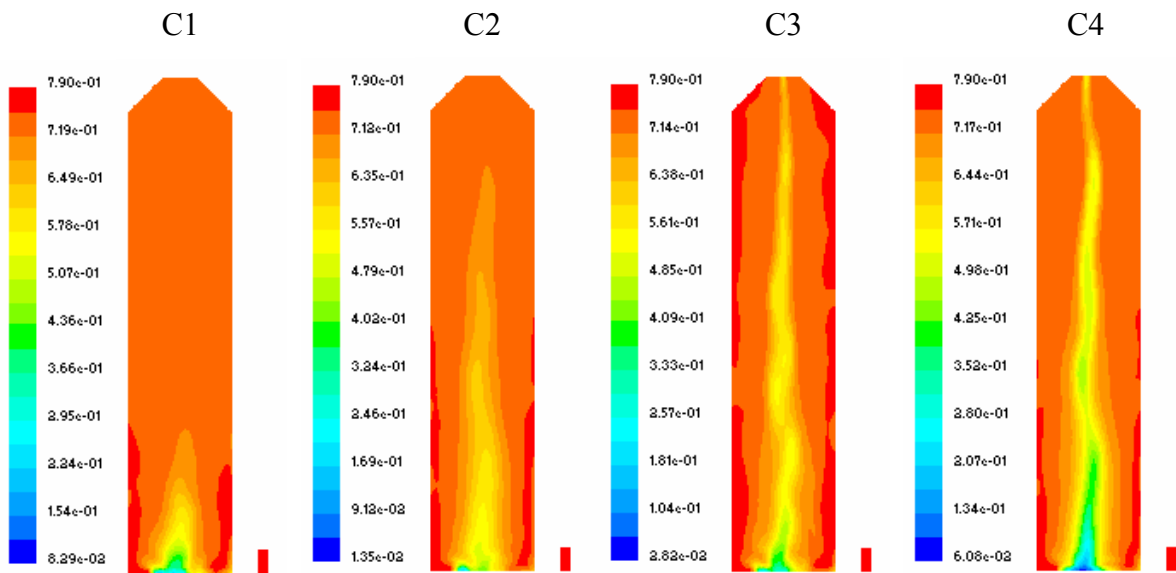


Figure 7. N2 molar fraction distribution for C1, C2, C3 and C4 cases.

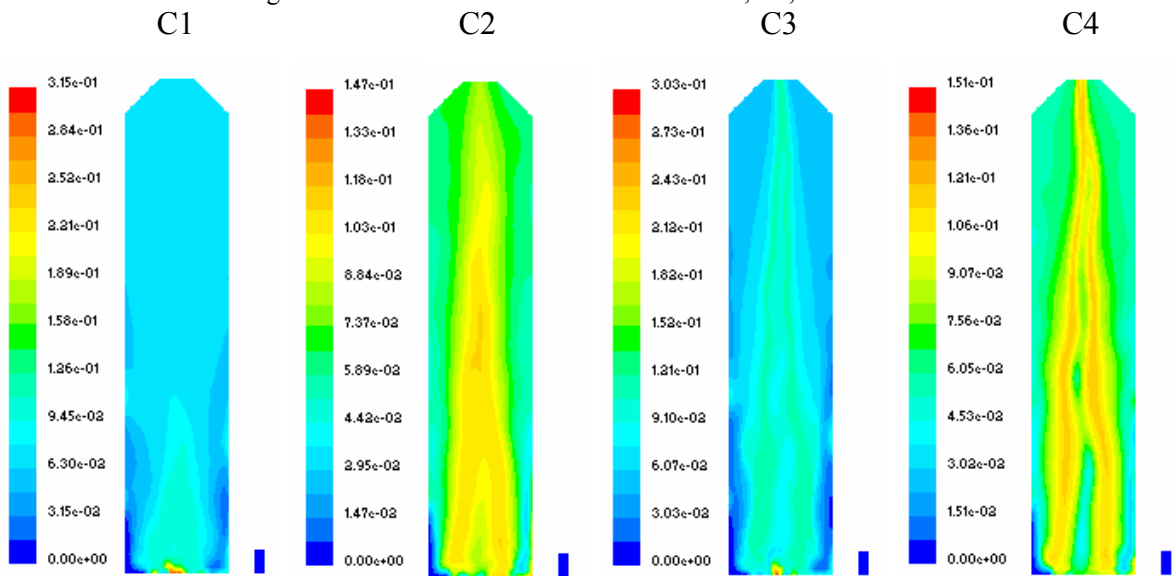


Figure 8. H2O molar fraction distribution for C1, C2, C3 and C4 cases.

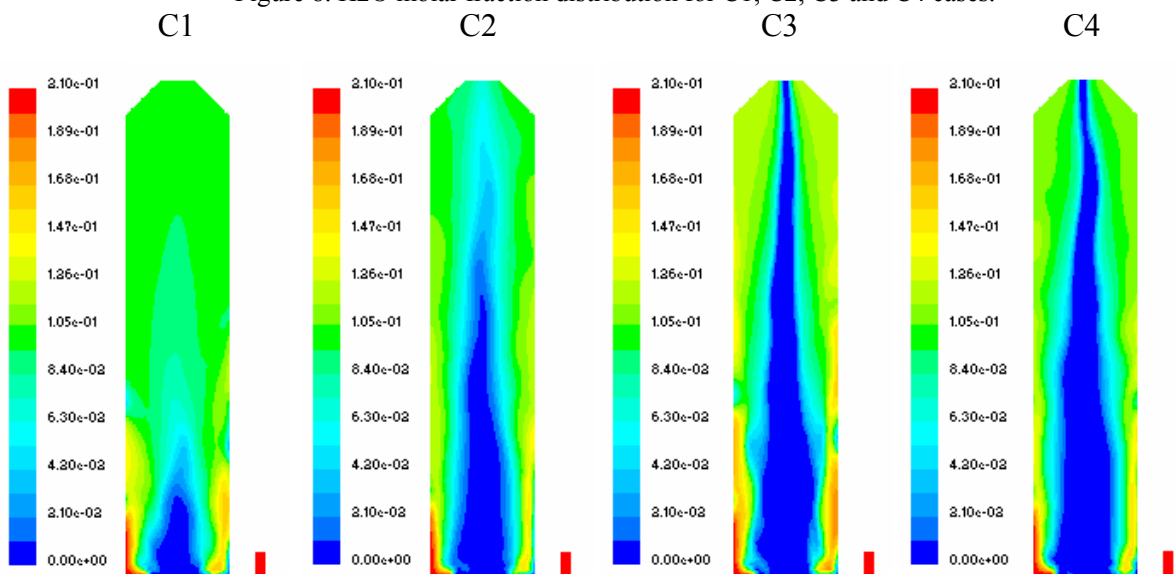


Figure 9. O2 molar fraction distribution for C1, C2, C3 and C4 cases.



The temperature fields are show in figure 10. For the C1 and C3 cases the maximum temperature limit was set at 1500K, this was done in order to allow the comparison of the temperatures by the color chard.

The maximum temperature recorded inside the furnace must be lower than the adiabatic flame temperature. The calculation of the flame temperature was performed using the prePDF and the obtained value was 2114K. The maximum calculated values of the temperature in the cases were the DO radiation model was used were 1990K and 1720K for the C2 and C4 case respectively. Those results are more precise than the results obtained with the P-1 radiation model. The P-1 model predicted some temperature peak higher than the adiabatic flame temperature (figure 10 and table 5), these results reveal some intrinsic inconsistency of the model. According to Sazhin et al (1995) the P-1 radiation model does not accurately predict the heat exchange process, in the presence of some concentrated heat sources. This deficiency can be the reason for the poor results obtained with the P-1 model. A second problem can be detected with the P-1 model, some predicted values of the temperature are lower than the values of the air temperature at the furnace entrance (see figure 10). Such behavior is not observed if the model DO is adopted. These results were only possible because a more tight angular  $N_\phi \times N_\theta$  mesh was used, than the standard values of 2x2. The adopted values were 6x6. The increase of  $N_\phi \times N_\theta$  nodes was jointed by a remarkable (7 times) increase in the computational time required for calculation, when compared with the standard pattern.

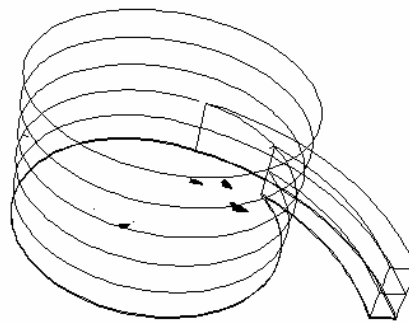


Figure 10: The black spots that appear near the entrance region, represents the places where temperatures above the adiabatic temperature were found for the C1 case.

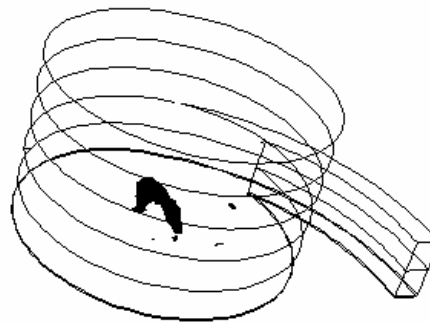


Figure 11. The black spots that appear near the entrance region, represents the places where temperatures above the adiabatic temperature were found for the C3 case.

Table 5. Significant temperatures found in the simulated cases.

Temperature	Case C1	Case C2	Case C3	Case C4
Maximum	2200K	1990K	2200K	1720K
Mean	1236K	1420K	1197K	1351K
Minimum	298K	308K	298K	308K

As can be seen in table 8 the C1 and C2 are the cases that show the higher mean temperatures. In the C1 case, as will be show in table 6, only 35% percent of the particles fixed carbon was released and as a result a smaller fuel quantity was used to increase the temperature of the furnace gases. The total release of the carbon that occurred in C2 case (table 9) is the reason for the higher mean temperature detected in this case, when compared with the other ones.

The permanence time, the volatile quantities and the fixed carbon liberated form the solid particles are show in table 6 .The solid phases calculation includes the particles tracking, volatilization and oxidation of the fixed carbon. Before comment the results, the term “particle destination” which appear in table 9 must be defined. In order to impose

a limit to the calculation of the path of a given particle a maximum length of 60m was imposed to the calculations. Depending on the particle trajectory it can go out of the furnace or stay inside of it after the 60m. The particles that reach the exit are called as “escape trough exit” the particles that stay in the furnace are referred as “incomplete”. In this case the trajectories and all the calculation based on it are terminated. Because of that, in some cases, it will be reported that the conversion of the fixed carbon was not complete. In table 6 the percentage of conversion is calculated as:

$$\%Conv = 100(\text{Initial quantity} - \text{final quantity}) / \text{Initial quantity} \quad (3)$$

For all the simulated cases, the escape trough exit particles liberates all it’s volatile substances and fixed carbon (%conv=100). For the incomplete trajectories particles it can be seen that only for the C2 and C4 cases (DO radiation model) the particles liberation of the fixed carbon was almost complete. For the C1 and C2 cases (P-1 radiation model), most of the fixed carbon was not liberated for the incomplete trajectories particles. If the maximum length adopted for the C1 and C2 cases was increased, maybe the particles fixed carbon would be totally released because that would have more time for them to perform some reactions, however that will dramatically increase the calculation time.

The mean time that the incomplete destination particle remain inside the furnace is larger if the Reynolds stress model is used (C1 and C2) when compared with the RNG κ-ε model (C3 and C4).

Table 6. Permanence time, volatile quantity, and fixed carbon of the solid particles.

	Particle destiny	Number of particles	Permanence time (s)				Volatile conversion (kg/s)			Fixed Carbon conversion (kg/s)		
			Mín	Máx	Mean	Standard Deviation	Initial quantity	Final quantity	%Conv	Initial quantity	Final quantity	%Conv
C1	Incomplete	24861	10,76	94,59	71,76	16,99	1,876E-03	0	100	2,621E-03	1,691E-03	35,49
	Escape trough exit	51939	1,439	56,63	7,989	5,937	2,900E-03	0	100	4,050E-03	0	100
	Particle destiny	Number of particles	Permanence time (s)				Volatile conversion (kg/s)			Fixed Carbon conversion (kg/s)		
C2	Incomplete	12642	10,24	53	25,74	4,665	8,316E-04	0	100	1,162E-03	0	100
	Escape trough exit	64158	1,683	42,43	8,923	5,522	3,944E-03	0	100	5,510E-03	0	100
	Particle destiny	Number of particles	Permanence time (s)				Volatile conversion (kg/s)			Fixed Carbon conversion (kg/s)		
C3	Incomplete	28382	9,23	87,67	49,62	20,29	2,193E-03	0	100	3,063E-03	1,487E-03	51,45
	Escape trough exit	48418	2,23	40,06	6,739	3,903	2,583E-03	0	100	3,609E-03	0	100
	Particle destiny	Number of particles	Permanence time (s)				Volatile conversion (kg/s)			Fixed Carbon conversion (kg/s)		
C4	Incomplete	28470	9,25	94,14	43,23	19,82	2,219E-03	0	100	3,099E-03	1,139E-05	99,63
	Escape trough exit	48330	1,921	58,44	6,82	4,733	2,557E-03	0	100	3,572E-03	0	100
	Particle destiny	Number of particles	Permanence time (s)				Volatile conversion (kg/s)			Fixed Carbon conversion (kg/s)		

The differences of the flow field are obtained after the analysis of the swirl intensity, S, calculated for the four cases. The swirl intensity obtained for all the cases simulated here are show in figure 12. The results obtained with the RNG κ-ε model (C3 and C4) furnishes higher values of S for all the flow region, when compared with the Reynolds stress model (C1 and C2). Thus, as happened for the isotherm case, with the Reynolds stress model, S goes down at the entrance and at the exit of the furnace. For the first part of the furnace the predictions of S are different for all the simulated cases. The predictions of S are almost the same from Z=1m for C1 and C2. For the C3 and C4 the predictions are closer from Z=3m. For the cases the uses the same radiation model the observed differences are obviously due to the differences model. The cases which the RNG κ-ε turbulence model is used are more susceptible to the change of the radiation model than the cases where the Reynolds stress model is adopted. In all the case the differences of the predictions are smaller at the furnace exit.

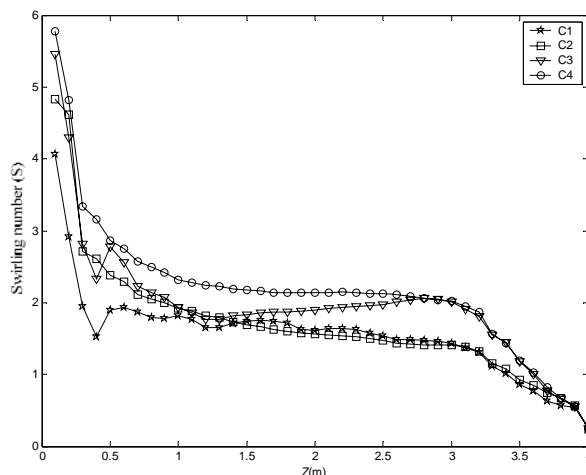


Figure 12. Swirl intensities for C1, C2, C3 and C4 cases.

After compare the performance of the models some conclusion can be obtained:

- 1) The temperature field obtained with the P-1 model is not realistic, since some calculated temperatures are higher than the flame temperature.
- 2) The differences of the results obtained with the radiation models are very high, almost 100%, because of that, the replacement of one model by the other must be done with care.
- 3) The differences of the predictions of the two turbulence modes were also very high. The molar fraction of CO and H<sub>2</sub> predicted in the cases where the RNG  $\kappa$ - $\epsilon$  model was used are much higher than the results obtained with the Reynolds Stress model.

Based on the above results it can be concluded that the combination of the P-1 and the RNG  $\kappa$ - $\epsilon$  models is not suitable for the calculation of the combustion.

## 8. References

- Berkstresser, B., Walz, A., Michael, V. and Timothy, G., 2000, .Combustion Improvements While Controlling Emissions., Proceedings of 2000 International Joint Power Generation Conference Miami Beach, Florida.
- Bockelie, M. J., Eddings, E. G., Adams, B. R., Valentine, J. R., Cremer, M. A., Smith, P. J., Davis, K. A. and Heap, M. P., 1998, .Computational Simulations of Industrial Furnaces. International Symposium on Computational Technologies For Fluid/Thermal/Chemical Systems with Industrial Applications., San Diego, California, USA.
- Eaton, A.M., Smoot, L.D., Hill, S.C. and Eatough, C.N., 1999. Components, formulations, solutions, evaluation, and application of comprehensive combustion models., Progress in Energy and Combustion Science., vol. 25, pp. 387-436.
- FLUENT Inc., 2003, .FLUENT 6.1, User's Guide Volume., vol. 1-4, Lebanon, USA.
- Fredriksson, Chistian, 1999, .Exploratory Experimental and Theoretical Studies of Cyclone Gasification of Wood Powder., Doctoral Thesis, Divison of Energy Engineering, Department of Mechanical Engineering, Lulea University of Technology.
- Ilbas, M. The Effect of Thermal Radiation and Radiation Models on Hydrogen-Hydrocarbon Combustion Modeling, International Journal of Hydrogen Energy, v. 30, p. 1113-1126, 2005.
- Jones, W. P. and Whitelaw, J. H., Calculation Methods for Reacting Turbulent Flows, A Review. Combust. Flame, v.48, p. 1-26, 1982.
- Kops, S. M. B. and Malter, P. C., 2004, .Simulation and Modeling of Wood Dust Combustion in Cyclone Burners., Final Technical Report Prepared for U. S. Department of Energy.
- MALISKA, C. R., Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional. 2 ed. Rio de Janeiro: LTC, 2004.
- Ragland, K. W., Aerts, D. J. and Baker, A. J., 1991, .Properties of Wood for Combustion Analysis., Bioresource Technology, vol. 37, pp. 161-168.
- Ragland, K. W., and Borman, G. L., 1998, .Combustion Engineering., McGraw-Hill, USA.
- Sazhin, S. S.; Sazhina, E. M.; Faltsi-Saravelou, O.; Wild, P. The P-1 Model for Thermal Radiation Transfer: Advantages and Limitations. Fuel, v. 75, p. 289-294, 1996.
- Sivathanu, Y. R.; Faeth, G. M.. Generalized State Relationships for Scalar Properties in Non-Premixed Hydrocarbon/Air Flames. Combust. Flame, v. 82, p. 211-230, 1990.
- Syred, N. And Beér, J. M., 1974, .Combustion in swirling flows: A review., Combustion and Flame, Vol. 23, pp. 143-201.
- Turns, S. R., 2004, .An Introduction to Combustion., McGraw-Hill, USA..

Ushima, A. H., 2000, .Curso de Combustão Industrial., Brasil.

Van Wylen, G. J. & Sonntag, R. E., 1976,.Fundamentos da Termodinâmica Clássica.; Edgard Blucher.

## DESEMPENHO E EMISSÕES NA EXAUSTÃO DE UM MOTOR OPERANDO COM BIODIESEL DE SOJA E NABO FORRAGEIRO

### Henrique Avelhaneda Geanezi

UFMG – Universidade Federal de Minas Gerais  
avelhaneda@yahoo.com.br

### Vander Ferreira Rodrigues

CETEC – Fundação Centro Tecnológico de Minas Gerais  
vander.rodrigues@cetec.br

### Inácio Loiola Pereira Campos

UFMG – Universidade Federal de Minas Gerais  
inaciolpcampos@terra.com.br

### André Luis Alves Diogo

UFMG – Universidade Federal de Minas Gerais  
andreufmg2000@yahoo.com.br

### Ramón Molina Valle

UFMG – Universidade Federal de Minas Gerais  
ramon@demec.ufmg.br

### José Ricardo Sodré

PUC-Minas – Pontifícia Universidade Católica de Minas Gerais  
ricardo@pucminas.br

**Resumo.** O desempenho e as emissões de poluentes de um motor operando com misturas de biodiesel provenientes de duas diferentes oleaginosas são comparados aos resultados obtidos da operação com óleo diesel metropolitano. Os testes foram realizados com o motor funcionando a plena carga e alimentado biodiesel de nabo forrageiro, biodiesel de soja e misturas de 50% de biodiesel destas fontes com 50% de diesel metropolitano. Os testes de desempenho e emissões foram realizados conforme a norma NBR ISO 1585 e o de opacidade conforme a norma NBR 13037. Os parâmetros de desempenho analisados foram potência, torque e consumo específico de combustível. As emissões de CO, HC, NO<sub>x</sub> e opacidade foram também analisadas na exaustão. Os resultados obtidos indicam a mistura de combustível mais adequada para o motor com relação ao desempenho e às emissões de poluentes. Em geral, pode-se dizer que houve uma pequena redução de desempenho com as misturas de biodiesel, comparado com o diesel metropolitano. Com relação às emissões de poluentes, os resultados mostram que houve uma redução significativa para a maior parte das misturas com biodiesel oriundo das duas fontes de oleaginosas testadas.

**Palavras-chave:** biodiesel, desempenho, emissões, motores de combustão interna.

### 1. Introdução

A busca de uma alternativa energética para os combustíveis fósseis tem sido motivo de grande discussão internacional devido ao horizonte das reservas de petróleo e à crescente preocupação ambiental. Em face da conjuntura econômica mundial, os atuais valores do barril de petróleo tornam os combustíveis alternativos competitivos. Nos últimos anos, o estudo de fontes alternativas aos derivados do petróleo tem sido incentivado por vários centros de pesquisa em nível mundial. Neste contexto, os óleos vegetais (biodiesel) aparecem como uma alternativa viável para substituição do óleo diesel, com redução dos níveis de emissão de poluentes gasosos e de material particulado. A principal característica do biodiesel é a significativa concentração em peso de oxigênio em sua composição, em torno de 11%. Por um lado, isto representa menor poder energético, mas, por outro lado, contribui para o aumento do número de cetanos e reduz as concentrações de gases poluentes (Muñoz, 2004).

O Brasil, por ser um grande produtor de oleaginosas, tem incentivado a produção e utilização de biodiesel, com vistas à redução do déficit energético e melhoria do IDH (Índice de Desenvolvimento Humano). Já a partir de 2008, por força de normas legais, o biodiesel será adicionado ao óleo diesel mineral na proporção de 2%. O CONAMA (Conselho Nacional do Meio Ambiente), através do Programa de Controle de Poluição do Ar (PROCONVE), estabeleceu níveis máximos de emissão de poluentes em etapas a serem alcançadas em janeiro de 2007 e em janeiro de 2009 que dificilmente serão possibilitadas com o uso do óleo diesel mineral e as tecnologias vigentes. Além disso, segundo dados do Ministério de Minas e Energia, foram consumidos em 1999 cerca de 37,5 bilhões de litros de óleo diesel, dos quais

5,3 bilhões de litros foram importados, com custo na ordem de U\$1,2 bilhão. Assim, novas opções de combustíveis concorrentes com o óleo diesel mineral devem ser aventadas. Do ponto de vista econômico, a viabilidade do biodiesel está relacionada à substituição das importações e às externalidades positivas associadas: redução com gastos em saúde, créditos de carbono etc.

Visando obter dados de viabilidade técnica do biodiesel, este trabalho descreve os resultados de testes de desempenho e emissões de poluentes de um motor de produção operando em plena carga. Biodiesel originado de dois diferentes tipos de oleaginosas foi testado: soja e nabo forrageiro. Os testes foram conduzidos em uma bancada dinamométrica utilizando como combustível o biodiesel de soja, biodiesel de nabo forrageiro e misturas em igual proporção de um destes com o óleo diesel mineral. O óleo diesel mineral foi utilizado como referência de comparação para estas misturas.

## 2. Revisão bibliográfica

Testes de longa duração realizados por Peterson (1999) mostraram que um motor alimentado com éster etílico de óleo de soja hydrogenada desenvolve menor potência que com as misturas de 25 ou 50% de biodiesel desta fonte em biodiesel em óleo diesel mineral. O consumo de combustível com biodiesel puro nem sempre foi maior do que o apresentado pelas misturas. Diversos trabalhos com biodiesel e suas misturas com óleo diesel em motores de ignição por compressão apontam para a redução das emissões de monóxido de carbono (CO), hidrocarbonetos (HC) e material particulado (Maziero, 2005).

No Brasil, análises de desempenho e de emissões de poluentes nos gases de exaustão estão sendo feitas por diversas instituições e empresas. Estudos conduzidos por Oliveira (2005) com biodiesel de óleo de soja apresentaram diminuição das emissões de CO em torno de 48%, óxido de enxofre (SO<sub>x</sub>) em 100% e material particulado em 47%.

Testes feitos por Muñoz (2004) utilizando metil éster produzido a partir de girassol em misturas com o óleo diesel nas proporções de 25, 50, 75 e 100% em um motor automotivo indicaram que as emissões de hidrocarbonetos com o uso de biodiesel, na maioria dos casos, foram superiores à do motor alimentado com o óleo diesel metropolitano. Apenas em algumas situações específicas esta tendência sofreu inversão, principalmente quando as cargas eram baixas. No caso do biodiesel puro (100%), a concentração de NO<sub>x</sub> foi sempre maior que quando operando com óleo diesel metropolitano. Já as emissões de monóxido de carbono foram sempre menores com o uso do biodiesel do que com o óleo diesel metropolitano, exceto para rotações e cargas elevadas.

Considerando-se as inúmeras opções de óleo vegetal em nível nacional para a produção de biodiesel, é de vital importância que sejam conhecidas suas características físico-químicas, seus efeitos nas emissões de gases, desempenho do motor e consumo específico (Maziero, 2005).

## 3. Metodologia

### 3.1 Aparato Experimental

Para a realização dos experimentos utilizou-se um motor diesel de produção com 4 cilindros, turbocooler e injeção mecânica de combustível. As demais especificações do motor são descritas na Tab. 1. Os experimentos foram realizados em um dinamômetro de bancada com capacidade de 210 kW. Para o estudo de emissões de gases foi utilizado um módulo analisador de gases CO, CO<sub>c</sub>, CO<sub>2</sub>, HC, O<sub>2</sub> e NO<sub>x</sub> que emprega a técnica de raios infravermelhos não dispersivos (NDIR), tendo o opacímetro como parte integrante desse módulo, com precisão de ± 2%.

Tabela 1 – Características do motor de produção.

PARÂMETRO	VALOR
Volume deslocado	2800 cm <sup>3</sup>
Potência máxima	90 kW (122 CV) a 3600 rev/min
Torque máximo	285 N.m (29,0 m.kgf) a 1800 rev/min
Diâmetro × curso do pistão	94,4 × 100 mm
Consumo específico em torque máximo	203 g/kWh (149 g/cvh)
Taxa de compressão	19,5:1

### 3.2 Procedimento Experimental

Os testes para a análise de desempenho foram realizados a plena carga, conforme a norma NBR ISO 1585 (ABNT, 1996), para a faixa de rotação de 1100 a 3600 rev/min, em intervalos 200 rev/min. Simultaneamente, o módulo analisador de gases registrava as concentrações das emissões de poluentes na exaustão do motor. O procedimento dos

testes para a quantificação da opacidade seguiu a norma NBR 13037 (ABNT, 2001). Os testes de opacidade foram realizados após término de todos os testes de desempenho e emissões de poluentes do motor.

Os combustíveis utilizados nesse trabalho são especificados na Tab. 2. O diesel metropolitano foi adquirido em um posto de abastecimento. O biodiesel é produzido na região sul do Estado de Minas Gerais a partir de óleos vegetais de nabo forrageiro e de soja. As misturas entre biodiesel e diesel metropolitano foram realizadas no laboratório de testes do motor. Para obter a homogeneização dos combustíveis realizou-se uma recirculação por bombeamento das misturas antes de cada teste.

Para garantir que um combustível não interferisse nos resultados dos testes com o combustível seguinte, realizou-se a drenagem de toda a linha de alimentação e operou-se o motor em um ciclo de rotação curto para que todo o combustível residual fosse queimado antes do início de cada ensaio. Os combustíveis foram testados na seguinte ordem: B0, B100NF, B50NF, B50SJ e B100SJ. Os resultados apresentados representam a média de três testes realizados para cada condição. O resultado obtido com o óleo diesel metropolitano foi utilizado como referência para comparação com as amostras de biodiesel.

Tabela 2 – Misturas de biodiesel utilizadas.

ESPECIFICAÇÃO	DESCRIÇÃO
B0	100% diesel metropolitano
B100NF	100% biodiesel proveniente de nabo forrageiro
B50NF	Mistura de 50% diesel metropolitano e 50% biodiesel proveniente de nabo forrageiro
B50SJ	Mistura de 50% diesel metropolitano e 50% biodiesel proveniente de soja
B100SJ	100% biodiesel proveniente de soja

#### 4. Resultados

A Fig. 1 mostra para todas as misturas os resultados obtidos para o torque em toda a faixa de rotação do motor. Verifica-se que o motor apresentou o maior torque com 100% de óleo diesel e os menores valores foram obtidos para a mistura com 50% de nabo forrageiro em toda a faixa de rotação. Em média, o torque obtido para a amostra de 50% nabo forrageiro com óleo diesel apresentou valores 16,8% menores que os valores obtidos com óleo diesel puro. Os demais combustíveis forneceram valores intermediários e próximos entre si. Com 100% de biodiesel de nabo forrageiro os valores foram 8,9% menores que os obtidos com o combustível convencional. Quando utilizado 50% de biodiesel soja em óleo diesel os valores obtidos foram 6,2% menores que com o óleo diesel metropolitano. Já com 100% de biodiesel de soja os valores encontrados ficaram em média 10,1% menores que o torque obtido com o óleo diesel. Em termos gerais pode-se dizer que a mistura de 50% de biodiesel de soja e óleo diesel apresentou a menor redução de torque em relação ao combustível convencional.

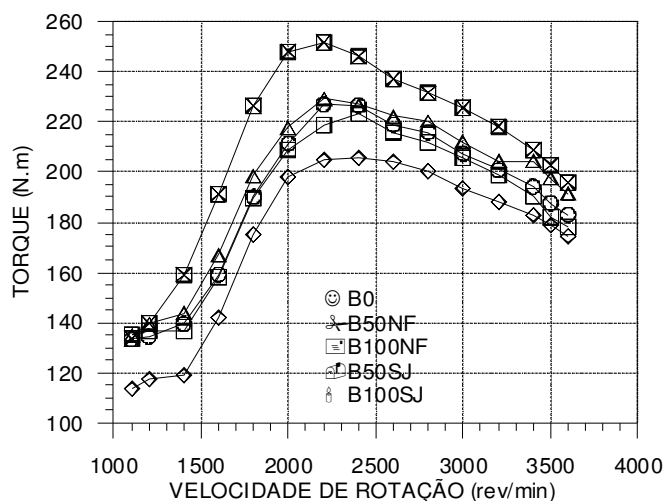


Figura 1 – Variação do torque com a rotação do motor para os combustíveis testados.

Os valores de torque máximo atingidos pelo motor e a rotação que ocorrem para cada combustível são mostrados na Tab. 1. O torque máximo é de 251,8 N.m para o motor operando com B0 a 2200 rev/min. O torque máximo para o motor operando com B100NF e com B50SJ também ocorreram a 2200 rev/min, 9,85% e 8,89 % menores, respectivamente, que o valor obtido com o óleo diesel mineral. Com B50NF e com B100SJ os torques máximos se deram a 2400 rev/min, 18,43% e 11,44% menores, respectivamente, com relação ao obtido com o óleo diesel puro.

Tabela 1 - Torque máximo obtido para os combustíveis testados.

COMBUSTÍVEL	TORQUE MÁXIMO (N.m)	ROTAÇÃO (rev/min)
B0	251,8	2200
B50NF	205,4	2400
B100NF	227,0	2200
B50SJ	229,4	2200
B100SJ	223,0	2400

A Fig. 2 mostra os resultados obtidos para a potência. Nota-se que o comportamento de todas as curvas manteve o mesmo formato para toda a faixa de rotação do motor testada. Da mesma forma que no torque, a maior potência ocorre com o óleo diesel metropolitano e a menor com a mistura de 50% de biodiesel de nabo forrageiro no óleo diesel, com a mistura de 50% de óleo de soja em óleo diesel apresentando os valores mais próximos aos obtidos com o combustível convencional. Os valores de potência máxima atingidos pelo motor e a rotação em que ocorrem são mostrados na Tabela 2. Verifica-se que a potência máxima de 74,40 kW é obtida com óleo diesel metropolitano a 3500 rev/min. A potência máxima para o motor operando com a mistura de 50% de nabo forrageiro no óleo diesel mineral é menor 11,64% em relação àquela obtida com o óleo diesel mineral. Para os demais combustíveis testados, a potência máxima do motor foi menor com a referência à obtida com o óleo diesel em 7,08% para 100% de biodiesel de nabo forrageiro, 2,12% para a mistura de 50% de biodiesel de soja em óleo diesel mineral e 8,86% para 100% de biodiesel de soja.

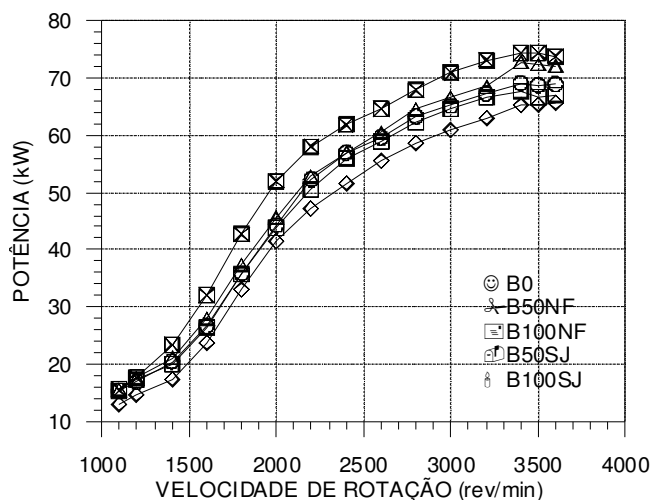


Figura 2 – Variação da potência com a rotação do motor para os combustíveis testados.

Tabela 2 – Potência máxima obtida para os combustíveis testados.

COMBUSTÍVEL	POTÊNCIA (kW)	ROTAÇÃO (rev/min)
B0	74,40	3500
B50NF	65,74	3600
B100NF	69,13	3400
B50SJ	72,82	3400
B100SJ	67,81	3400

A Fig. 3 mostra que o comportamento do consumo específico de combustível foi praticamente idêntico para todos os combustíveis testados. O menor consumo foi obtido para a mistura com 50% de biodiesel de soja em óleo diesel para quase toda a faixa de rotação, em média 0,2% menor que o consumo específico de combustível apresentado pelo óleo diesel metropolitano. O maior consumo específico de combustível aconteceu para a mistura de 50% de biodiesel de nabo forrageiro em óleo diesel, mantendo-se em torno de 12,1% maior que a obtida com o óleo diesel. Já com 100% de nabo forrageiro os valores de consumo específico de combustível foram 2,9% maiores que os obtidos com o óleo diesel mineral. Com 100% de biodiesel de soja os valores encontrados ficaram em média 7,3% maiores que o consumo específico apresentado pelo combustível convencional. Os valores mínimos de consumo específico de combustível atingidos pelo motor e a rotação em que ocorreram são apresentados na Tab. 3.



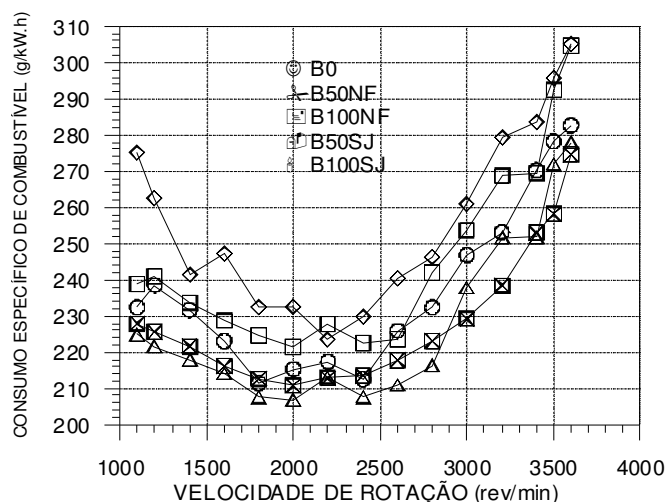


Figura 3 – Variação do consumo específico de combustível com a rotação do motor para os combustíveis testados.

Tabela 3 - Consumo específico de combustível mínimo obtido para os combustíveis testados.

COMBUSTÍVEL	CONSUMO MÍNIMO (g/kW.h)	ROTAÇÃO (rev/min)
B0	210,7	2000
B50NF	223,4	2200
B100NF	211,4	1800
B50SJ	206,7	2000
B100SJ	221,4	2000

Pela Fig. 4 pode-se verificar que o óleo diesel metropolitano apresenta a maior razão de equivalência da mistura combustível/ar, ou seja, operou com a mistura mais rica. Em média, os valores da razão de equivalência da mistura combustível/ar da amostra de 50% de biodiesel de nabo forrageiro são 5,4% menores que os valores obtidos com óleo diesel metropolitano. Já com 100% de biodiesel de nabo forrageiro, os valores da razão de equivalência da mistura combustível/ar foram de 5,5% menores que aqueles do óleo diesel metropolitano. Quando utilizado 50% de biodiesel de soja no óleo diesel os valores obtidos foram 6,4% menores que os do óleo diesel. Com 100% de biodiesel de soja os valores encontrados ficaram, em uma média, 6,3% menores que os do combustível de referência. Estes resultados mostram que as misturas com biodiesel apresentam valores de razão de equivalência da mistura combustível/ar próximos, correspondentes a misturas mais pobres que a do óleo diesel. Os combustíveis que operam com a mistura mais pobre são os que apresentam os menores torque e potência e os maiores consumos específicos de combustível (ver Figs. 1 a 3).

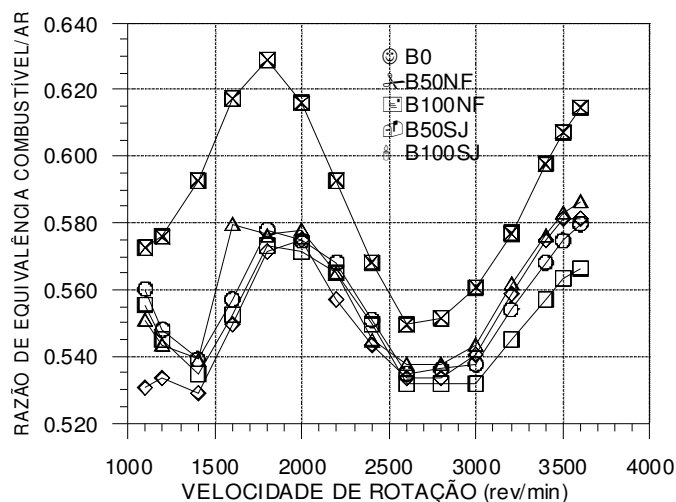


Figura 4 – Variação da razão de equivalência da mistura combustível/ar com a rotação para os combustíveis testados.

A Fig. 5 mostra a concentração de CO na exaustão obtida para cada combustível testado. Observa-se que o motor operando com 100% de biodiesel de nabo forrageiro apresentam valores duas vezes maiores que os obtidos com o óleo diesel metropolitano. Para as demais misturas com biodiesel nota-se menores índices de emissão de CO em relação ao óleo diesel mineral. Em média, as concentrações de CO na exaustão para operação do motor com 50% de biodiesel de nabo forrageiro em óleo diesel são 77,4% menores que os valores obtidos com o óleo diesel metropolitano. Quando utilizado 50% de biodiesel de soja em óleo diesel os níveis de emissões de CO obtidos foram 58,2% menores que os do óleo diesel metropolitano. Já com 100% de biodiesel de soja os valores de emissões de CO encontrados ficaram, em média, 70,0% menores que com o uso do combustível de referência. As emissões de CO máximas apresentadas pelo motor e a faixa de rotação que ocorrem para cada combustível são apresentadas na Tab. 4. Observa-se que, para todos os combustíveis, a emissão de CO é máxima sob baixa rotação. Além disso, os níveis de emissões de CO são baixos, registrando a concentração máxima de 0,155% para a amostra de 100% de biodiesel de nabo forrageiro.

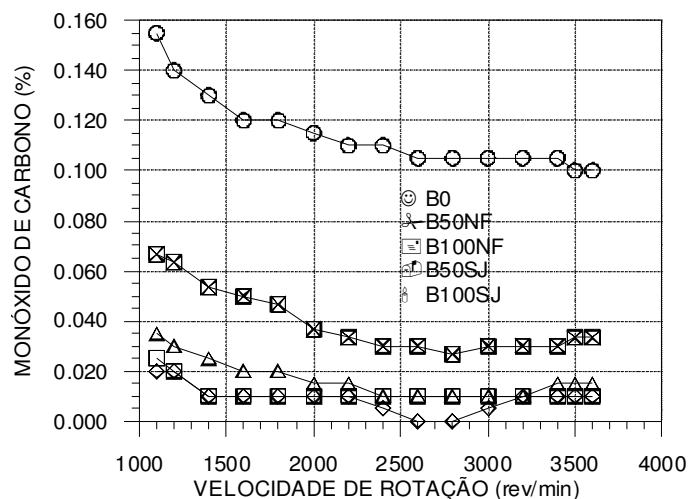


Figura 5 – Variação das emissões de CO com a rotação do motor para os combustíveis testados.

Tabela 4 - Máximas emissões de CO obtidas para os combustíveis testados.

COMBUSTÍVEL	CO MÁXIMO (%)	ROTAÇÃO (rev/min)
B0	0,067	1100
B50NF	0,020	1100-1200
B100NF	0,155	1100
B50SJ	0,035	1100
B100SJ	0,025	1100

A Fig. 6 mostra que os maiores níveis de emissões de HC ocorrem com a amostra de 50% de biodiesel de nabo forrageiro em óleo diesel, que apresentou também o pior desempenho (ver Figs. 1 a 3). Em média, as emissões de HC para este combustível foram 5 vezes maiores que os valores obtidos com óleo diesel metropolitano. Por outro lado, para a amostra com 100% de biodiesel de nabo forrageiro os testes apresentaram valores muito baixos. Para os demais combustíveis (B50SJ e B100SJ), os níveis de emissões de HC ficaram próximos dos valores obtidos para o óleo diesel metropolitano. Quando utilizado 50% de biodiesel de soja em óleo diesel os níveis de emissões obtidos foram 7,7% menores que os do óleo diesel metropolitano. Com 100% soja os valores encontrados para as emissões de HC ficaram, em média, 13,6% maiores que os registrados para o combustível de referência. Os valores máximos HC na exaustão do motor e a rotação em que ocorrem para cada combustível são apresentados na Tab. 5.

A Fig. 7 mostra a variação das emissões de NO<sub>x</sub> com a velocidade de rotação do motor para os combustíveis testados. Verifica-se que óleo diesel metropolitano apresenta índices de emissões de NO<sub>x</sub> muito maiores que as amostras de biodiesel. As emissões de NO<sub>x</sub> da amostra de 50% de nabo forrageiro em óleo diesel apresentaram os menores valores em toda a faixa de rotação do motor, em média 36,1% menores que os valores obtidos com o óleo diesel. Para 100% de biodiesel de nabo forrageiro as emissões de NO<sub>x</sub> foram 30,1% menores que as do combustível de referência. Quando utilizado 50% de biodiesel de soja em óleo diesel os valores obtidos para NO<sub>x</sub> foram 34,1% menores que os valores encontrados para o óleo diesel metropolitano. Com 100% de biodiesel de soja os valores encontrados para as emissões de NO<sub>x</sub> ficaram, em média, 31,6% menores que aqueles para o óleo diesel mineral. Estes resultados indicam que é possível reduzir substancialmente as emissões de NO<sub>x</sub> com o uso do biodiesel. Os valores máximos das emissões de NO<sub>x</sub> atingidos pelo motor e a rotação em que ocorrem para os combustíveis testados são apresentados na Tab. 6.

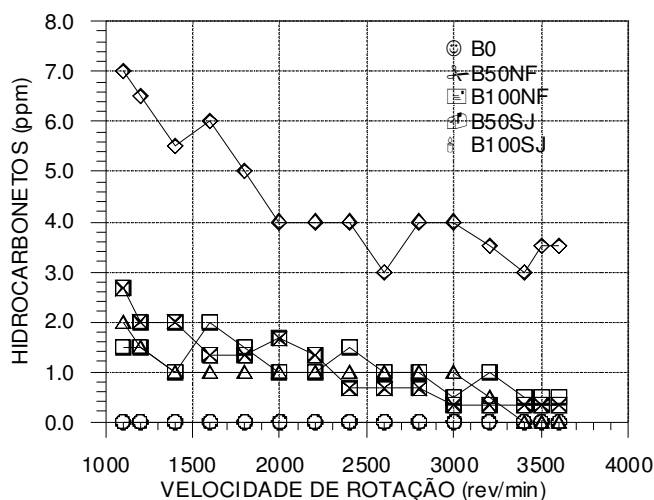


Figura 6 - Variação das emissões de HC com a rotação do motor para os combustíveis testados.

Tabela 5 - Máximas emissões de HC obtidas para os combustíveis testados.

COMBUSTÍVEL	HC MÁXIMO (ppm)	ROTAÇÃO (rev/min)
B0	3	1100
B50NF	7	1100
B100NF	-	-
B50SJ	2	1100
B100SJ	2	1600

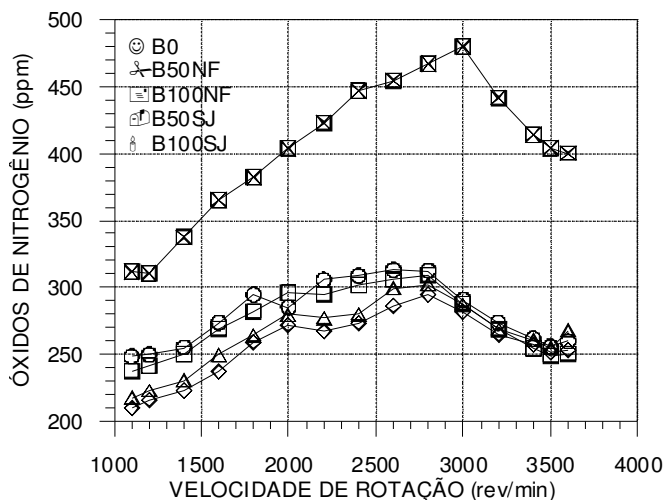


Figura 7 – Variação das emissões de NO<sub>x</sub> com a rotação do motor para os combustíveis testados.

Tabela 6 – Máximas emissões de NO<sub>x</sub> obtidas para os combustíveis testados.

COMBUSTÍVEL	NO <sub>x</sub> MÁXIMO (ppm)	ROTAÇÃO (rev/min)
B0	480	3000
B50NF	295	2800
B100NF	313	2800 / 2600
B50SJ	302	2800
B100SJ	310	2800

A Fig. 8 indica uma tendência de redução da opacidade com aumento da concentração de biodiesel no combustível convencional. O óleo diesel metropolitano apresenta o maior valor de opacidade ( $0,44 \text{ m}^{-1}$ ) e o combustível com 100% de biodiesel de nabo forrageiro apresenta o menor índice de opacidade, chegando a apenas  $0,11 \text{ m}^{-1}$ .

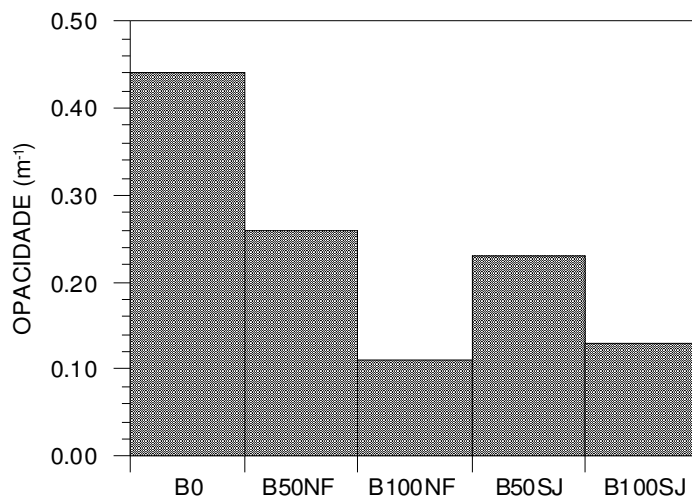


Figura 8 – Opacidade dos gases de exaustão para os combustíveis testados.

## 5. CONCLUSÕES

- A utilização de biodiesel de nabo forrageiro, biodiesel de soja e misturas de 50% destes combustíveis em óleo diesel apresentaram reduções de torque e potência em relação à operação do motor com óleo diesel metropolitano em toda a faixa de rotação testada, de 1100 a 3600 rev/min.
- Dentre as amostras de biodiesel testadas, a mistura de 50% de biodiesel de óleo de soja em óleo diesel foi a que proporcionou ao motor valores de torque e potência mais próximos dos desenvolvidos quando foi utilizado óleo diesel metropolitano como combustível.
- A mistura de 50% de biodiesel de nabo forrageiro em óleo diesel foi a que apresentou o mais baixo desempenho em comparação com a operação do motor com óleo diesel metropolitano.
- Dentre todos os combustíveis testados, a mistura de 50% de biodiesel de soja em óleo diesel apresentou o menor consumo específico de combustível na faixa de rotação de 1100 a 2900 rev/min. Na faixa de rotação de 2900 a 3600 rev/min o óleo diesel metropolitano proporcionou ao motor o menor consumo específico de combustível.
- A amostra de 50% de biodiesel de nabo forrageiro em óleo diesel apresentou o consumo específico de combustível mais elevado em toda a faixa de rotação investigada, exceto a 2200 rev/min, para a qual o consumo específico de combustível para a operação do motor com 100% biodiesel de soja foi mais elevado.
- A mistura ar/combustível para o óleo diesel metropolitano foi mais rica que quando as amostras contendo biodiesel foram testadas.
- As emissões de CO apresentaram níveis baixos para as amostras contendo biodiesel em relação à operação do motor com óleo diesel metropolitano, exceto para a amostra com 100% de biodiesel de nabo forrageiro, para a qual as concentrações de CO registradas foram superiores às do óleo diesel.
- Os maiores níveis de emissões de hidrocarbonetos ocorreram para a amostra de 50% de biodiesel de nabo forrageiro em óleo diesel em toda a faixa de rotação investigada. Com 100% de biodiesel de nabo forrageiro em óleo diesel os níveis de hidrocarbonetos foram os mais baixos. As demais misturas de biodiesel apresentaram resultados de emissões de HC similares aos níveis encontrados para o motor operando com óleo diesel.
- Os níveis de emissões de NO<sub>x</sub> apresentaram reduções em torno de 70% em relação ao óleo diesel metropolitano para operação do motor com todas as amostras de biodiesel testadas. A mistura de 50% de biodiesel de nabo forrageiro em óleo diesel apresentou os níveis mais baixos para toda a faixa de rotação investigada.
- O aumento da concentração de biodiesel na mistura com o óleo diesel metropolitano reduziu substancialmente os níveis de opacidade dos gases de exaustão.
- Num contexto geral, os resultados obtidos com o biodiesel de soja foram mais satisfatórios que os obtidos com o biodiesel de nabo forrageiro, apresentando desempenho mais aproximado do óleo diesel metropolitano e os níveis de emissão de poluentes mais baixos, exceção feita à emissão de HC.

## 6. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- ABNT, 1996, “Veículos rodoviários – Código de ensaio de motores – Potência líquida efetiva”, NBR ISO 1585, Associação Brasileira de Normas Técnicas, Rio de Janeiro, Brasil.
- ABNT, 2001, “Veículos rodoviários automotores – Gás de escapamento emitido por motor diesel em aceleração livre – Determinação da opacidade”, NBR 13037, Associação Brasileira de Normas Técnicas, Rio de Janeiro, Brasil.
- Maziero, J. V. G.; Corrêa, I. M.; Trielli, M. A.; Bernardi, J. A.; D’ Agostini, M; 2005; “Avaliação do Desempenho de um Motor de Ignição Por Compressão Utilizando Óleo Diesel e Éster Etfílico de Óleo de Girassol Como Combustível”; Congresso Brasileiro de Plantas Oleaginosas, Óleos, Gorduras e Biodiesel; p. 729 –733; Varginha, MG, UFLA; 2.
- Muñoz, M. Moreno, F. & Morea, J.; 2004; “Emissions Of An Automobile Diesel Engine, Fueled With Sunflower Methyl Ester”; Transaction of the ASAE, p.5-11.
- Oliveira, E. de; Silva, F. M. da; Barbosa, R., L.; Conde, A. P.; De Souza, R.G.; Lima, P. H. G. de; 2005; “Desempenho Comparativo do Motor de Combustão Alimentado Com Diesel, B2, B5, B20 E B100”; Congresso Brasileiro de Plantas Oleaginosas, Óleos, Gorduras e Biodiesel; p. 761-768; Varginha, MG, UFLA; 2.
- Peterson, C. & Reece, D.; 1996; “Emissions Characteristics Of Ethyl And Methyl Ester Of Rapeseed, Oil Compared With Low Sulfur Diesel Control Fuel in a Chassis Dynamometer Test Of a Pickup Truck”; Transaction of the ASAE, p. 805-816.

## PERFORMANCE AND EXHAUST EMISSIONS FROM AN ENGINE OPERATING WITH SOYBEAN AND WILD RADISH BIODIESEL

### Henrique Avelhaneda Geanezi

UFMG – Universidade Federal de Minas Gerais  
avelhaneda@yahoo.com.br

### Vander Ferreira Rodrigues

CETEC – Fundação Centro Tecnológico de Minas Gerais  
vander.rodrigues@cetec.br

### Inácio Loiola Pereira Campos

UFMG – Universidade Federal de Minas Gerais  
inaciolpcampos@terra.com.br

### André Luis Alves Diogo

UFMG – Universidade Federal de Minas Gerais  
andreufmg2000@yahoo.com.br

### Ramón Molina Valle

UFMG – Universidade Federal de Minas Gerais  
ramon@demec.ufmg.br

### José Ricardo Sodré

PUC-Minas – Pontifícia Universidade Católica de Minas Gerais  
ricardo@pucminas.br

**Resumo.** Performance and pollutant emissions from an engine operating on biodiesel blends from two different oleaginous plants are compared to results from operation on diesel oil. Full load tests were performed in an engine fuelled by biodiesel from wild radish, soybean and blends of 50% biodiesel from these origins with 50% metropolitan diesel oil. Performance and emissions tests were carried out according to NBR ISO 1585 standard and smoke was measured according to NBR 13037 standard. The performance parameters analyzed were torque, power, and specific fuel consumption. Exhaust CO, HC, NO<sub>x</sub>, and smoke emissions were also analyzed. The results indicate the most adequate fuel mixture for emissions improvement without penalizing engine performance. Generally, there was a small performance reduction for the biodiesel blends, in comparison to metropolitan diesel oil. With respect to pollutant emissions, the results showed a significant reduction for most of the biodiesel mixtures from the two tested sources.

**Keywords:** biodiesel, performance, emissions, internal combustion engines.

## ASYMPTOTIC PREMIXED-FLAME STRUCTURE IN A POROUS MEDIUM

Fernando Marcelo Pereira  
Universidade Federal de Santa Catarina  
fernando@labcet.ufsc.br

Amir A. M. Oliveira  
Universidade Federal de Santa Catarina  
amirol@emc.ufsc.br

Fernando Fachini Filho  
Instituto de Pesquisas Espaciais  
ffachini@lcp.inpe.br

**Abstract.** *The structure of premixed flames within porous media is investigated by using the asymptotic expansion method. The flame is divided in three distinct regions. Two of them, the gas conduction region (also known as preheating region) and the reaction region, are the same two regions present in the classical premixed flame structure. The third region is related to the heat conduction in the solid matrix. Since the chemical reaction is very sensitive to temperature, the reaction occurs in a very thin zone inside the gas conduction region, where the highest gas phase temperature is found. Also, since the solid heat conduction is higher than the gas heat conduction, the solid phase heat conduction region is much thicker than the gas phase heat conduction region. Discrepancies in the characteristic lengths among the three regions justify the application of asymptotic expansions to determine an approximated (analytical) solution. The description of the reaction region is obtained using the large activation energy asymptotic expansion and the description of the preheating region is obtained using the boundary layer expansion. The influence of the ratio of the solid- and the gas-phasic effective conductivities, intraphasic heat transfer coefficient and the porosity of the medium are evaluated, revealing the effects of the inner flame structure on the flame stabilization within porous media.*

**keywords:** *combustion in porous media, asymptotic solution, superadiabatic temperature*

### 1. Introduction

The combustion in porous media is characterized by high temperatures in the reaction region as a result of the heat recirculation induced by the solid matrix (Howell et al., 1996). This technology has received much attention in the last decades as a way of extending flame stability, burning fuel lean mixtures and providing radiant heating. The heat recirculation induced by the porous media adds to the heat released by combustion resulting in local temperatures in excess of the adiabatic flame temperature. This has been called superadiabatic combustion (Echigo et al., 1991).

A few works have attempted to develop analytical models for the combustion in porous media. McIntosh and Prothero (1991) proposed a model for the surface combustion with radiant heat loss, i.e., for a porous burner in which the flame is stabilized on the porous medium surface or just above it. In these burners the flame is cooled by the radiant heat loss, which implies in low NO<sub>x</sub> emissions. Their work relied on the large-activation-energy asymptotic method to derive an analytical solution for the gas and solid temperatures. The solutions depend on a convective heat transfer parameter, on a radiant coefficient and on the conductivities ratio. Their results showed the effect of the parameters on the flame location and allowed for the prediction of the blow-off and flash-back conditions.

The amount of excess temperature within the porous medium depends on the thermal properties of the gas and solid phases and has been studied theoretically and numerically by Pereira and Oliveira (2005). Their analysis is based on the excess enthalpy function previously defined in the literature (Wichman and Vance, 1997) applied to the one-dimensional volume-averaged equations for the combustion within an inert porous medium. Approximations for the solid-phase temperature and fuel consumption distributions are assumed and the dependence of the excess enthalpy function on the problem parameters is analyzed. The results obtained

are in good qualitative agreement with the numerical results but the model was not able to predict flame speeds. The excess enthalpy was shown to be a function of the gas Lewis number, the interphasic heat transfer coefficient, the ratio of the solid- and the gas-phasic effective thermal conductivities and the porosity of the medium.

Here, an asymptotic solution for an infinite, adiabatic porous burner is proposed. In contrast to McIntosh and Prothero’s solution, this work focuses on adiabatic flames where superadiabatic temperatures are expected to arise. This condition is similar to that of a long, insulated burner in which the flame stabilizes deeply within the porous medium. The problem is divided in three part. The first corresponds to the problem in the solid-phase characteristic length scale. The second corresponds to the problem in the gas-phase characteristic length scale, which is about 1/40 of the solid scale. Finally, the third corresponds to the problem on the reaction region scale, which is imposed to be much thinner than the gas scale. Also, in contrast to McIntosh and Prothero’s solution, the heat diffusion in the gas-phase is confined to a small part around the flame. Explicit solutions for the gas and solid temperatures and for the flame velocity are found as functions of the problem parameters. The effects of the thermal conductivities ratio, volumetric porosity and equivalence ratio on the temperature profiles and flame velocity are analyzed..

## 2. Length Scales

The main difference of flames within porous media when compared to freely propagating flames is the presence of the solid-phase thermally connecting the two sides of the flame. The properties of the gas and solid phases are very dissimilar; the solid-phase thermal conductivity can be several orders of magnitude larger than the gas-phase thermal conductivity, thus, the thermal diffusion is enhanced when the reaction takes place within a solid matrix. The intraphasic radiant heat transfer among solid particles plays an important role in the heat transfer from the hot to the cold regions of the flame, specially for structures with small optical thickness (Barra and Ellzey, 2004). As a consequence of these dissimilar properties and noting that the exothermic reaction occurs only in the gas-phase, the combustion in porous media is characterized by local thermal non-equilibrium between the solid and the gas phases, resulting in local interphasic heat transfer (Oliveira and Kaviany, 2001). As a consequence, the heat transport by conduction and radiation through the solid matrix preheats the incoming gas as a result of the interphasic heat transfer, in a heat recirculation process. The large interfacial surface area between the phases allows for large rates of interphasic heat transfer, which in turn results in large heat recirculation. The heat recirculated adds to the energy released by combustion resulting in temperatures above that of the adiabatic free-flame.

Consider the propagation of an adiabatic plane flame within an infinite inert porous medium as represented in Fig(1). Figure (1A) shows a rendering of the temperatures and fuel mass fraction distributions for the different characteristic length scales of the problem. The figure shows that the flame structure can be described in four levels of detail. The first level (Fig.1B) is a flame front travelling with velocity  $s_f$  against the unburnt gas. The velocity of the front in relation to a fixed reference frame is  $w = u_n - s_f$ , where  $u_n$  is the incoming gas velocity (for stationary flames  $u_n = s_f$ ). Note that the Darcean flame speed,  $s_D$ , or filtration velocity, is smaller than the velocity of the fluid-phase inside the matrix ( $s_D = \varepsilon s_f$ , where  $\varepsilon$  is the volumetric porosity of the matrix). The flame front separates two regions of thermodynamic equilibrium related through mass and energy conservation. Upstream from the front, the temperatures of both phases and the fuel mass fraction are equal to their initial values,  $T_n$  and  $Y_{F_n}$  respectively. Downstream from the front, the temperatures of both phases reach the adiabatic flame temperature  $T_r$ , according to the thermodynamic requirement, and the mass fuel fraction decreases to its final value,  $Y_{F_r}$ , which is zero for understoichiometric mixtures. The thickness of the flame front is represented by  $l_{D_s}$  and can be several centimeters long (Pereira e Oliveira, 2002).

In the second level of detail (Fig.1C), the heat conduction through the solid-phase, the interphasic heat transfer and gas convection control the problem. The transport of mass and heat by diffusion in the gas-phase are collapsed in a thin region (a flame sheet). The gas-phase temperature and the fuel mass fraction are discontinuous at this interface and thermal nonequilibrium between the phases occur upstream and downstream from the flame. Upstream from the flame the unburnt gas is heated up by the solid-phase, at the flame the gas temperature reaches the superadiabatic peak,  $T_{sup}$ , and downstream from the flame, the burnt gases loses heat to the solid-phase decreasing its temperature from the maximum value to the adiabatic flame temperature. The fuel mass fraction is constant and equal to its initial value upstream from the flame and is completely consumed at the flame sheet for lean mixtures. The temperature of the solid-phase varies smoothly from  $T_n$  to  $T_r$  as a result of the thermal diffusion. The flame sheet (Fig.1C) moves against the unburnt mixture with a velocity higher than the flame velocity  $s_f$  (Fig.1B) since the gas at the flame has been preheated by the solid matrix. The thermal affected region is wider than that of a free flame as a result of the high solid thermal conductivity. This can be expressed by a modified Lewis number,  $Le_s$ , defined as  $Le_s = \Gamma Le$ , where  $\Gamma$  is the ratio of the solid and gas thermal conductivities ( $\Gamma = \lambda_s/\lambda_g$ ) and  $Le$  is the gas Lewis number ( $Le = \lambda_g/\rho c_p$ ). Since  $\Gamma \gg 1$ , the modified Lewis number is always greater than unity, showing that, for the combustion in porous media, the

thermal length is always greater than the mass diffusion length. The thermally affected region can be expressed by a characteristic solid-phase diffusion length scale defined as  $l_{Ds} \sim (\lambda_s/\rho c_p)/u_n$ .

In the third level of detail (Fig.1D), the flame is expanded revealing the mass and heat transport by diffusion in the gas-phase. In the classical description of free-flames this region is known as the preheating region. Since large activation energies are found for the major part of the fuels of interest in combustion, it is expected that the reaction will be restricted to a thin region (a reaction sheet). The reaction will be a heat source and a reactant sink in the gas-phase. Thus, near the reaction sheet the gas temperature increases due to gas-phase heat conduction and the fuel concentration decreases because of the fuel depletion towards the reaction front. The gas temperature and fuel mass fraction distributions are not linear as a result of the convection transport and their slopes change discontinuously across the reaction sheet. On the other hand, the solid-phase temperature is practically linear because the interphasic heat transfer is expected to be negligible compared to the gas conduction. Now, a characteristic gas-phase diffusion length scale can be defined as  $l_{Dg} \sim (\lambda_g/\rho c_p)/u_n$ , where diffusion and convection in the gas-phase are the controlling mechanisms.

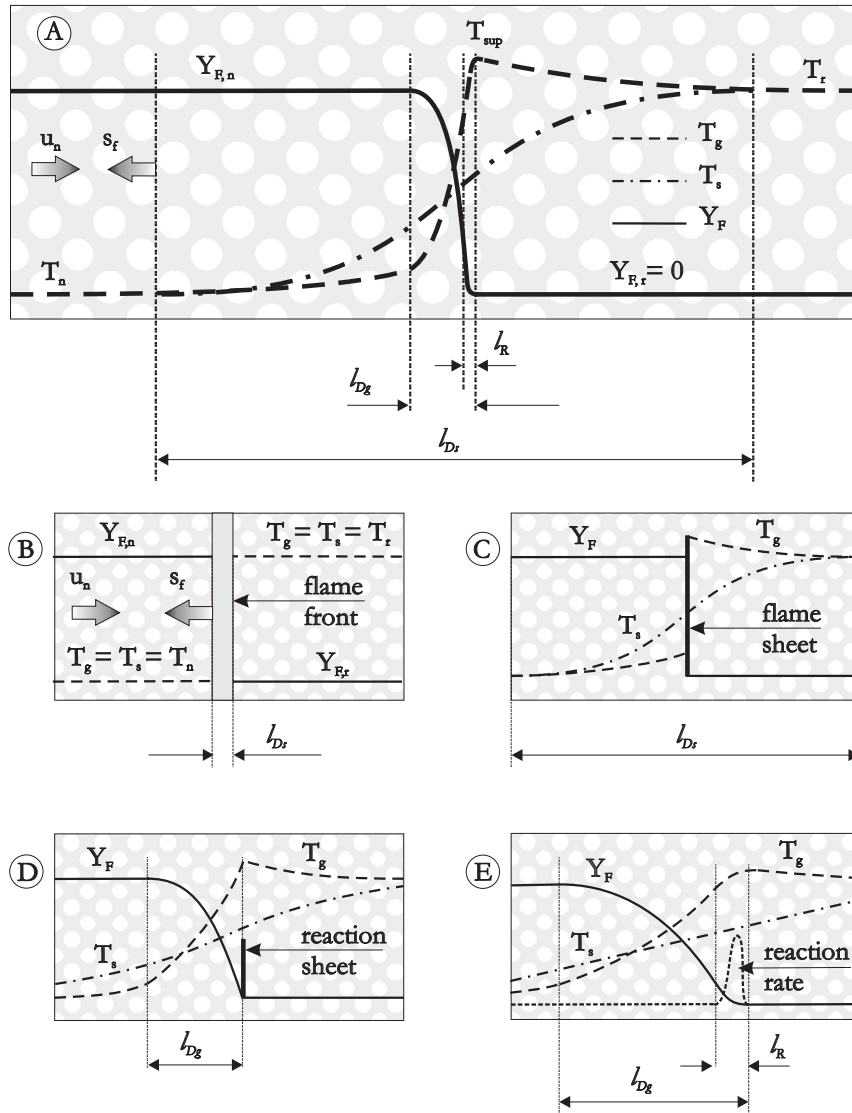


Figure 1 - Rendering of the temperatures and fuel mass fraction distributions for the different characteristic length scales of the problem.

In the last, and more complete, level of detail (Fig.1E), the reaction sheet is expanded revealing the reaction rate and the continuous variations of the gas temperature and fuel mass fraction slopes. Now we are interested in defining a characteristic reaction length scale  $l_R$ . This can be done by comparing the magnitude of the temperature change across the characteristic reaction length scale ( $\Delta T_R$ ) with that across the characteristic gas-phase diffusion length scale ( $\Delta T_{Dg}$ ):  $l_R/l_{Dg} \sim \Delta T_R/\Delta T_{Dg}$ . Noting that the temperature increase in the gas-phase across the preheating region is equal to the temperature increase from the initial value to the adiabatic flame temperature ( $\Delta T_{Dg} = T_r - T_n$ ) and that the temperature variation across the reaction region can



be approximated by  $\Delta T_R \sim [w/(dw/dT)]_{T_r}$ , where  $w$  is the reaction rate according to the Arrhenius expression, the relation between the two characteristic length scales is

$$\frac{l_R}{l_{Dg}} \sim \frac{RT_r}{Ea} \frac{T_r}{(T_r - T_n)} \sim \frac{1}{\beta}$$

where  $\beta$  is the Zel'dovich number and usually lies between 5 and 15 (Zel'dovich et al., 1985; Liñán, 1974).

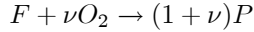
It is interesting to note that the gas-phase diffusion length scale, defined as the flame thickness for freely propagating flames, is of the order of 1mm for hydrocarbon fuels. The typical ceramic foams used as solid matrix in porous burners have pore diameters ranging from 2 to 4 mm (the exceptions are the surface burners where smaller pore diameters are used). Then, the combustion reaction is not expected to spread over several pores but to be confined to one pore. The pore walls will interfere in the reaction just close to the edges of each small tridimensional flame where they will behave as a sink of energy and radicals. Ultimately, the description of the flame structure in the flame sheet within a porous medium is very similar to that of a free flame. The main difference is that in the combustion in a porous medium we find an additional wide region ( $l_{Ds}$ ) of heat exchange between the gas and solid phases leading to higher gas temperature in the preheating region. Possible wall catalytic effects and flame stretch effects are not taken into account here.

From the asymptotic point of view, the flame structure analysis follows the hypothesis that  $l_R \ll l_{Dg} \ll l_{Ds}$ . In the following, the conservation equations are presented, nondimensionalized and solved by asymptotic expansions taking advantage of the differences among the three length scales identified.

### 3. Basic Set of Equations

A one-dimensional, two-medium model for the conservation of mass, gas phase energy, solid phase energy and species is written following Sahraoui and Kaviany (1994). The mass conservation implies that  $\rho_n u_n$  is constant for the one-dimensional flow with  $\rho_n$  and  $u_n$  being respectively the gas density and the gas velocity far upstream from the flame. For a steady state, stationary flame, the laminar flame speed  $s_f$  is equal to  $u_n$ . The specific heat capacity  $c_p$ , the thermal conductivities ( $\lambda_g$  for the gas and  $\lambda_s$  for the solid) and the product  $\rho D$  (density times mass diffusivity) are assumed uniform along the flame. The gas and solid radiation and the dispersion effects are neglected. The pressure drop in the porous medium is assumed negligible and the momentum equation becomes trivial. The thermal conductivities and the mass diffusivity are effective properties in the respective phase (i.e., include the pore channel variable area and tortuosity effects; Kaviany, 1995).

The fuel combustion is assumed to occur following a global one-step mechanism, represented in mass variables as



where  $\nu$  is the mass of oxygen per mass of fuel ratio.

The steady state, volume-averaged energy and species conservation equations (omitting for simplicity the volume-averaging notation) then become

$$\varepsilon \rho u = \varepsilon \rho_n u_n \tag{1}$$

$$\varepsilon \rho_n u_n \frac{dY_F}{dx} = \varepsilon \rho D_F \frac{d^2 Y_F}{dx^2} - \varepsilon A \rho^2 Y_O Y_F T_g^a e^{-E/RT_g} \tag{2}$$

$$\varepsilon \rho_n u_n \frac{dY_O}{dx} = \varepsilon \rho D_O \frac{d^2 Y_O}{dx^2} - \varepsilon \nu A \rho^2 Y_O Y_F T_g^a e^{-E/RT_g} \tag{3}$$

$$\varepsilon \rho_n u_n c_p \frac{dT_g}{dx} = \varepsilon \lambda_g \frac{d^2 T_g}{dx^2} + \varepsilon Q A \rho^2 Y_O Y_F e^{-E/RT_g} + h_v (T_s - T_g) \tag{4}$$

$$0 = (1 - \varepsilon) \lambda_s \frac{d^2 T_s}{dx^2} - h_v (T_s - T_g) \tag{5}$$

where  $Q$  is the fuel mass based heat of reaction,  $h_v$  is the volumetric convection coefficient,  $E$  is the activation energy and  $R$  is the universal gas constant.

#### 4. Nondimensionalization

Defining the nondimensional variables (Williams, 1985)

$$y_F = \frac{Y_F}{Y_{Fn}}, \quad y_O = \frac{Y_O}{Y_{On}}, \quad \theta = \frac{c_p(T - T_n)}{Y_{Fn} Q} = \frac{T - T_n}{T_r - T_n}, \quad z = \int_0^x \frac{u_n}{(\lambda_s/\rho_n c_p)} dx \quad (6)$$

the premixed-flame within a porous medium is described by the following conservation equations

$$\varepsilon \frac{dy_F}{dz} = \frac{\varepsilon}{Le_F \Gamma} \frac{d^2 y_F}{dz^2} - \varepsilon \widehat{D}a y_O y_F \exp\{-\beta(1 - \theta_g)/[1 - \alpha(1 - \theta_g)]\} \quad (7)$$

$$\varepsilon \frac{dy_O}{dz} = \frac{\varepsilon}{Le_O \Gamma} \frac{d^2 y_O}{dz^2} - \varepsilon \Phi \widehat{D}a y_O y_F \exp\{-\beta(1 - \theta_g)/[1 - \alpha(1 - \theta_g)]\} \quad (8)$$

$$\varepsilon \frac{d\theta_g}{dz} = \frac{\varepsilon}{\Gamma} \frac{d^2 \theta_g}{dz^2} + \varepsilon \widehat{D}a y_O y_F \exp\{-\beta(1 - \theta_g)/[1 - \alpha(1 - \theta_g)]\} + N(\theta_s - \theta_g) \quad (9)$$

$$0 = (1 - \varepsilon) \frac{d^2 \theta_s}{dz^2} - N(\theta_s - \theta_g) \quad (10)$$

where

$$\Gamma = \frac{\lambda_s}{\lambda_g}, \quad \beta = \frac{E(T_r - T_n)}{R_g T_r^2}, \quad \alpha = \frac{(T_r - T_n)}{T_r}, \quad N = \frac{\lambda_s h_v}{(\rho_n u_n c_p)^2}, \quad \Phi = \frac{Y_{Fn} \nu}{Y_{On}}$$

$$\widehat{D}a = \frac{A \rho^2 \lambda_s Y_{On} T_g^a \exp(-\beta/\alpha)}{(\rho_n^2 u_n^2 c_p)}$$

The parameter  $\beta$  is the Zel'dovich number,  $\alpha$  is the dimensionless heat release,  $N$  is the interphase heat transfer parameter,  $\Phi$  is the equivalence ratio and  $\widehat{D}a$  is a modified Damköhler number. The parameter  $\Gamma$  appears dividing the diffusion terms in Eqs. (7) to (9) and it satisfies the condition  $\Gamma \gg 1$ . By using this property, it is possible to employ the singular perturbation method to find an analytical solution for the problem. In a region of the order of  $\Gamma^{-1}$  near the flame, the gas-phase temperature reaches the flame value, then, since the non-dimensional gas-phase temperature variation is of the order of unity, but the spatial variation is of the order of  $\Gamma^{-1}$ , the description of the pre-heating zone follows a boundary layer method.

#### 5. Outer Zone: problem of the order of unity

In the characteristic length scale  $z = \zeta = O(1)$ , the diffusive terms are of the order of  $\Gamma^{-1}$  and the reaction is exponentially small. Thus, Eqs. (7) to (10) take the form

$$\varepsilon \frac{dy_F}{d\zeta} = \frac{\varepsilon}{Le_F \Gamma} \frac{d^2 y_F}{d\zeta^2} \quad (11)$$

$$\varepsilon \frac{dy_O}{d\zeta} = \frac{\varepsilon}{Le_O \Gamma} \frac{d^2 y_O}{d\zeta^2} \quad (12)$$

$$\varepsilon \frac{d\theta_g}{d\zeta} = \frac{\varepsilon}{\Gamma} \frac{d^2 \theta_g}{d\zeta^2} + N(\theta_s - \theta_g) \quad (13)$$

$$0 = (1 - \varepsilon) \frac{d^2 \theta_s}{d\zeta^2} - N(\theta_s - \theta_g) \quad (14)$$

The solution of Eqs. (11) to (14) can be written as

$$\begin{aligned} \theta_s &= \theta_s^{(0)} + \Gamma^{-1} \theta_s^{(0)(1)} + o(\Gamma^{-1}) \\ \theta_g &= \theta_g^{(0)} + \Gamma^{-1} \theta_g^{(0)(1)} + o(\Gamma^{-1}) \\ y_O &= y_O^{(0)} + \Gamma^{-1} y_O^{(0)(1)} + o(\Gamma^{-1}) \\ y_F &= y_F^{(0)} + \Gamma^{-1} y_F^{(0)(1)} + o(\Gamma^{-1}) \end{aligned} \quad (15)$$

Substituting these expansions in Eqs. (11) to (14) and passing to the limit  $\Gamma \rightarrow \infty$ , the first approximation for the set of equations with order of unity,  $O(1)$ , is

$$\varepsilon \frac{dy_F^{(0)}}{d\zeta} = 0 \quad (16)$$

$$\varepsilon \frac{dy_O^{(0)}}{d\zeta} = 0 \quad (17)$$

$$\varepsilon \frac{d\theta_g^{(0)}}{d\zeta} = N(\theta_s^{(0)} - \theta_g^{(0)}) \quad (18)$$

$$0 = (1 - \varepsilon) \frac{d^2\theta_s^{(0)}}{d\zeta^2} - N(\theta_s^{(0)} - \theta_g^{(0)}) \quad (19)$$

The solution for Eqs. (16) and (17) are  $y_F^{(0)} = y_O^{(0)} = 1$ , for  $\zeta \leq \zeta_f$  and  $y_F^{(0)} = 0$  and  $y_O^{(0)} = 1 - \Phi$ , for  $\zeta \geq \zeta_f$ . A relation between the gas-phase temperature  $\theta_g^{(0)}$  and solid-phase temperature  $\theta_s^{(0)}$  is found by combining and integrating Eqs. (18) and (19)

$$\theta_g^{(0)} + \frac{(1 - \varepsilon)}{\varepsilon} \frac{d\theta_s^{(0)}}{d\zeta} + D = 0 \quad (20)$$

with  $D = 0$  para  $\zeta \leq \zeta_f$  e  $D = 1$  para  $\zeta \geq \zeta_f$ .

Taking Eq. (20) into (19)

$$\frac{d^2\theta_s^{(0)}}{d\zeta^2} + \frac{N}{\varepsilon} \frac{d\theta_s^{(0)}}{d\zeta} - \frac{N}{(1 - \varepsilon)} \theta_s^{(0)} = -\frac{N}{(1 - \varepsilon)} D \quad (21)$$

Once Eq. (21) is solved, the gas-phase temperature  $\theta_g^{(0)}$  is determined from Eq. (20). The solution for the solid-phase temperature is given by

$$\theta_s^{(0)} = \begin{cases} \theta_s^{(0)}(\zeta_f) e^{r_1(\zeta - \zeta_f)}, & \text{for } \zeta \leq \zeta_f \\ 1 + (\theta_s^{(0)}(\zeta_f) - 1) e^{-r_2(\zeta - \zeta_f)}, & \text{for } \zeta \geq \zeta_f \end{cases} \quad (22)$$

in which

$$r_1 = -\frac{N}{2\varepsilon} + \frac{1}{2} \left[ \left( \frac{N}{\varepsilon} \right)^2 + 4 \frac{N}{1 - \varepsilon} \right]^{1/2}$$

and

$$r_2 = \frac{N}{2\varepsilon} + \frac{1}{2} \left[ \left( \frac{N}{\varepsilon} \right)^2 + 4 \frac{N}{1 - \varepsilon} \right]^{1/2}$$

The value of the solid-phase temperature at the flame location  $\theta_s^{(0)}(\zeta_f)$  is calculated imposing the continuity of the function and its first derivative (the conduction heat flux), obtaining

$$\theta_s^{(0)}(\zeta_f) = \frac{r_2}{r_1 + r_2} = \frac{1}{2} + \frac{1}{2 \{1 + 4(N/\varepsilon)^{-1}[\varepsilon/(1 - \varepsilon)]\}^{1/2}} \quad (23)$$

From Eq. (23), we observe that for very low values of porosity,  $\varepsilon \ll 1$ , the solid-phase temperature at the flame reaches a limiting value equal to unity,  $\theta_s^{(0)}(\zeta_f) \rightarrow 1$ . Conversely, for high porosity,  $1 - \varepsilon \ll 1$ , the solid-phase temperature at the flame reaches a limiting value equal to 0.5,  $\theta_s^{(0)}(\zeta_f) \rightarrow 1/2$ . Thereby, it is possible to conclude that  $1/2 \leq \theta_s^{(0)}(\zeta_f) \leq 1$  for every possible value of porosity.

Once knowing the leading order term of the solid-phase temperature  $\theta_s^{(0)}$ , the leading order term of the gas-phase temperature  $\theta_g^{(0)}$  can be determined from Eq. (20), obtaining

$$\theta_g^{(0)} = \begin{cases} [(1 - \varepsilon)/\varepsilon] r_1 \theta_s^{(0)}(\zeta_f) e^{r_1(\zeta - \zeta_f)}, & \text{for } \zeta \leq \zeta_f \\ 1 + [(1 - \varepsilon)/\varepsilon] r_2 [1 - \theta_s^{(0)}(\zeta_f)] e^{-r_2(\zeta - \zeta_f)}, & \text{for } \zeta \geq \zeta_f \end{cases} \quad (24)$$

Imposing the condition  $\zeta = \zeta_f$  in the solution for the gas-phase temperature, Eq. (24), the following values for the upstream and downstream sides of the flame are found

$$\theta_g^{(0)}(\zeta_f^-) = [(1 - \varepsilon)/\varepsilon] r_1 \theta_s^{(0)}(\zeta_f) \quad (25)$$

$$\theta_g^{(0+)}(\zeta_f^+) = 1 + [(1 - \varepsilon)/\varepsilon] r_2 [1 - \theta_s^{(0)}(\zeta_f)] \quad (26)$$

Subtracting Eq.(25) from (26) and applying the definition of  $\theta_s^{(0)}(\zeta_f)$ , Eq.(23), the difference  $\theta_g^{(0)}(\zeta_f^+) - \theta_g^{(0)}(\zeta_f^-)$  reveals the discontinuity of the gas-phase temperature across the flame in the scale of order of unity, which is

$$\theta_g^{(0)}(\zeta_f^+) - \theta_g^{(0)}(\zeta_f^-) = 1 \quad (27)$$

When the porosity tends to unit,  $1 - \varepsilon \ll 1$ , the gas-phase solution reduces to a step function across the flame with  $\theta_g^{(0)} = 0$ , for  $\zeta \leq \zeta_f$  and  $\theta_g^{(0)} = 1$ , for  $\zeta \geq \zeta_f$ . In the next section, the pre-heating region is analyzed.

## 6. Inner Zone: problem of the order of $\Gamma^{-1}$

In this zone, the variation of the nondimensional variables is of order of unity along a characteristic length of the order of  $\Gamma^{-1}$  around the flame. The solution in this thin zone is denoted by  $y_F^{(*)}$ ,  $y_O^{(*)}$ ,  $\theta_g^{(*)}$  and  $\theta_s^{(*)}$ . The thin region around the flame, defined by the length scale  $\Gamma^{-1}$ , is analyzed imposing the conditions that near the flame, more precisely at  $\Gamma(z - \zeta_f) = \xi$ , the reactants mass fractions vary according  $1 \leq y_F^{(*)} \leq 0$ ,  $1 \leq y_O^{(*)} \leq (1 - \Phi)$  and  $\theta_g^{(0)}(\zeta_f^-) \leq \theta_g^{(*)} \leq \theta_g^{(0)}(\zeta_f^+)$ . Since there is no chemical source in the energy conservation equation for the solid-phase, the variation of temperature  $\theta_s^{(*)}$  is of the order of  $\Gamma^{-1}$ . By rescaling the spatial coordinate to the pre-heating region, the governing equations become

$$\varepsilon \frac{dy_F^{(*)}}{d\xi} = \frac{\varepsilon}{Le_F} \frac{d^2 y_F^{(*)}}{d\xi^2} \quad (28)$$

$$\varepsilon \frac{dy_O^{(*)}}{d\xi} = \frac{\varepsilon}{Le_O} \frac{d^2 y_O^{(*)}}{d\xi^2} \quad (29)$$

$$\varepsilon \frac{d\theta_g^{(*)}}{d\xi} = \varepsilon \frac{d^2 \theta_g^{(*)}}{d\xi^2} + \frac{N}{\Gamma} (\theta_s^{(*)} - \theta_g^{(*)}) \quad (30)$$

$$0 = (1 - \varepsilon) \frac{d^2 \theta_s^{(*)}}{d\xi^2} - \frac{N}{\Gamma^2} (\theta_s^{(*)} - \theta_g^{(*)}) \quad (31)$$

The boundary conditions are determined when the solution corresponding to the problem of order of unity is matched with the problem of the order of  $\Gamma^{-1}$ . Thus, in the unburned region (upstream from the flame), for  $\xi \rightarrow -\infty$ ,  $\theta_g^{(*)} \rightarrow \theta_g^{(0)}$ ,  $\theta_s^{(*)} \rightarrow \theta_s^{(0)}$ ,  $y_F^{(*)} \rightarrow y_F^{(0)} = 1$  and  $y_O^{(*)} \rightarrow y_O^{(0)} = 1$ . In the burned region (downstream the flame), for  $\xi \rightarrow \infty$ ,  $\theta_g^{(*)} \rightarrow \theta_g^{(0)}$ ,  $\theta_s^{(*)} \rightarrow \theta_s^{(0)}$ ,  $y_F^{(*)} \rightarrow y_F^{(0)} = 0$  and  $y_O^{(*)} \rightarrow y_O^{(0)} = (1 - \Phi)$ .

The solution of Eqs. (28) and (29) are  $y_F^{(*)} = 1 - e^{Le_F(\xi - \xi_f)}$  and  $y_O^{(*)} = 1 - \Phi e^{Le_O(\xi - \xi_f)}$  for  $-\infty \leq \xi \leq \xi_f$ , and  $y_F^{(*)} = 0$  and  $y_O^{(*)} = 1 - \Phi$  for  $\xi_f \leq \xi \leq \infty$ .

An analysis of Eqs. (30) and (31) reveals that an approximated solution in terms of an expansion on  $\Gamma^{-1}$  can be written as

$$\begin{aligned} \theta_s^{(*)} &= \theta_s^{(*) (0)} + \Gamma^{-1} \theta_s^{(*) (1)} + \Gamma^{-2} \theta_s^{(*) (2)} + o(\Gamma^{-2}) \\ \theta_g^{(*)} &= \theta_g^{(*) (0)} + \Gamma^{-1} \theta_g^{(*) (1)} + \Gamma^{-2} \theta_g^{(*) (2)} + o(\Gamma^{-2}) \end{aligned} \quad (32)$$

The temperature profiles are determined by the substitution of Eq. (32) into Eqs.(30) and (31). The solution of Eq.(31) is  $\theta_s^{(*) (0)} = C^{(*) (0)}$  and  $\theta_s^{(*) (1)} = C^{(*) (1)} \xi$ , in which the value of  $C^{(*) (0)}$  and  $C^{(*) (1)}$  are determined matching the solution  $\theta_s^{(*)}$  with  $\theta_s^{(0)}$ . The matching implies that, for  $\xi \rightarrow -\infty$ , the function must be continuous and the heat flux in the solid-phase  $d\theta_s^{(*)}/d\xi$  is equal to the heat flux  $d\theta_s^{(0)}/d\zeta$  at  $\zeta = \zeta_f$ . Then,  $C^{(*) (0)} = \theta_s^{(0)}(\zeta_f)$  and  $C^{(*) (1)} = d\theta_s^{(0)}/d\zeta|_{\zeta=\zeta_f}$ .

The equation for the leading order of the gas-phase,  $\theta_g^{(*) (0)}$ , is given by

$$\varepsilon \frac{d\theta_g^{(*) (0)}}{d\xi} = \varepsilon \frac{d^2\theta_g^{(*) (0)}}{d\xi^2} \quad (33)$$

whose solution is  $\theta_g^{(*) (0)}(\xi) = C_3^{(*)} e^\xi + C_4^{(*)}$ . The constants are determined by the matching with the profile of  $\theta_g^{(0)}$  at  $\zeta = \zeta_f$ . Thus, as  $\xi \rightarrow -\infty$ ,  $\theta_g^{(*) (0)} \rightarrow \theta_g^{(0)}(\zeta_f^-)$  leading to  $\theta_g^{(*) (0)}(\xi) = C_3^{(*)} e^\xi + \theta_g^{(0)}(\zeta_f^-)$ . The value of  $C_3^{(*)}$  is specified applying the condition at the flame,  $\theta_g^{(*) (0)}(\xi = 0) = \theta_g^{(0)}(\zeta_f^+)$ , since downstream from the flame there is the region controlled by the interfacial heat transfer from the gas to the solid-phase. Then, recalling that  $\theta_g^{(0)}(\zeta_f^-) - \theta_g^{(0)}(\zeta_f^+) = 1$ , we have

$$\theta_g^{(*) (0)}(\xi) = \theta_g^{(0)}(\zeta_f^-) + e^{(\xi - \xi_f)} \quad (34)$$

The  $O(\Gamma^{-1})$  correction for the gas temperature inside the preheating region  $\theta_g^{(*) (1)}$  is given by

$$\frac{d}{d\xi} \left( e^{-\xi} \frac{d}{d\xi} \theta_g^{(*) (1)} \right) = \frac{N}{\varepsilon} \left\{ 1 + [\theta_s^{(0)}(\zeta_f^-) - \theta_s^{(0)}(\zeta_f)] e^{-\xi} \right\} \quad (35)$$

whose solution is:

$$\theta_g^{(*) (1)} = \frac{N}{\varepsilon} \left\{ (\xi e^\xi - e^\xi + 1) + [\theta_s^{(0)}(\zeta_f) - \theta_s^{(0)}(\zeta_f^-)] \xi \right\} \quad (36)$$

after imposing the condition  $\theta_g^{(*) (1)} = 0$  at  $\xi = 0$  and the matching condition  $d\theta_g^{(*) (1)}/d\xi \rightarrow d\theta_g^{(0)}/d\zeta \Big|_{\zeta_f}$ .

## 7. Inner zone: reaction region

The description of the reaction zone follows (Liñán, 1974), which demands

$$\begin{aligned} \theta_s &= \theta_{sf}^{(*)} + \delta \theta_s^{(1)} && +o(\delta) \\ \theta_g &= \theta_{gf}^{(*)} - \delta (\theta_g^{(1)} + m\eta + p) && +o(\delta) \\ y_O &= y_{Of}^{(*)} + \delta d_O Le_O y_O^{(1)} && +o(\delta) \\ y_F &= 0 + \delta d_F Le_F y_F^{(1)}/\gamma && +o(\delta) \\ z &= \bar{\zeta}_f + \delta \Gamma^{-1} (\eta + p/m)/\gamma && +o(\delta) \end{aligned} \quad (37)$$

in which  $\bar{\zeta}_f = \zeta_f + \Gamma^{-1} \xi_f$  and  $y_{Of}^{(*)} = 1 - \Phi$ .

Substituting the solution (37) into the conservation equations (7) to (10), the description of the reaction zone is governed by

$$\frac{d^2 y_F^{(1)}}{d\eta^2} = \bar{D}a y_F^{(1)} \exp[-(\theta_g^{(1)} + m\eta + p)] \quad (38)$$

$$\frac{d^2 y_O^{(1)}}{d\eta^2} = \frac{\nu d_F}{\gamma d_O} \bar{D}a y_F^{(1)} \exp[-(\theta_g^{(1)} + m\eta + p)] \quad (39)$$

$$\varepsilon \frac{d^2 \theta_g^{(1)}}{d\eta^2} = \varepsilon \frac{d_F}{\gamma} \bar{D}a y_F^{(1)} \exp[-(\theta_g^{(1)} + m\eta + p)] + \frac{\delta N}{\gamma^2 \Gamma} (\theta_s^{(*)} - \theta_g^{(*)}) \quad (40)$$

$$0 = (1 - \varepsilon) \frac{d^2 \theta_s^{(1)}}{d\eta^2} - \frac{\delta N}{\gamma^2 \Gamma} (\theta_s^{(*)} - \theta_g^{(*)}) \quad (41)$$

in which

$$\bar{D}a = \frac{\hat{D}a}{\Gamma} \left( \frac{\delta^2 Le_F (1 - \Phi)}{\gamma^2} \right) \exp \left\{ \frac{-\beta(1 - \theta_{gf}^{(*)})}{[1 - \alpha(1 - \theta_{gf}^{(*)})]} \right\},$$

We note that the term  $\Gamma^{-1} \hat{D}a$  recovers the free-flame Damköhler definition. In the characteristic length scale of the order of  $\delta \Gamma^{-1}$ , the heat transfer from the gas-phase to the solid-phase is negligible ( $\delta N/\gamma^2 \Gamma \ll 1$ ) compared to the heat transfer in the solid-phase from the equilibrium zone to the frozen zone. Therefore,

$\theta_s^{(1)} = C^{(1)}\eta$  and from the energy conservation  $C^{(1)} = C^{(*)}$ .

An analysis of the system of equations (38) to (41) leads to the choice  $\gamma = d_F$  and  $p = \ln(2\bar{D}a)$ . Then, this system of equations can be written as

$$\frac{d_O}{\nu} \frac{d^2 y_O^{(1)}}{d\eta^2} = \frac{d^2 y_F^{(1)}}{d\eta^2} = \frac{d^2 \theta_g^{(1)}}{d\eta^2} = \frac{1}{2} y_F^{(1)} \exp[-(\theta_g^{(1)} + m\eta)] \quad (42)$$

The mass fluxes  $d_F$  and  $d_O$  are defined for the upstream side as

$$-\left. \frac{1}{Le_F} \frac{dy_F^{(*)}}{d\xi} \right|_{\xi_f^-} = d_F, \quad \left. \frac{1}{Le_O} \frac{dy_O^{(*)}}{d\xi} \right|_{\xi_f^-} = d_O$$

and for the downstream side as

$$\left. \frac{1}{Le_F} \frac{dy_F^{(*)}}{d\xi} \right|_{\xi_f^+} = 0, \quad \left. \frac{1}{Le_O} \frac{dy_O^{(*)}}{d\xi} \right|_{\xi_f^+} = 0$$

The heat flux at both sides of the flame,  $d_\theta^-$  and  $d_\theta^+$  are defined as

$$\left. \frac{d\theta_g^{(*)}}{d\xi} \right|_{\xi_f^-} = d_\theta^- \quad \text{and} \quad \left. \frac{d\theta_g^{(*)}}{d\xi} \right|_{\xi_f^+} = -d_\theta^+$$

Since the solution  $( )^{(1)}$  has to match with the solution  $( )^{(*)}$ , then, as  $\eta \rightarrow -\infty$ ,

$$\frac{dy_F^{(1)}}{d\eta} = -1, \quad \frac{dy_O^{(1)}}{d\eta} = -1/\gamma, \quad \text{and} \quad \frac{d(\theta_g^{(1)} + m\eta)}{d\eta} = -d_\theta^-/\gamma \quad (43)$$

and as  $\eta \rightarrow \infty$ ,

$$\frac{dy_F^{(1)}}{d\eta} = 0, \quad \frac{dy_O^{(1)}}{d\eta} = 0 \quad \text{and} \quad \frac{d(\theta_g^{(1)} + m\eta)}{d\eta} = d_\theta^+/\gamma \quad (44)$$

By choosing appropriately the value of  $m = d_\theta^+/\gamma$ , the heat flux is normalized

$$\left. \frac{d\theta_g^{(1)}}{d\eta} \right|_{\eta \rightarrow -\infty} = -1 \quad \text{and} \quad \left. \frac{d\theta_g^{(1)}}{d\eta} \right|_{\eta \rightarrow \infty} = 0 \quad (45)$$

From the conservation of energy at the flame  $d_\theta^+ + d_\theta^- = d_F = \gamma$ , then  $m = d_\theta^+/(d_\theta^+ + d_\theta^-)$ .

Combining Eqs. (42), and applying the boundary conditions Eqs. (43) to (45), we obtain  $\theta_g^{(1)} = y_F^{(1)}$ . Thus, the problem in the reaction region reduces to find the solution of

$$\frac{d^2 y_F^{(1)}}{d\eta^2} = \frac{1}{2} y_F^{(1)} \exp[-(y_F^{(1)} + m\eta)] \quad (46)$$

From Eq. (43), it is observed that

$$n = \lim_{\eta \rightarrow -\infty} (y_F^{(1)} - \eta)$$

The displacement  $n$  is equal to  $-p/m$ , then

$$\frac{2A\rho_f^2 \lambda_s Y_{O_n} T_{gf}^a \exp(-\beta/\alpha)}{(\rho_n^2 s_f^2 c_p)} \left( \frac{\delta^2 Le_F (1 - \Phi)}{d_F^2 \Gamma} \right) \exp \left\{ \frac{-\beta(1 - \theta_{gf}^{(*)})}{[1 - \alpha(1 - \theta_{gf}^{(*)})]} \right\} = e^{-m n} \quad (47)$$

in which

$$m n = 1.344m - 4m^2(1 - m)/(1 - 2m) + 3m^3 - \ln(1 - 4m^2), \quad \text{for} \quad -0.2 < m < 0.5 \quad (48)$$

Equation (47) provides a first-order estimate for the flame speed. Note that in combustion within a porous-medium, the value of  $m$  is bounded by  $0 \leq m \leq 0.5$ . The limit  $m = 0$  corresponds to a situation in which the flame temperature is equal to the equilibrium adiabatic temperature. Under this circumstance, there is no

excess enthalpy. Thus, the excess of enthalpy requires  $m > 0$ . The limit  $m = 0.5$  corresponds to a situation in which the heat loss to the equilibrium zone is equal to that to the frozen zone and under this condition the flame is not stable, i.e., there is extinction. Equation (48) is a approximation of the numerical solution of Eq. (46) with the boundary conditions given by Eqs.(43) and (44) - see Liñán (1974) for details. The value of  $m$  can be found from

$$m = \frac{[(1 - \varepsilon) / \varepsilon] r_2^2 \Gamma^{-1} \left( 1 - \theta_s^{(0)}(\zeta_f) \right)}{1 + [(1 - \varepsilon) / \varepsilon] r_2^2 \Gamma^{-1} \left( 1 - \theta_s^{(0)}(\zeta_f) \right)} \quad (49)$$

## 8. Discussion

For brevity, the discussion is restricted to  $Le = 1$ , since the effect of the gas Lewis number in a laminar flame is presented elsewhere (Law and Sung, 2000; Wichman and Vance, 1997). The reaction rate parameters were adjusted to give a reasonable agreement with experimental results for free flames with equivalence ratio ranging from 0.6 to 0.9 (Zhu et al., 1988). The mean pore diameter is modeled as  $d_m = \left( \sqrt{4\varepsilon/\pi} \right) / (39.37 PPI)$ , which is a uniform pore distribution model, where PPI stands for pores per inch. The volumetric heat transfer coefficient  $h_v$  is modeled following Fu et al. (1998) which uses a volumetric Nusselt number  $Nu_v = C' Re^{m'}$ , where  $Nu_v = h_v d_m^2 / \lambda_g$  and Re is the Reynolds number,  $Re = \rho_n u_n d_m / \mu_n$ .

Table 1 shows thermodynamic, transport and geometric properties of the solid and gas-phases typical of porous burners (Catapan et al., 2005; Mößbauer et al.,1999). It is also shown the parameters used in the coputations and some results for  $\phi = 0.8$ ,  $\Gamma = 60$  and  $\varepsilon = 0.8$ .

**Table 1.** Thermodynamic, transport and geometric properties for the solid and gas (methane/air) phases and the corresponding non-dimensional parameters.

Gas-Phase Properties			Solid-Phase Properties			Nondimensionals	
$R$	8.314	J/mol-K	$\lambda_s$	4.92	W/m-K	$Nu_v$	18.85
$c_p$	1452	J/kg-K	$PPI$	10	ppi	Re	54.33
$\lambda_g$	0.082	W/m-K	$\varepsilon$	0.8		$\alpha$	0.84
$E$	$1.77 \times 10^5$	J/mol	$d_m$	$2.5 \times 10^{-3}$	m	$\beta$	9.7
$A$	$6.93 \times 10^{12}$	$m^3/kg\cdot s$	$C'$	0.252		$\Gamma$	60
$a$	0		$m'$	1.08		$N$	0.6
$Q$	$5.014 \times 10^7$	J/kg	$h_v$	$2.35 \times 10^5$	W/m <sup>3</sup> -K	$\overline{Da}$	1286
$\mu_n$	$4.5 \times 10^{-5}$	kg/m-s				$\overline{Da}$	0.495
$T_n$	298	K				$m$	$7.55 \times 10^{-3}$
$T_r$	1832	K				$n$	1.366
$T_{gf}$	2157	K				$Le$	1
$s_f$	0.833	m/s				$\Phi$	0.8

Figure (2) shows the flame structure for  $\Phi = 0.8$ ,  $\Gamma = 60$  and  $\varepsilon = 0.8$  as a function of the space coordinate  $\xi$ . The range used for the spatial scale represents the solution of the problem of  $O(1)$ , in which the solid conduction and the interphase heat transfer are the dominant phenomenons. The flame can be seen as a sheet where the fuel and gas profiles are discontinuous. For these conditions the gas temperature exceeds the adiabatic limit in 20%, which corresponds to the gas preheat just upstream of the flame.

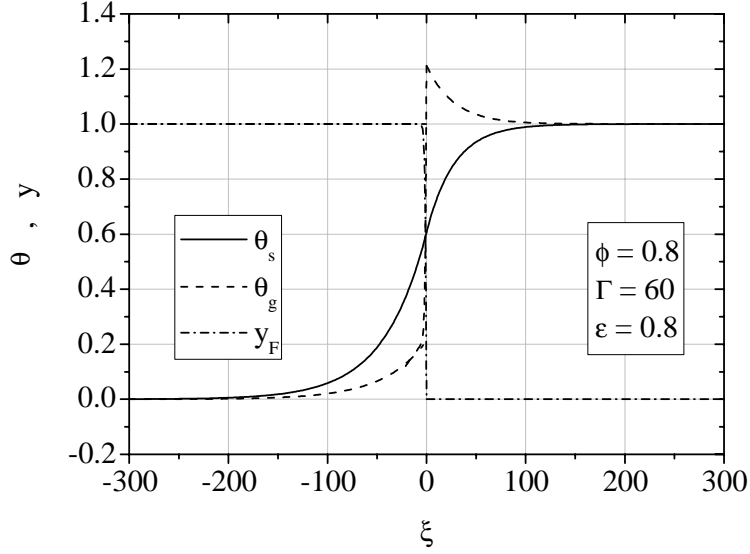


Figure 2 - Nondimensional gas and solid temperatures and fuel fraction profile for a flame with  $\Phi = 0.8$ ,  $\Gamma = 60$  and  $\varepsilon = 0.8$  (solution of the  $O(1)$  problem).

Figure (3) shows the same result as Fig.(2) with a range for the spatial scale that represents the solution of the problem of  $O(\Gamma^{-1})$ . It is possible to see the solution in the preheating region connecting the discontinuous profiles of  $\theta_g^{(0)}$  and  $y_F^{(0)}$  across the flame. Close to the reaction sheet, where the gas-phase temperature and fuel mass fraction slopes are discontinuous, the thermal diffusion in the gas-phase becomes the dominant phenomenon. Comparing Figs. (2) and (3) it is seen that the thermal affected region ( $l_{Ds}$ ) is about 40 times larger than the preheating region ( $l_{Dg}$ ) as a result of the high thermal conductivity of the solid matrix.

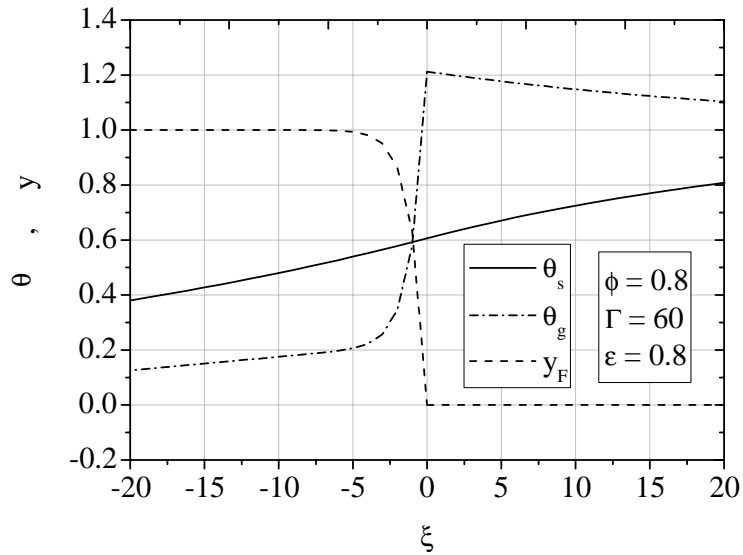


Figure 3 - Nondimensional gas and solid temperatures and fuel fraction profile for a flame with  $\Phi = 0.8$ ,  $\Gamma = 60$  and  $\varepsilon = 0.8$  (solution of the  $O(\Gamma^{-1})$  problem).

Figure (4) shows the effect of the thermal conductivities ratio,  $\Gamma$ , on the maximum nondimensional gas temperature at the flame [ $\theta_{g,f} = \theta_g^{(0)}(\zeta_f^+)$ ], on the nondimensional solid temperature at the flame [ $\theta_{s,f} = \theta_s^{(0)}(\zeta_f)$ ] and on the flame velocity ( $s_f$ ) for  $\varepsilon = 0.8$  and equivalence ratios ranging from 0.6 to 0.9. It is important to note that the model is not valid for equivalence ratios near unity because in this case the oxidant concentration ( $1 - \Phi$ ) in Eq. (47) tends to zero and prevails over the thermal effect. In order to reach the stoichiometric mixture it would be necessary to solve the  $y_o^{(1)}$  correction.



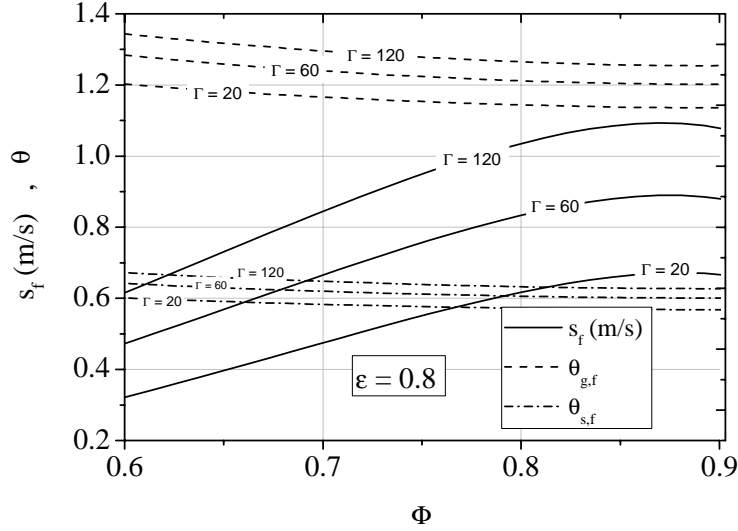


Figure 4 - Effect of the thermal conductivity ratio,  $\Gamma$ , on the maximum gas temperature at the flame ( $\theta_{g,f}$ ), on the solid temperature at the flame ( $\theta_{s,f}$ ) and on the flame velocity ( $s_f$ ) for equivalence ratios ranging from 0.5 to 0.9 and  $\varepsilon = 0.8$ .

The flame velocity,  $s_f$ , increases with  $\Phi$  and  $\Gamma$ , reaching values above that of an adiabatic free flame, that is about 0,4 m/s for a stoichiometric methane-air mixture. The superadiabatic effect is more pronounced for leaner mixtures, where the maximum gas-phase temperature reaches values 35% above the adiabatic flame temperature for the inlet conditions ( $\theta_{g,f} = 1,35$  for  $\Phi = 0.6$ ). The solid-phase temperature at the flame varies in the range of 0.57 to 0.67, in accordance with the limits  $1/2 < \theta_{g,f} < 1$ , stated by Eq.(23).

Figure (5) shows the interphase heat transfer parameter  $N$  as a function of  $\Phi$  and  $\Gamma$  for  $\varepsilon = 0.8$ . For any  $\Gamma$ , the heat transfer parameter decreases as  $\Phi$  increases. This can be understood by recalling that  $N$  is proportional to  $1/s_f^2$  ( $s_f = u_n$  for a stationary flames) and that higher flame velocities are found for higher equivalence ratios. The higher flame velocities also increase the volumetric heat transfer coefficient  $h_v$ , but this effect is counterbalanced by the reduced time to exchange heat. Figure (6) shows the flame velocity nondimensionalized by the adiabatic free flame velocity  $s_{ad}^0$  (obtained when  $\varepsilon = 1$ ). The results show again higher nondimensional flame velocities for leaner mixtures ( $s_f/s_{ad}^0 \sim 6$  for  $\Phi = 0.6$  and  $\Gamma = 120$ ) as a result of the higher heat transfer parameter. The superadiabatic effect is a function of the heat recirculation, then it tends to be more pronounced for higher values of  $N$  and  $\Gamma$ , i.e., for leaner mixtures and higher solid thermal conductivities.

The model fails for lower equivalence ratios ( $\Phi < 0.6$ ) due to the increase in the heat transfer parameter  $N$ . In these cases the connection between the solutions in the gas and solid length scales is very poor. This happens because the interphase heat transfer in the preheating region has been neglect in the present model, but it becomes relevant for lower equivalence ratios.

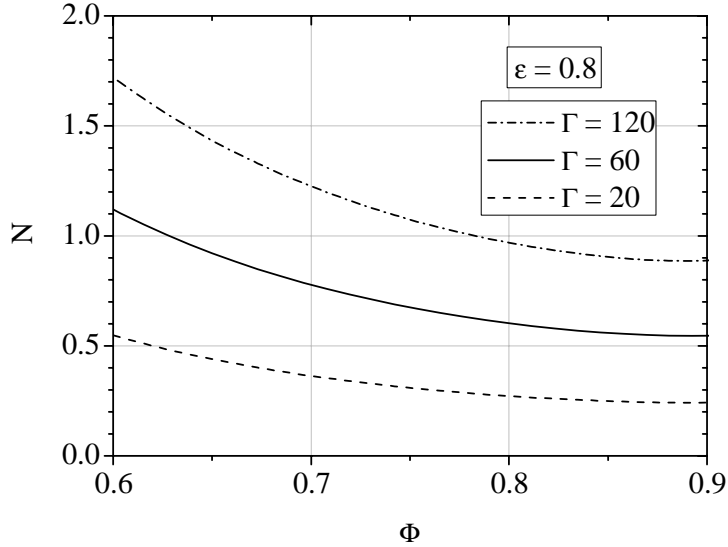


Figure 5 - Intraphase heat transfer parameter  $N$  as a function  $\Phi$  and  $\Gamma$  for  $\varepsilon = 0.8$ .

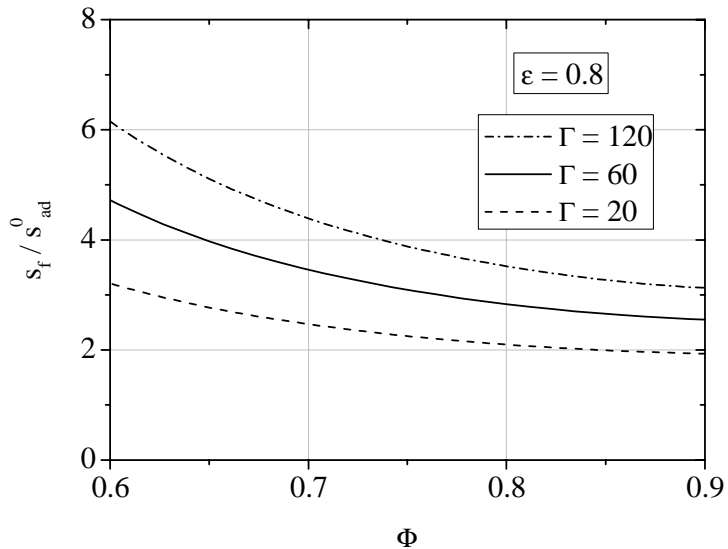
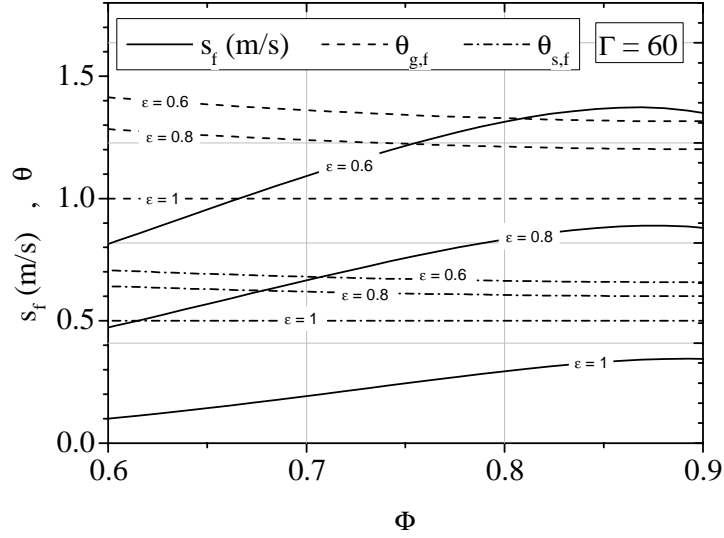
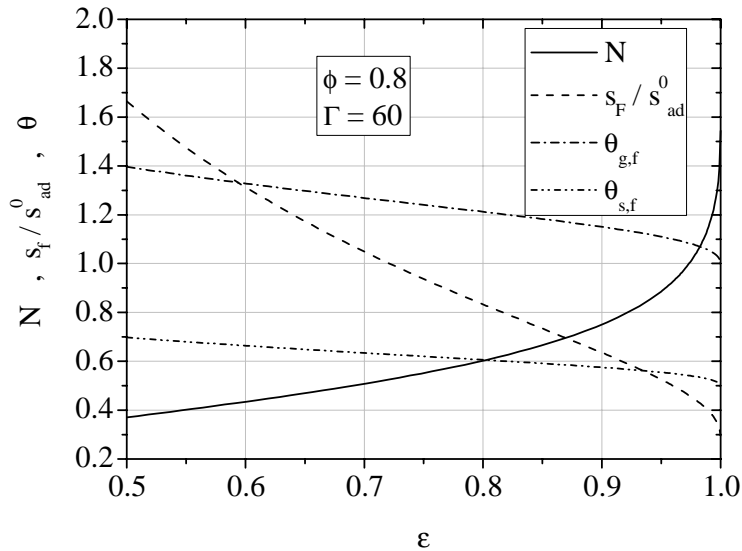


Figure 6 - Flame nondimensionalized by the adiabatic free flame velocity  $u_{ad}$  as a function  $\Phi$  and  $\Gamma$  for  $\varepsilon = 0.8$ .

Figure (7) shows the effect of the porosity on the temperature of the solid and gas phases at the flame,  $\theta_{g,f}$  and  $\theta_{s,f}$ , and on the dimensional flame velocity,  $s_f$ , for  $\Gamma = 60$ . The superadiabatic effect is amplified as the porosity is decreased because more heat is recirculated by the solid-phase. When  $\varepsilon = 1$  the model tends to the free flame solution, i.e.,  $\theta_{g,f}$  is unity over the entire range of  $\Phi$  and  $s_f$  reduces to  $s_{ad}^0$ . For this limiting case  $\theta_{s,f}$  is 0.5, its lower value according to Eq.(23), nevertheless in this limit the solid temperature is meaningless since there is no interphasic heat exchange. Figure (8) shows the dependence of  $N$ ,  $\theta_{g,f}$ ,  $\theta_{s,f}$  and  $s_f / s_{ad}$  on the volumetric porosity for  $\Phi = 0.8$  and  $\Gamma = 60$ . The heat exchange parameter  $N$  decreases as the porosity is decreased, but at the same time the effect of the solid-phase becomes more important since there is more solid-phase in the matrix. The result is that decreasing  $\varepsilon$  larger amounts of heat are transported by the solid matrix and even for lower values of  $N$  the heat recirculated is higher.

Therefore, the superadiabatic effect is mainly a function of three parameters: the matrix porosity  $\varepsilon$ , the conductivities ratio  $\Gamma$ , that together account for the transport of heat by the solid-phase, and the heat exchange parameter  $N$ , that accounts for the heat transfer between the solid-phase and the gas-phase. The combinations among these three parameters will define the heat recirculation induced by the matrix and consequently the superadiabatic effect.


 Figure 7 - Effect of the porosity on the temperatures  $\theta_{g,f}$  and  $\theta_{s,f}$  and on the flame velocity for  $\Gamma = 60$ .

 Figure 8 - Dependence of  $N$ ,  $\theta_{g,f}$ ,  $\theta_{s,f}$  and  $s_f/s_{ad}^0$  with the volumetric porosity for  $\Phi = 0.8$  and  $\Gamma = 60$ .

## 9. Conclusions

This work presented an asymptotic solution for an infinite, adiabatic porous burner considering three different characteristic length scales: the solid-phase diffusion length scale ( $l_{Ds}$ ), where the solid-phase heat conduction and interphase heat transfer dominate the problem, the gas-phase diffusion length scale ( $l_{Dg}$ ), where the gas-phase convection and heat conduction dominate the problem, and the reaction length scale ( $l_R$ ), where reaction and gas-phase heat conduction dominate the problem. Explicit solutions for the gas and solid temperatures and for the fuel consumption were found as functions of the problem parameters for the  $l_{Ds}$  and  $l_{Dg}$  characteristic length scales. The reaction length scale was used to find an expression for the flame velocity.

The results showed that the influence of the porous medium on the flame is to increase its temperature and velocity and that this effect is more pronounced for leaner mixtures, higher thermal conductivities ratios and lower porosities. The thermal affected region ( $l_{Ds}$ ) is about 40 times larger than the preheating region ( $l_{Dg}$ ) as a result of the high thermal conductivity of the solid matrix. Maximum gas-phase temperatures up to 40% above the corresponding adiabatic free-flame temperature and flame velocities up to 12 times the corresponding adiabatic free-flame velocity are found in the range of analysis.

The results showed that the superadiabatic effect is a function of three main parameters: the matrix porosity  $\varepsilon$  and the conductivities ratio  $\Gamma$ , that together account for the transport of heat by the solid-phase, and the heat exchange parameter  $N$ , that accounts for the heat transfer between the solid-phase and the gas-phase. The combinations among these three parameters will define the heat recirculation induced by the matrix and consequently the superadiabatic effect. For a higher superadiabatic effect it is desired to have low porosity  $\varepsilon$ , high thermal conductivities ratio  $\Gamma$  and to operate with fuel lean mixtures. A way to increase the effective solid thermal conductivity is to work with a medium with thick solid characteristic particle size.

Due to the simplifications assumed by the model the solution fails for lower equivalence ratios ( $\Phi < 0.6$ ) and for equivalence ratios near unity.

## 10. References

Barra, A. J. e Ellzey, J. L., 2004, "Heat recirculation and heat transfer in porous burners", *Combustion and Flame*, v. 137, p. 230-241.

Echigo, R., 1991, "Radiation enhanced/controlled phenomena of heat and mass transfer in porous media", *ASME/JSME Thermal Engineering Proceedings*, Vol.4, pp. 21-32.

Catapan, R.C., Pereira, F.M. and Oliveira, A.A.M., 2005, "Development of a radiant porous burner with a combined thermal and fluidynamic mechanism of flame stabilization", *Proceedings of the 18th Congress of Mechanical Engineering*, Ouro Preto.

Fu, x., Viskanta, R. and Gore, J.P., 1998, "Measurement and correlation of volumetric heat transfer coefficients of cellular ceramics", *Experimental Thermal and Fluid science*, Vol.17, pp. 285-293.

Howell, J.R., Hall, M.J. and Ellzey, J.L., 1996, "Combustion of hydrocarbon fuels within porous inert media", *Progress in Energy and Combustion Science*, Vol.22, pp. 121-145.

Law, C.K. and Sung, C.J., 2000, "Structure, aerodynamics and geometry of premixed flamelets", *Progress in Energy and Combustion Science*, Vol.26, pp. 459-505.

Liñán, A., 1973, "The asymptotic structure of the counterflow diffusion flames for large activation energies", *Acta Astronautica*, Vol.1, pp.1007-1039.

McIntosh, A.C., and Prothero, A., 1991, "A model of large heat transfer surface combustion with radiant heat emission", *Combustion and Flame*, Vol.83, pp.111-126.

Mösßauer, S., Pickenäcker, O., Pickenäcker K. and Trimis, D., 1999, "Application of the porous burner technology in energy- and heat-engineering", *V International Conference on Technologies for a Clean Air Environment*, Lisbon.

Pereira, F.M. and Oliveira, A.A.M., 2005, "Analytical study of the excess enthalpy in the combustion within porous media", *Proceedings of the 18th Congress of Mechanical Engineering*, Ouro Preto.

Pereira, F.M. and Oliveira, A.A.M., 2002, "Medição dos limites de estabilidade de chamas pré-misturadas de metano e ar em meios porosos de esponja cerâmica", *IX Brazilian Congress of Thermal Engineering and Sciences*, Caxambu.

Oliveira, A.A.M. and Kaviany, M., 2001, "Nonequilibrium in the transport of heat and reactants in combustion in porous media", *Progress in Energy and Combustion Science*, Vol.27, pp. 523-545.

Saharaoui, M. and Kaviany, M., 1994, "Direct Simulation vs Volume-Averaged Treatment of Adiabatic, Premixed Flame in a Porous Medium, 2001, "International Journal of Heat and Mass Transfer, Vol.17, No.18, pp. 2817-2834.

Wichman, I.S. and Vance, R., 1997, "A Study of one-dimensional laminar premixed flame annihilation", *Combustion and Flame*, Vol.110, pp. 508-523.

Williams, F., 1985, "Combustion theory the fundamental theory of chemically reacting flow systems", Perseus Publishing; 2nd edition.

Zel'doich, Ya. B.; Barenblatt, G. L., Librovich, V. B. and Makhviladze, G. M., 1985, "The mathematical theory of combustion and explosions", Consultants Bureau, New York

Zhu D. L., Egolfopoulos F. N. and Law C. K., 1988, "Experimental and numerical determination of laminar flame speeds of methane/(Ar, N<sub>2</sub>, CO<sub>2</sub>)-Air mixtures as function of stoichiometry, pressure and flame temperature", *22th Symposium on Combustion/The Combustion Institute*, pp. 1537-1545.

## ANÁLISE DE UM QUEIMADOR POROSO COM TROCADOR DE CALOR INTEGRADO VISANDO O DESENVOLVIMENTO DE AQUECEDOR DE ÁGUA DE PASSAGEM

### Roberto Wolf Francisco Jr.

Universidade Federal de Santa Catarina  
Departamento de Engenharia Mecânica  
Laboratório de Combustão e Engenharia de Sistemas Térmicos  
Campus Universitário 88.040-900 Florianópolis S.C.  
[robertowfj@gmail.com](mailto:robertowfj@gmail.com)

### Amir Antônio Martins Oliveira Jr.

Universidade Federal de Santa Catarina  
Departamento de Engenharia Mecânica  
Laboratório de Combustão e Engenharia de Sistemas Térmicos  
Campus Universitário 88.040-900 Florianópolis S.C.  
[amirol@emc.ufsc.br](mailto:amirol@emc.ufsc.br)

**Resumo.** A utilização de um meio poroso simultaneamente como câmara de combustão e trocador de calor permite o desenvolvimento de um aquecedor de passagem de alta eficiência térmica. Este trabalho tem dois objetivos. O primeiro é avaliar a influência da perda de calor volumétrica na estabilização de chama em queimadores porosos. Essa perda de calor por condução e radiação através da própria região de estabilização de chama no meio poroso altera o comportamento do queimador, permitindo a queima com altas potências sem exceder a temperatura do meio poroso. O segundo objetivo é avaliar o desempenho obtido com cerâmicas disponíveis comercialmente no Brasil. Estas cerâmicas são fabricadas para o uso como filtro de fundição e não são projetadas para a finalidade de uso em queimadores porosos. O aquecedor de passagem é constituído basicamente pelo meio poroso envolto por uma camisa d'água. Esta configuração permite o aproveitamento das altas taxas de transferência de calor por condução e radiação (intrameio) entre o queimador e a camisa d'água. Os limites de inflamabilidade foram obtidos para razões de equivalência entre 0,57 e 0,71. Resultados experimentais apontam para eficiências de 20 à 76%, de acordo com a potência utilizada, gerando até 4,2 kW de energia térmica (água quente). O combustível utilizado foi o GNV (Gás Natural Veicular) e a máxima potência obtida para uma chama estável foi de 11 kW.

*Palavras chave:* combustão, meio poroso, gás natural, aquecedor de passagem, trocador de calor.

### 1. Introdução

A utilização de um meio poroso simultaneamente como câmara de combustão e trocador de calor permite o desenvolvimento de um aquecedor de passagem de alta eficiência térmica. Esta maior eficiência na transferência de calor para a água permite o desenvolvimento de aquecedores compactos como já foi demonstrado por Pickenäcker, 1998. Além de compactos, estes aquecedores devem resultar em baixa produção de CO e grande faixa de regulagem de potência a fim de permitir economia de energia e segurança na utilização.

Este trabalho tem dois objetivos. O primeiro é avaliar a influência da perda de calor volumétrica na estabilização de chama em queimadores porosos. Essa perda de calor por condução através da própria região de estabilização de chama altera o comportamento do queimador, permitindo a queima com altas potências sem exceder o limite de temperatura do meio poroso. O segundo objetivo é avaliar o desempenho obtido com cerâmicas disponíveis comercialmente no Brasil. Estas cerâmicas são fabricadas para o uso como filtro de fundição e não são projetadas para a finalidade de uso em queimadores porosos.

Neste trabalho, a troca de calor ocorre somente na região do queimador poroso. Não é usado um trocador de calor líquido/gás como seria esperado em um equipamento.

### 2. Conceitos básicos

As esponjas cerâmicas utilizadas na fabricação de queimadores porosos são caracterizadas pela porosidade volumétrica e pela densidade linear de poros. Usualmente, (Howell et al., 1996), a porosidade fica em torno de 85% e a densidade linear de poros varia de 10ppi (3.9 ppcm) até 65 ppi (25.3 ppcm).

A diminuição do tamanho dos poros tende a dificultar a propagação da chama através do meio poroso. Isto ocorre porque quando o tamanho dos poros é diminuído, aumenta a área interfacial específica ( $m^2/m^3$ ) entre as fases gás

e sólido. Este aumento da área de troca de calor entre as fases permite uma maior transferência de energia dos gases para a matriz porosa, diminuindo a temperatura da chama que pode levar a sua extinção. Esta limitação é utilizada em queimadores porosos para formar uma barreira à passagem da frente de chama. Assim, normalmente um queimador poroso é formado por duas regiões distintas: uma região de pré-aquecimento (RP) e uma região de estabilização de chama (REC). Cerâmicas com poros menores são utilizadas na região de pré-aquecimento e com poros maiores na região de estabilização de chama.

Com a frente de chama estável na interface entre as cerâmicas de poros maiores e menores, ocorre uma transferência de calor por condução e radiação (intrameio) para o interior dos poros menores, elevando o nível de energia dos reagentes (gás natural e ar) e ocasionando um excesso de entalpia na região de reação, atingindo assim uma temperatura de reação acima da temperatura adiabática (Pereira, 2005).

No entanto, isto só ocorre localmente na região da chama, pois mais à frente a temperatura dos gases diminui devido à perda de calor para o sólido e retorna ao nível da temperatura de chama adiabática como requer a primeira lei da termodinâmica. Este pré-aquecimento dos reagentes leva a altas taxas de reação e grande eficiência termodinâmica na conversão de energia.

O excesso de entalpia ocasionado pelo pré-aquecimento dos reagentes permite a queima de misturas empobrecidas. Isto possibilita a economia de combustível em operações à baixa potência. Num queimador convencional, baixas temperaturas são obtidas diluindo-se os gases da combustão com ar frio. Já num sistema com recirculação de calor, a queima de misturas mais pobres permite alcançar baixas temperaturas sem a necessidade de diluição pós combustão.

Em uma dada pressão e temperatura inicial dos reagentes existirá uma faixa de concentrações em que a propagação de uma chama estável é possível. Estes limites são denominados de limite inferior e superior de estabilidade (LIE e LSE). O balanço de energia térmica no aquecedor é calculado como segue.

A quantidade de combustível presente em uma mistura de reagentes é medida pela razão de equivalência  $\phi$ , dada por,

$$\phi = \frac{f}{f_s} \quad (1)$$

onde,

$$f = \frac{\dot{m}_c}{\dot{m}_a} \quad (2)$$

sendo  $\dot{m}_a$  e  $\dot{m}_c$  os fluxos mássicos de ar e combustível respectivamente,  $f$  a razão combustível / ar e  $f_s$  a razão combustível / ar avaliada nas condições estequiométricas. Desta forma, quanto maior o valor de  $\phi$ , mais rica será a mistura, ou seja, maior a quantidade de combustível presente nos reagentes.

A velocidade de chama é definida por

$$u_{ch} = \frac{\dot{V}_g}{A_q} \quad (3)$$

sendo  $\dot{V}_g$  o fluxo volumétrico dos gases e  $A_q$  a área da seção transversal do queimador. A velocidade de chama é, portanto, igual à velocidade média em que os reagentes chegam à superfície de entrada do queimador.

A eficiência do aquecedor é definida como a razão entre a taxa de transferência de calor para a água (energia térmica absorvida pela água) e a potência térmica absorvida pelo queimador, ou seja,

$$\eta_{aq} = \frac{\dot{Q}_{ag}}{\dot{S}r} \quad (4)$$

A taxa de transferência de calor para a água é,

$$\dot{Q}_{ag} = \dot{m}_{ag} c_{p,ag} \Delta T_{ag} \quad (5)$$

e a potência térmica consumida pelo queimador é,

$$\dot{S}r = \dot{m}_{gnv} PCI \quad (6)$$

onde  $\dot{m}_{ag}$  e  $\dot{m}_{gnv}$  são os fluxos de massa da água e do combustível, respectivamente. Os termos  $c_{p,ag}$ ,  $\Delta T_{ag}$  e  $PCI$  representam o calor específico da água a pressão constante, a variação de temperatura da água na entrada e saída do aquecedor e o poder calorífico inferior do combustível.

A parcela de energia térmica carregada pelos gases de exaustão na superfície do aquecedor é calculada por

$$\dot{Q}_{gs} = \dot{m}_{gs} c_{p,gs} \Delta T_{gs} \quad (7)$$

onde

$$\dot{m}_{gs} = \dot{m}_{ar} + \dot{m}_{gnv} \quad (8)$$

sendo  $\dot{m}_{gs}$  e  $\dot{m}_{ar}$  os fluxos de massa dos gases de exaustão e do ar, respectivamente. Os termos  $c_{p,gs}$  e  $\Delta T_{gs}$  representam o calor específico à pressão constante e a variação de temperatura dos gases de exaustão em relação à temperatura de referência. O calor específico dos gases foi aproximado para o calor específico do ar, considerando-se a temperatura medida na superfície do aquecedor. O erro máximo obtido com esta aproximação é da ordem de 10%. A temperatura de referência utilizada foi de 25°C.

### 3. Concepção do aquecedor

O aquecedor de passagem é constituído basicamente pelo meio poroso envolto por uma camisa d'água. Esta configuração permite o aproveitamento das altas taxas de transferência de calor por condução e radiação (intrameio) entre o queimador e a camisa d'água. A Fig. 1 mostra uma concepção básica do sistema proposto. Ressalta-se que como o foco deste trabalho é a análise do comportamento do meio poroso, não é utilizado um trocador de calor gás/líquido para recuperar a energia térmica dos gases de saída.

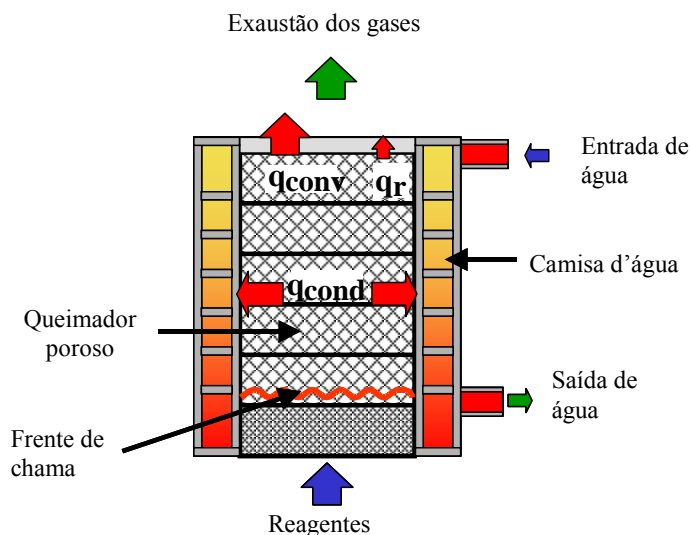


Figura 1. Concepção básica do aquecedor de passagem com queimador poroso.

No interior do aquecedor foram utilizadas cerâmicas constituídas com 65% de zircônia e 35% de alumina, podendo operar com temperaturas de até 1600°C. Na região de pré-aquecimento (RP), situado abaixo da frente de chama, foram utilizadas cerâmicas com 40 ppi e 86% de porosidade. Cerâmicas com 10 ppi e 90% de porosidade foram utilizadas para a região de estabilização de chama (REC). A Fig. 2 apresenta as cerâmicas utilizadas nos testes.

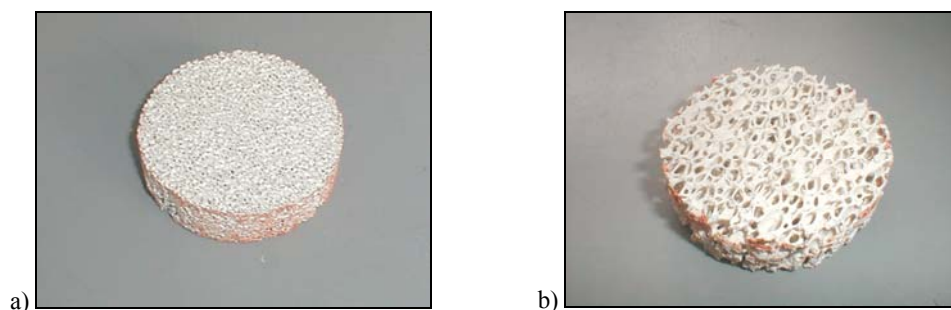


Figura 2. Esponjas cerâmicas de zircônia-alumina testadas: a) 40 ppi e 86% de porosidade; b) 10 ppi e 90 % de porosidade.

## 4. Experimento

### 4.1. Bancada de teste

O aquecedor foi testado experimentalmente em uma bancada constituída pelos seguintes equipamentos: medidores/controladores de vazão da marca OMEGA (0 a 50 lpm – GNV / 0 a 500 lpm – Ar); sistema para aquisição de dados Agilent modelo 34970A; rotâmetro para água OMEGA e bomba de água SCHNEIDER. Os termopares utilizados no interior do meio poroso e na superfície foram do tipo R (Pt – Pt/Rh 13%) com 0,254 mm (0,01polegadas) de diâmetro, inseridos em isoladores de cerâmica com a ponta exposta ao escoamento. Para a leitura de temperatura da água foram utilizados termopares tipo K (NiCr - NiAl) com 0,254 mm (0,01polegadas) de diâmetro, com isolamento de teflon, instalados a 3 cm de distância da entrada e saída de água do aquecedor. O desenho esquemático da bancada utilizada está apresentado na Fig. 3.

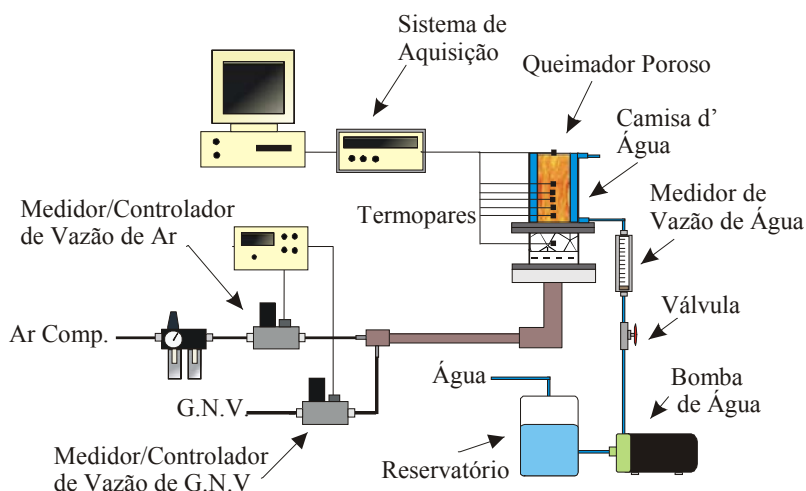


Figura 3. Desenho esquemático da bancada experimental.

Pereira (2002) mediu a perda de carga imposta ao escoamento dos gases pelo meio poroso, obtendo um valor máximo de 1,7 kPa. O queimador utilizado tinha um comprimento de 80 mm e diâmetro de 70 mm. As cerâmicas testadas pelo autor possuíam as mesmas dimensões e características geométricas das utilizadas neste trabalho.

A incerteza de medição máxima dos termopares tipo R é estimada em  $\pm 10^\circ\text{C}$  nas temperaturas medidas e dos termopares tipo K é estimada em  $\pm 1^\circ\text{C}$ . O sistema de medição de vazão para o GNV foi calibrado pelo IPT (Instituto de Pesquisas Tecnológicas – São Paulo). As incertezas de medição dos medidores de vazão Omega / FMA-773a utilizado para o GNV é  $\pm 0.6$  lpm (calibrados a  $21^\circ\text{C}$ , 1 atm) e do medidor de vazão Omega / FMA-776 utilizado para o ar é estimada em  $\pm 1$  lpm (dados do fabricante). A incerteza de medição do rotâmetro Omega / FL – 400a é estimada em 5% do valor da leitura, o qual implica em 0,25 lpm no fundo de escala.

A partir da análise de propagação de erros, as incertezas estimadas para a velocidade de chama e razão de equivalência estão apresentadas na Tab. 1. A máxima incerteza de medição obtida para a energia térmica gerada (água quente) foi de  $\pm 0,527$  kW.



Tabela 1. Incertezas de medição na razão de equivalência ( $IM_{\phi}$ ) e na velocidade de chama ( $IMu_{ch}$ ) obtidas de análise de propagação de erros para os pontos utilizados no experimento (Pereira, 2002).

$\phi$	$IM_{\phi} (\pm)$	$u_{ch} (cm/s)$	$IMu_{ch} (\pm cm/s)$
0.59	0.105	19.92	0.83
0.58	0.070	29.88	1.11
0.57	0.052	39.83	1.41
0.57	0.048	42.94	1.51
0.67	0.070	29.93	1.11
0.66	0.053	39.78	1.41
0.66	0.042	49.80	1.72
0.65	0.035	59.83	2.04
0.65	0.030	69.67	2.36
0.65	0.026	79.70	2.68
0.65	0.023	89.54	3.00
0.65	0.022	94.64	3.17
0.71	0.071	29.85	1.11
0.70	0.053	39.92	1.41
0.70	0.042	49.81	1.72
0.70	0.035	59.69	2.03
0.70	0.030	69.76	2.36
0.70	0.026	79.64	2.68
0.70	0.024	89.52	3.00
0.70	0.021	99.40	3.32
0.69	0.019	109.47	3.65
0.69	0.018	119.34	3.97
0.69	0.016	129.22	4.30

No interior do aquecedor foram instalados sete termopares, isolados por tubos cerâmicos de dois furos a base de alumina (resistentes até 1950°C e diâmetro de 1,59cm). Procurou-se manter a extremidade do termopar no centro do meio poroso com o intuito de obter a máxima temperatura na seção transversal da cerâmica, já que esta sofre um gradiente térmico radial devido à troca de calor com a água na lateral do aquecedor. A ponta do termopar entra em equilíbrio térmico com os gases e com o sólido através de convecção, radiação e condução. Assim, a medição fornecida por estes sensores deve ser entendida como uma média entre as temperaturas do gás e do sólido naquela posição. A configuração do aquecedor está mostrada na Fig. 4. O protótipo utilizado nos experimentos está na Fig. 5.

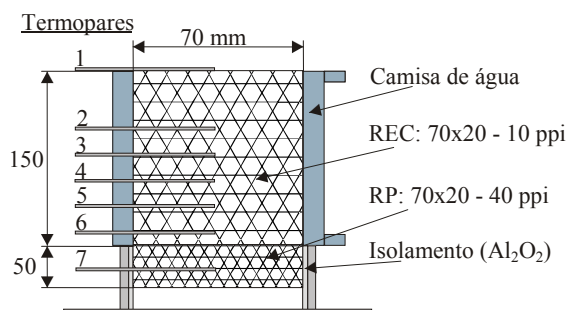


Figura 4. Configuração do aquecedor empregado nos testes.



Figura 5. Protótipo utilizado nos experimentos.

## 4.2. Metodologia

Primeiramente, é acesa a chama de forma manual na parte superior do aquecedor, utilizando-se um ponto inicial ( $\phi; u_{ch}$ ) de forma que a frente de chama penetre rapidamente para o interior do meio poroso até atingir a interface entre a RP e REC, permanecendo estacionária por algum tempo com temperaturas de até 1400°C. Este processo de aquecimento do meio poroso leva aproximadamente 10 minutos. O ponto inicial utilizado em todos os ensaios foi 0,8 e 34,10 cm/s. Em seguida, é ajustado o ponto que se deseja testar e espera-se a estabilização da chama. A posição da frente de chama é definida como sendo coincidente com o termopar de maior temperatura.

Todos os pontos foram testados mantendo-se a vazão de água constante em 2,704 e 4,854 lpm.

A chama foi considerada estável quando as temperaturas lidas nos termopares permaneceram com variações de no máximo 5°C por um tempo mínimo de 20 minutos.

Os limites de estabilidade de chama (LEC) foram determinados mantendo-se a razão de equivalência constante e variando-se a velocidade de chama em pequenos incrementos. O limite inferior de estabilidade (LIE) foi definido como sendo o ponto em que a frente de chama penetra na RP, identificado pela leitura do termopar 7 instalado a 3 cm abaixo da interface (RP/REC). O limite superior de estabilidade (LSE) foi definido como sendo o ponto em que a frente de chama atinge o termopar 2 (instalado pouco acima do centro da REC).

A máxima razão de equivalência utilizada foi definida em função da temperatura de operação no interior do meio poroso. Para um queimador de zircônia-alumina, temperaturas acima de 1600°C resultam em uma mudança na estrutura cerâmica – mudança de coloração e aparecimento de pontos vitrificados (Pereira, 2002). Sendo assim, a temperatura máxima foi fixada em 1550°C.

A aquisição dos dados durante os experimentos foi realizada automaticamente em intervalos de 5 segundos. Os resultados de temperatura apresentados neste trabalho são médias dos últimos 20 minutos de estabilização de chama.

## 4.3. Resultados

O diagrama de operação definindo os limites de estabilidade (inferior e superior) está apresentado na Fig. 6. Os pontos intermediários representam a faixa de operação. O aquecedor foi testado para razões de equivalência em torno de 0,58, 0,66 e 0,70, atingindo temperaturas de 1520°C no interior do meio poroso e potências de até 2910 kW/m<sup>2</sup> (para a área da seção transversal do queimador).

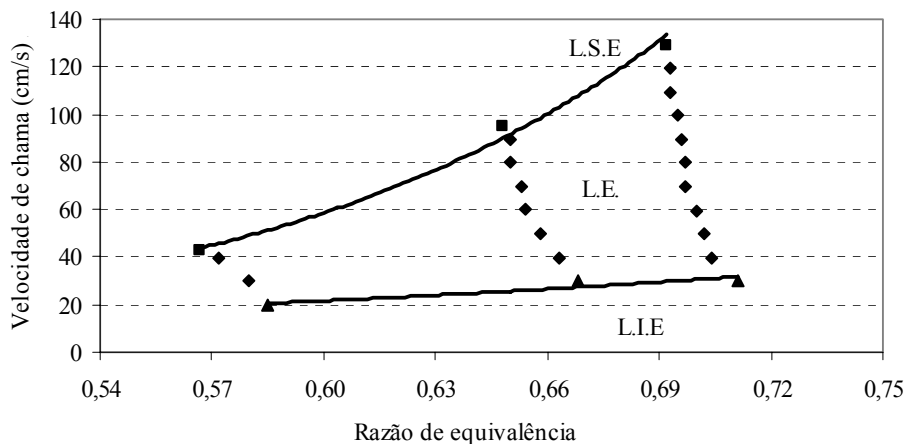


Figura 6. Diagrama de estabilidade.

Pereira (2002) estudou o mecanismo de estabilização de chama em queimadores porosos radiantes, utilizando isolante a base de Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> na lateral do queimador, com o objetivo de aumentar a parcela de energia dissipada por radiação na superfície. O meio poroso testado foi de zircônia-alumina e o combustível utilizado foi metano e ar pré-misturados. A máxima potência obtida foi de 1119 kW/m<sup>2</sup> para uma razão de equivalência de 0,60 e velocidade de chama 58 cm/s. A máxima razão de equivalência utilizada foi 0,6 devido à temperatura limite do meio poroso (1550°C). Observa-se que aqui obteve-se potência da ordem de 2,5 vezes maior e pode-se operar com razões de equivalência de até 0,71.

As Figs. 7, 8 e 9 mostram a influência da variação do fluxo de água na distribuição de temperatura no interior do aquecedor. Os pontos utilizados para a velocidade de chama representam os limites de estabilidade (máx./mín.) para uma mesma razão de equivalência. Observa-se que a variação do fluxo de água não apresentou influência na eficiência

do aquecedor ou na estabilidade da chama, sendo que a eficiência variou apenas com a potência aplicada e a área de troca de calor (água / meio poroso).

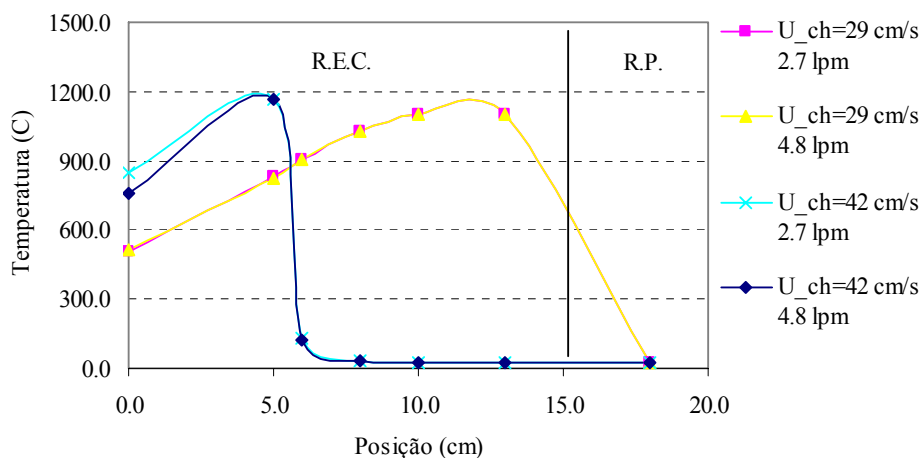


Figura 7. Influência da variação da vazão de água sobre a distribuição de temperatura no meio poroso ( $\varnothing=0,58$ ).

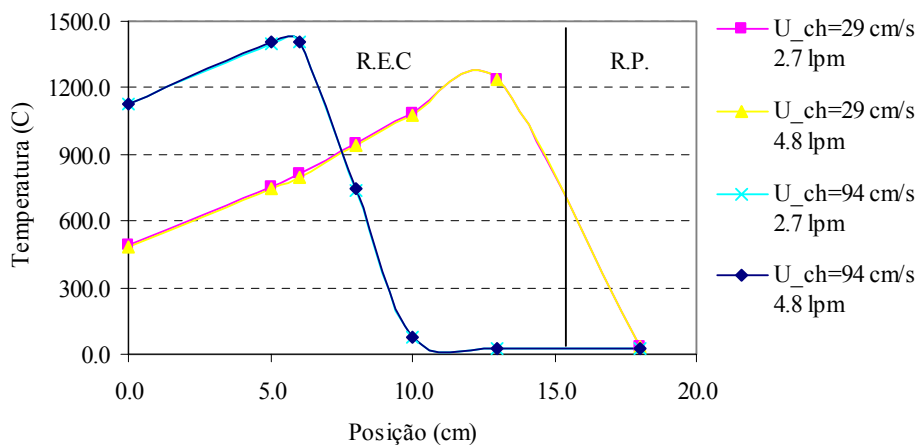


Figura 8. Influência da variação da vazão de água sobre a distribuição de temperatura no meio poroso ( $\varnothing=0,66$ ).

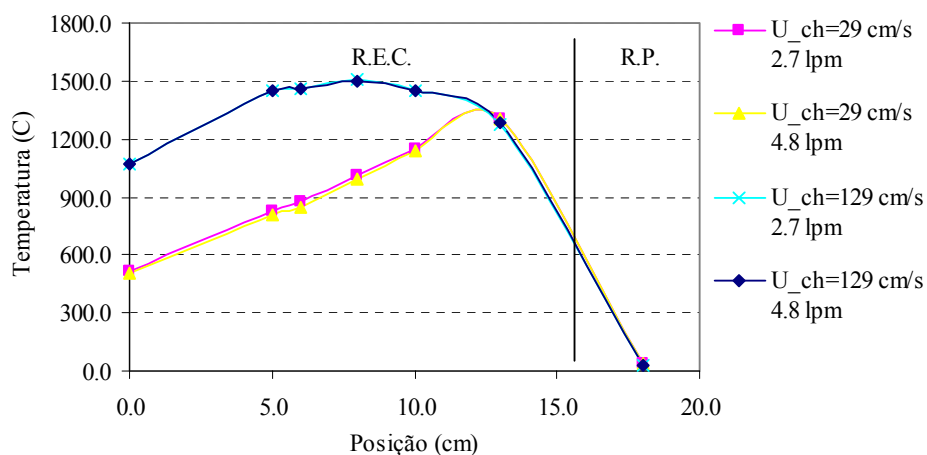


Figura 9. Influência da variação da vazão de água sobre a distribuição de temperatura no meio poroso ( $\varnothing=0,70$ ).

Como se espera, a temperatura máxima cresce com a razão de equivalência, assim como cresce o limite superior de estabilidade.

Os resultados que seguem foram obtidos para uma vazão constante de água de 2,704 lpm.

O avanço da frente de chama em função do aumento da velocidade de chama para uma mesma razão de equivalência está demonstrado nas Figs. 10, 11 e 12. Devido à ausência de termopares na região da interface entre REC e RP, as linhas não representam corretamente a temperatura. A posição da frente de chama foi identificada como sendo coincidente com a região em que ocorre a máxima temperatura, permanecendo estável na interface entre a REC e a RP para uma grande variação da velocidade de chama e sofrendo um rápido deslocamento após o descolamento da interface.

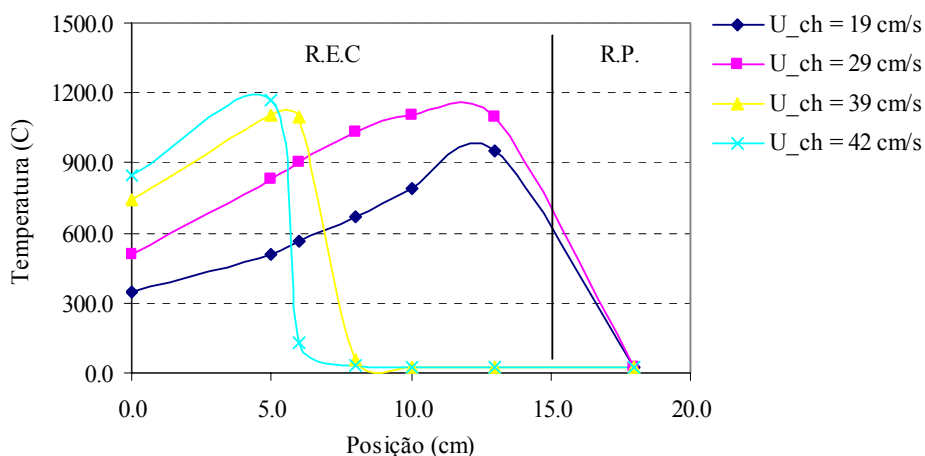


Figura 10. Deslocamento da frente de chama em função da variação da velocidade de chama ( $\phi=0,58$ ).

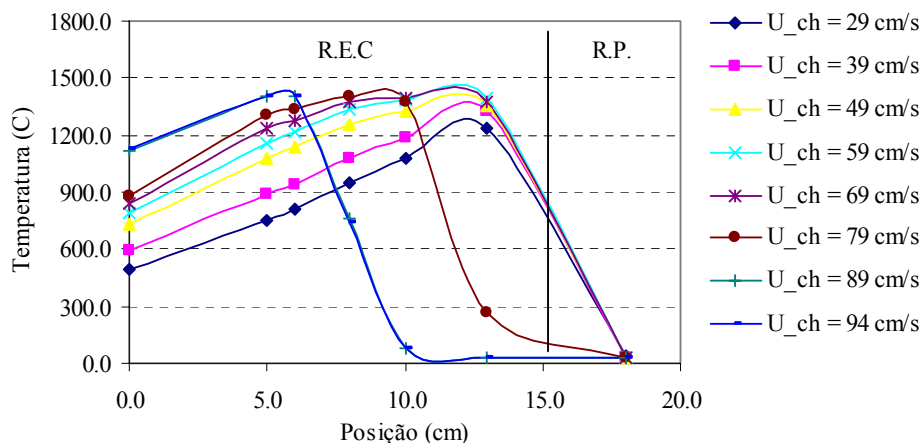


Figura 11. Deslocamento da frente de chama em função da variação da velocidade de chama ( $\phi=0,66$ ).

Observa-se que a máxima temperatura tem a tendência de crescer com o aumento da velocidade de chama. A razão é que a temperatura do escoamento tende a diminuir menos quando a vazão cresce. Com o aumento da velocidade de chama, esta tende a deslocar-se para a saída do queimador. Nota-se que o gradiente de temperatura na região após a chama não depende fortemente da velocidade de chama, indicando uma situação de fluxo de calor aproximadamente constante aplicado sobre o escoamento da água.

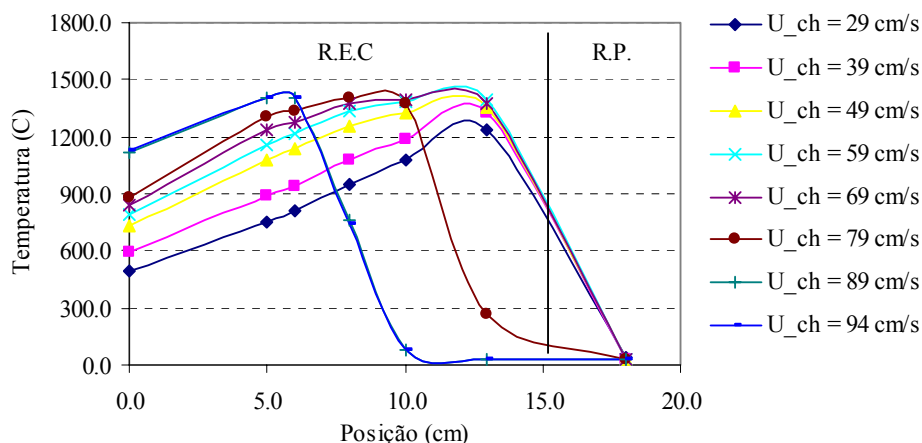


Figura 12. Deslocamento da frente de chama em função da variação da velocidade de chama ( $\phi=0,70$ ).

Na Fig. 13 mostra-se a variação do acréscimo de temperatura na água com a velocidade de chama. Conforme a frente de chama vai se deslocando em direção a superfície, ocorre um ponto de operação em que a variação de temperatura ( $\Delta T$ ) na entrada e saída de água do aquecedor é máxima. Neste ponto, a frente de chama está próxima do centro da região que envolve a camisa de água (REC), distribuindo de forma mais uniforme as temperaturas no seu interior. Acima deste ponto, a temperatura na interface diminui e a energia dissipada na superfície aumenta, resultando em uma menor área de troca de calor com água e na diminuição do  $\Delta T$ .

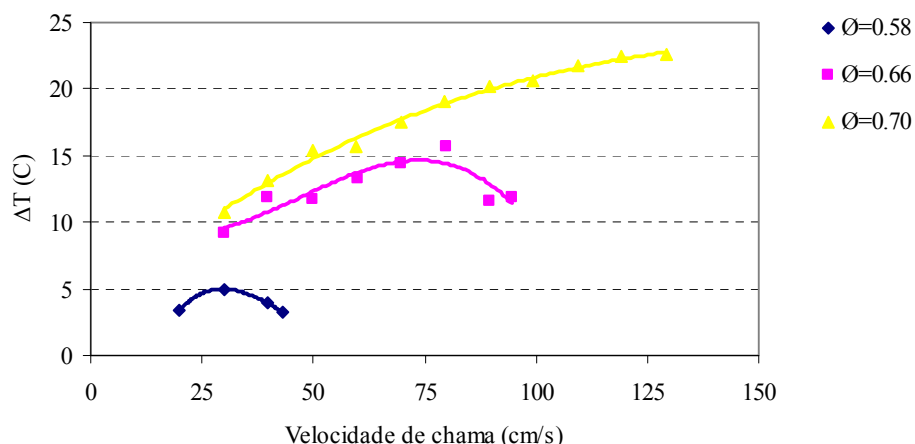


Figura 13. Variação do acréscimo de temperatura da água em função do aumento da velocidade de chama, com vazão de 2.704 lpm de água.

O máximo  $\Delta T$  obtido foi  $22,6^{\circ}\text{C}$  para uma razão de equivalência em torno de 0,70 e velocidade de chama de 129,22 cm/s. Com o aumento da vazão de água para 4,854 lpm e mantendo a mesma condição de teste ( $\phi; u_{ch}$ ) o  $\Delta T$  máximo diminui para  $12,9^{\circ}\text{C}$ .

A energia consumida ( $P_{ot}$ ), aproveitada ( $Q_{ag}$ ) e perdida ( $Q_{gs}$ ) estão demonstradas na Fig. 14, para uma razão de equivalência em torno de 0,58. A energia dissipada por radiação na superfície do aquecedor variou de 0,015 kW a 0,354 kW, de acordo com o ponto de operação, representando no máximo 7% da parcela de energia dissipada por convecção.

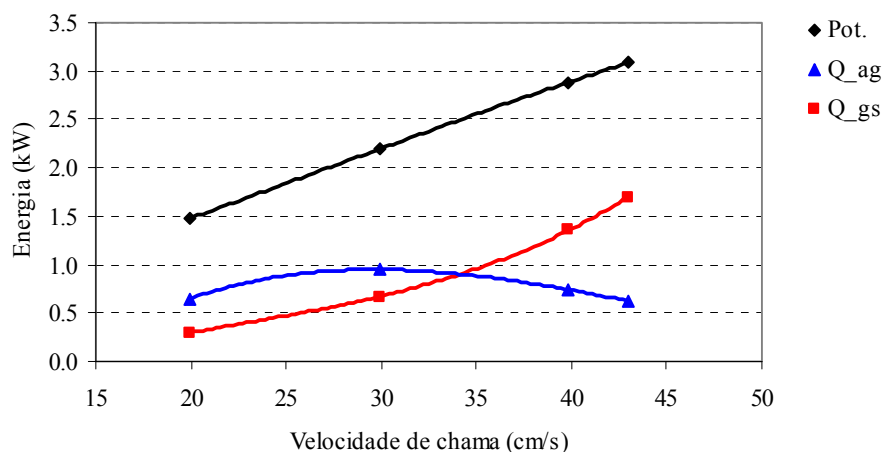


Figura 14. Potência consumida, energia aproveitada (água quente) e dissipada por convecção/radiação nos gases de exaustão em função da velocidade de chama, para uma razão de equivalência de 0,58.

O ponto no gráfico em que as curvas que representam as energias aproveitada e perdida se cruzam, ocorre quando a frente de chama encontra-se acima do centro da REC (camisa de água), reduzindo a temperatura do meio poroso na interface entre a RP/REC e elevando a temperatura na superfície do aquecedor. O mesmo ocorreu para os testes realizados com razões de equivalência em torno de 0,66 e 0,70, apresentados nas Figs. 15 e 16, respectivamente. A faixa de incerteza de medição para a energia térmica gerada (água quente) está na Fig 17.

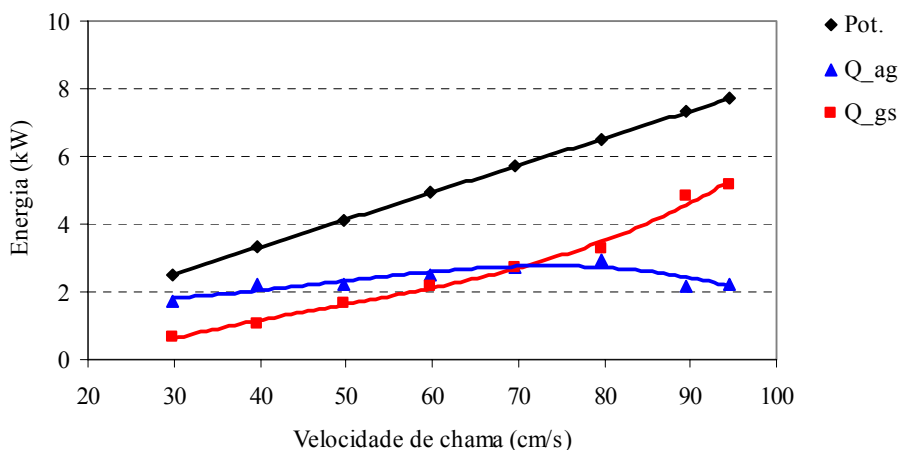


Figura 15. Potência consumida, energia aproveitada (água quente) e dissipada por convecção (gases de exaustão) em função da velocidade de chama, para uma razão de equivalência de 0,66.

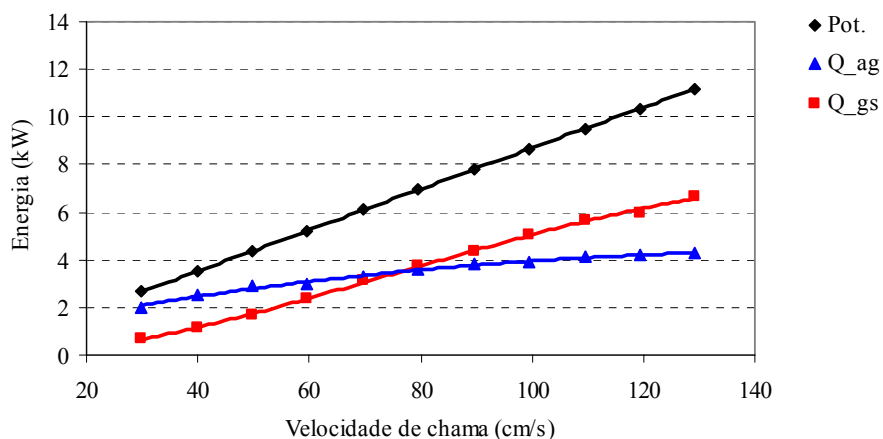


Figura 16. Potência consumida, energia aproveitada (água quente) e dissipada por convecção (gases de exaustão) em função da velocidade de chama, para uma razão de equivalência de 0,70.

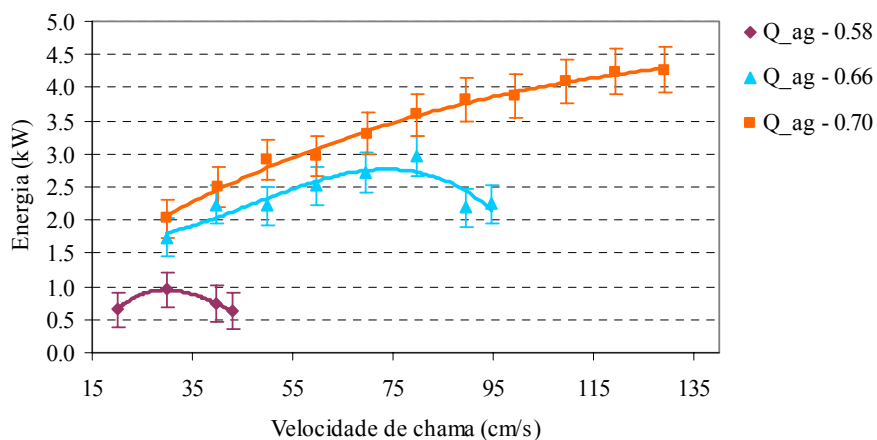


Figura 17. Faixa de incerteza de medição para a energia térmica gerada.

A Fig. 18 apresenta a variação da eficiência com a velocidade de chama para as razões de equivalência em torno de 0,58, 0,66 e 0,70. Observa-se que o aumento da razão de equivalência, gerando um aumento na temperatura do meio poroso, apresenta uma forte influência sobre a eficiência do aquecedor, ou seja, quanto maior a temperatura do meio poroso maior será a eficiência.

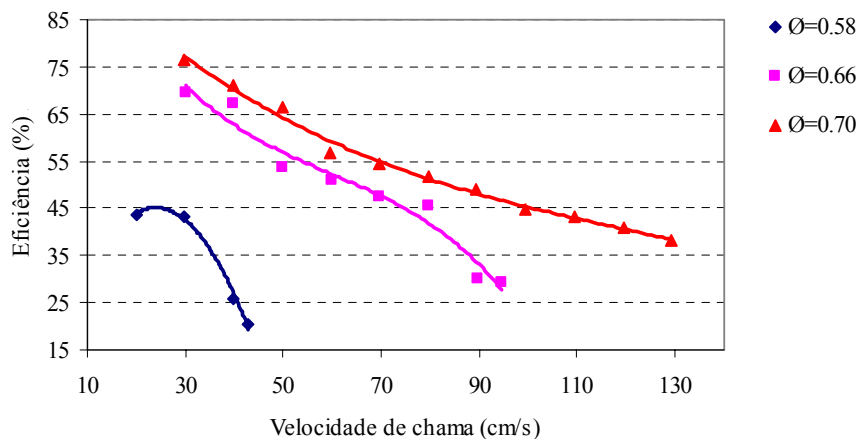


Figura 18. Eficiência do aquecedor em função da velocidade de chama.

Isto ocorre porque o aumento de temperatura no meio poroso aumenta a taxa de transferência de calor para a água, aumentando então a eficiência. Observa-se que na razão de equivalência mais alta a eficiência situa-se entre 35% e 75%.

Observa-se também que o aumento da velocidade causa uma redução da eficiência. Com o aumento da velocidade de chama para uma mesma razão de equivalência, ocorre o deslocamento da frente de chama da interface entre a REC/RP, elevando a temperatura na superfície do aquecedor. Esta parcela de energia dissipada na superfície por convecção e radiação não está sendo aproveitada neste primeiro protótipo, resultando assim na forte queda da eficiência com o aumento da velocidade de chama.

## 5. Conclusão

Os resultados obtidos indicam que as cerâmicas utilizadas podem ser usadas para fabricar um aquecedor de água. A máxima eficiência obtida foi de 76,3% para uma razão de equivalência em torno de 0,70 e velocidade de chama de 29,85 cm/s, gerando um  $\Delta T$  de 10,7°C para uma vazão de água de 2,704 lpm. Com o aumento da velocidade de chama eleva-se a temperatura na superfície do aquecedor, diminuindo a sua eficiência. Considerando que a energia emitida pela superfície através dos gases de exaustão não está sendo aproveitada.

Para uma razão de equivalência de 0,70 e velocidade de chama de 59,69 cm/s, e considerando-se uma serpentina instalada próximo a superfície do aquecedor com eficiência de 50%, seria possível gerar até 4,162 kW de água quente a uma vazão de 3 lpm, obtendo-se um  $\Delta T$  de 20 °C e eficiência do sistema de 79,6%. Este valor ainda é baixo se comparado aos atuais aquecedores de passagem disponíveis no mercado que oferecem eficiências de até 86%. Porém, observa-se que os aquecedores de mercado possuem trocador gás/líquido e que certamente elevaria a eficiência deste equipamento. Ainda, os resultados obtidos com este protótipo podem ser melhorados com o desenvolvimento de um modelo que possua uma relação área de troca/área da seção transversal mais adequada.

## 6. Agradecimentos

Agradecemos aos alunos Márcio Alexandre Laranjeira e Alexandre Guedes de Araújo pela inestimável ajuda na construção do protótipo e montagem da bancada para medição e controle da vazão de água.

## 7. Referências

- Catapan R.C., Pereira F.M., Oliveira A.A.M.J., 2005, "Development of a Radiant Porous Burner with a Combined Thermal and Fluidynamic Mechanism of Flame Stabilization" Proceedings of the 18th Brazilian Congress of Mechanical Engineering, Minas Gerais, Brazil.
- Howell J.R., Hall M.J., Elizy J.L., 1996, "Combustion of hydrocarbon fuels within porous inert media". Prog. Energy Combustion Science, v.22, p.121-145.
- Mößbauer, S., Pickenäcker, O., Pickenäcker K. and Trimis, D., 1999, "Application of the porous burner technology in energy- and heat-engineering", V International Conference on Technologies for a Clean Air Environment, Lisbon.
- Pereira F.M., 2002, "Medição de características térmicas e estudo de mecanismo de estabilização de chama em queimadores porosos radiantes", Dissertação. Departamento de Engenharia Mecânica, Universidade Federal de Santa Catarina.
- Pereira, F.M., Oliveira, A.A.M., 2005, "Analytical study of the excess enthalpy in the combustion within porous media". Proceedings of the 18th Brazilian Congress of Mechanical Engineering, Minas Gerais, Brazil.

## ANALYSIS OF A POROUS BURNER WITH AN INTEGRATED HEAT EXCHANGER WITH THE OBJECTIVE OF DEVELOPMENT OF A WATER HEATER

### Roberto Wolf Francisco Jr.

Federal University of Santa Catarina  
Department of Mechanical Engineering  
Laboratory of Combustion and Thermal System Engineering  
Campus Universitário 88.040-900 Florianópolis, SC, Brazil.  
[robertowfj@gmail.com](mailto:robertowfj@gmail.com)

### Amir Antônio Martins Oliveira Jr.

Federal University of Santa Catarina  
Department of Mechanical Engineering  
Laboratory of Combustion and Thermal System Engineering  
Campus Universitário 88.040-900 Florianópolis, SC, Brazil.  
[amirol@emc.ufsc.br](mailto:amirol@emc.ufsc.br)



***Abstract***

Here, we present an experimental study of the combustion in an inert porous media with significant radial heat loss. The first objective of this work is to evaluate the influence of a radial heat loss on the flame stability of the porous burner. This heat loss by conduction and intramedium radiation across the flame stability region allows the operation at higher power without exceeding the temperature limit of the porous medium. The second objective is to evaluate the performance of the ceramic foams available in Brazil, as a water heater, since they are not originally designed for this application. The experiment consists in a cylindrical porous burner with an integrated annular water heat exchanger. This configuration allows the volumetric heat transfer by conduction and radiation from the solid matrix to the heat exchanger. Because the focus was on the porous burner, no steps were taken to use the remaining thermal energy leaving the porous medium with the hot combustion gases. The fuel equivalence ratio was varied between 0.57 and 0.71. The efficiency varied between 20 and 76%, depending on the operational point, generating thermal energies (hot water) up to 4.2kW. The maximum power reached for a steady flame was 11kW. The fuel used was compressed natural gas.

*Key words: Combustion, porous medium, heat transfer, water heater, natural gas.*

## UMA GENERALIZAÇÃO DA FORMULAÇÃO DE SHVAB-ZEL'DOVICH PARA COMBUSTÃO DE GOTAS

### Luiz E. M. Lima

Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais (INPE), 12630-000, Cachoeira Paulista, São Paulo, Brasil  
luizeduardomlima@yahoo.com.br

### Enizete A. Gonçalves

Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais (INPE), 12630-000, Cachoeira Paulista, São Paulo, Brasil  
enizeteag@yahoo.com.br

### Gabriela S. Moura

Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais (INPE), 12630-000, Cachoeira Paulista, São Paulo, Brasil  
gabriela@lcp.inpe.br

### Fernando F. Fachini

Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais (INPE), 12630-000, Cachoeira Paulista, São Paulo, Brasil  
fachini@lcp.inpe.br

**Resumo.** Este trabalho tem por objetivo descrever o problema da combustão de gota isolada usando uma formulação de Shvab-Zel'dovich estendida. A formulação original de Shvab-Zel'dovich descreve a temperatura e as frações mássicas do combustível e do oxidante por meio das funções excesso de entalpia e fração de mistura, considerando separadamente a parte do domínio da fase gasosa contendo o combustível e a parte contendo o oxigênio. Nos casos estacionários e quase-estacionários, o sistema de duas equações pode ser simplificado com a descrição de uma dessas equações em função da outra; por exemplo, o excesso de entalpia em função da fração de mistura. A contribuição deste trabalho está na generalização da formulação de Shvab-Zel'dovich, podendo considerar a fase gasosa como um único domínio. Com esta abordagem pode se estudar os casos de número de Lewis diferente da unidade. Escolheu-se o problema de combustão de gota esférica porque é relativamente simples: baseia-se no fato de que este processo é controlado principalmente pela fase gasosa na vizinhança da gota. A fase gasosa tem um comportamento quase-estacionário comparado com o comportamento da fase líquida. Através da integração numérica de uma equação diferencial-integral de primeira ordem foi possível obter valores da temperatura (um dos autovalores do problema) e fração mássica de combustível na superfície da gota, e temperatura da chama em função da temperatura ambiente para três combustíveis.

**Palavras chave:** combustão de gotas, formulação estendida de Shvab-Zel'dovich.

### 1. Introdução

A combustão de sprays de combustível líquidos é de considerável importância em motores de foguetes a propelente líquido, motores diesel, turbinas a gás e queimadores a óleo. Um primeiro passo em direção à descrição da combustão de spray é desenvolver o modelo para a queima de uma única gota de combustível (Spalding, 1953; Godsavage, 1953; Goldsmith e Pender, 1954; Kumagi e Isoda, 1957).

A maioria dos estudos de combustão de gotas isoladas considera simetria esférica, coeficientes de transporte e termodinâmico constantes, igualdade nos processos de transporte de calor e massa, e sem velocidade relativa entre a gota e a fase gasosa (Kumagi e Isoda, 1957). O alto valor da razão da densidade do líquido e da densidade do gás justifica a aproximação de regime quase-estacionário do processo na fase gasosa. A teoria clássica da combustão de gotas determina razoavelmente algumas propriedades, por exemplo, a taxa de vaporização e a evolução temporal do raio da gota, porém outras propriedades, por exemplo, a posição e a temperatura da chama, não são representadas corretamente por este modelo (Liñán e Rodrigues, 1985).

Embora, o sistema de equações diferenciais para o modelo quase-estacionário seja simples, quando se considera a reação química, mesmo que seja para um mecanismo de passo único, e a dependência dos coeficientes de transporte e termodinâmico com a temperatura e concentração, o sistema de equações não tem solução analítica. No decorrer dos anos, muitos procedimentos foram sugeridos com o fim de eliminar as não linearidades destes termos.

Considerando a taxa de reação química infinitamente rápida pode-se eliminar o termo de reação química das equações, porque assim garante que não há vazamento dos reagentes pela chama (Williams, 1985). Para os coeficientes de transporte e termodinâmico dependentes linearmente da temperatura também se consegue, por meio da combinação das equações

de conservação, a eliminação da não linearidade e com isso pode-se resolver o problema da gotas (Goldsmith e Pender, 1954). Posteriormente, a reação química e a dependência das propriedades de transporte foram também incluídas no modelo, porém o sistema de equações teve que ser integrado numericamente (Kassoy e Willians, 1968). Em todos estes modelos, o número de Lewis foi mantido constante igual a um e assumidos calores específicos constantes. Mais tarde o modelo quase estacionário foi formulado para o problema de vaporização de gotas com a adição da dependência dos coeficientes de transporte e calor específico com a composição do gás e temperatura (Law, 1975). A não linearidade relativa aos coeficientes de transporte foi eliminada por meio de mudanças de variáveis (Raghuandan e Mukunda, 1977).

Este mesmo problema foi resolvido numericamente considerando que a combustão gerava monóxido de carbono por meio da reação  $CO_2 + H_2 \rightarrow CO + H_2O$ . Expressões detalhadas para os coeficientes de transporte e termodinâmico foram adotadas (Puri e Libby, 1991). Este modelo mantém o compromisso de simplicidade e ao mesmo tempo inclui o fato da combustão ser incompleta.

Mais recentemente, combinaram-se os procedimentos de Shvab-Zel'dovich e de Goldsmith e Penner (Goldsmith e Pender, 1954) para eliminar tanto a não linearidade da reação química bem como a dos coeficientes de transporte e permitir que o número de Lewis tivesse um valor qualquer (Fachini, 1999). O modelo quasi-estacionário ainda foi estendido com a inclusão do termo de transporte de calor devido ao transporte de massa. A não linearidade correspondente a este termo foi eliminada com uma combinação apropriada das equações de conservação de energia e das espécies (Imaoka e Sirignano, 2005). Entretanto, para que este procedimento fosse realizado houve-se a necessidade de impor a condição de número de Lewis igual a um.

O presente trabalho apresenta um procedimento para resolver o problema da combustão de gotas isoladas sem a necessidade: 1) da separação do domínio entre a região que contém combustível da região que contém oxidante e 2) de impor a condição de número de Lewis igual a um.

## 2. Modelo

Foram adotadas as seguintes considerações para a formulação do modelo numérico:

- Gota esférica com raio  $a(t)$  no instante  $t$ , em  $t = 0$ ,  $a(0) = a_0$ ;
- Densidade,  $\rho_l$ , calor específico,  $c_l$ , e condutividade térmica,  $k_l$ , da fase líquida constantes;
- Densidade,  $\rho_\infty$ , calor específico à pressão constante,  $c_p$ , condutividade térmica,  $k_\infty$ , temperatura do gás,  $T_\infty$ , e fração mássica do oxidante,  $Y_{O_\infty}$ , no ambiente, são constantes.

As variáveis adimensionais utilizadas nesta análise são definidas como

$\theta = T/T_b$ ,  $\varrho = \rho/\rho_\infty$ ,  $y_F = Y_F$ ,  $y_O = Y_O/Y_{O_\infty}$ ,  $v = Va_0/\alpha_\infty$ ,  $x = r/a_0$  e  $\tau = t/t_c$  sendo  $t_c$  o tempo característico da queima da gota,  $t_c = a_0^2/\alpha_\infty\epsilon$ , a difusividade térmica  $\alpha_\infty = k_\infty/(c_p\rho_\infty)$ , e  $\epsilon = \rho_\infty/\rho_l \ll 1$ .  $T_b$  é a temperatura de ebulição do combustível. Notar que o subíndice  $\infty$  representa as condições no ambiente.

Para a densidade líquida constante,  $\rho_l$ , a equação de conservação da massa adimensional dentro da gota é dada por:

$$da^3/d\tau = -3\lambda(\tau), \quad (1)$$

sendo  $\lambda = (\dot{m}c_p)/(4\pi a_0 k_\infty)$ ,  $a = a/a_0$  (Fachini, 1999).

O problema térmico dentro da gota pode ser descrito facilmente assumindo também que o processo de condução é o único processo de transferência de calor ou esse processo é tão rápido que a temperatura é considerada uniforme (Fachini, 1999).

O modelo consiste de uma gota queimando em ambiente estacionário com simetria esférica e a pressão constante. Os coeficientes de transporte dos gases nas condições ambientes ( $k_{g_\infty}$  e  $D_{i_\infty}$  [ $i = F, O$ ]) são considerados como constantes. Também, adotou-se o mesmo mecanismo cinético encontrado nos problema clássicos de chamas difusivas: o mecanismo de Burke-Schumann com taxa de reação infinita. Além dessas considerações, a dependência dos coeficientes de difusão,  $D_F$  e  $D_O$ , e da condutividade térmica,  $k_g$ , na temperatura é da forma de potência,  $\theta^n$ , sendo o valor representado por  $n$  igual a 0,5 (Fachini, 1999). Para completar o modelo, tomou-se a condição de equilíbrio entre o vapor e o líquido na interface líquido/gás. Com isso, fez-se valer a expressão de Clausius-Clapeyron:

$$y_{F_s} = \exp[\gamma(1 - 1/\theta_s)], \quad (2)$$

sendo  $y_{F_s}$  a fração mássica de combustível na superfície da gota,  $\theta_s$  é a temperatura na superfície da gota,  $\gamma = L/(R_g T_b)$ ,  $L$  é o calor latente de vaporização e  $R_g$  é a constante do gás; o subíndice  $s$  indica a propriedade na superfície da gota. Ainda, considerou-se o peso molecular do combustível igual ao da mistura do gás no ambiente. As forças de corpo, a radiação e a dissipação viscosa não são incluídas no modelo.

As equações de conservação adimensionalizadas para a fase gasosa,  $x > a(\tau)$ , podem ser escritas como:

$$x^2 \varrho v = \lambda(\tau) \quad (3)$$

$$L_i \lambda x^2 \frac{\partial y_i}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left( x^2 \theta^n \frac{\partial y_i}{\partial x} \right) - s_i L_F x^2 w, \quad [i = O, F] \quad (4)$$

$$\lambda x^2 \frac{\partial \theta}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left( x^2 \theta^n \frac{\partial \theta}{\partial x} \right) + Q L_F x^2 w, \quad (5)$$

sendo  $s_O = (\nu L_O)/(L_F Y_{O\infty})$  e  $s_F = 1$ ;  $w = (a_0^2 \dot{w})/(\rho_\infty \alpha_\infty)$  e  $Q = q/(c_p T_b L_F)$  O valor de  $\nu$  representa a massa de oxigênio necessário para queimar estequiometricamente uma massa unitária de combustível.

Para fechar o sistema de equações de conservação é empregado a equação de estado adimensionalizada do gás, escrita como:

$$1 = \rho \theta, \quad x > a. \quad (6)$$

Utilizaram-se as seguintes condições de contorno na integração das equações (4) e (5), em  $x = a$ ,

$$\left( x^2 \theta^n \frac{\partial y_F}{\partial x} \right) = -\lambda L_F (1 - y_{Fs}), \quad (7)$$

$$\left( x^2 \theta^n \frac{\partial \theta}{\partial x} \right) = \lambda L, \quad (8)$$

$$\text{em } x = x_f, \quad \theta - \theta_f = y_F = y_O = 0, \quad (9)$$

e

$$\text{em } x \rightarrow \infty, \quad \theta - \theta_\infty = y_F = y_{O\infty} - 1 = 0, \quad (10)$$

sendo  $L$  o calor de vaporização adimensionalizado e é obtido pela solução do problema térmico da fase líquida.

### 3. Solução

É assumido que a reação química ocorre no limite de Burke-Schumann, portanto o tempo característico da reação é infinitamente menor que qualquer tempo característico mecânico. O tempo de residência dos reagentes é infinitamente pequeno na zona de reação e a chama tem uma zona de reação infinitamente fina.

O problema de combustão de gota é descrito usando uma formulação de Shvab-Zel'dovich generalizada. Esta nova formulação não faz distinção da região que contém o combustível daquela que contém o oxigênio.

Combinando as equações (4) e (5) pode-se encontrar:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left( \int_{Z_s}^Z L e(Z) dZ - \frac{x^2 \theta^n}{\lambda} \frac{\partial Z}{\partial x} \right) = 0, \quad (11)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \left( H + \int_{Z_s}^Z N(Z) dZ - \frac{x^2 \theta^n}{\lambda} \frac{\partial H}{\partial x} \right) = 0, \quad (12)$$

sendo

$$H = (S + 1)\theta/Q + y_O + y_F, \quad Z = S y_F - y_O + 1,$$

$$L e(Z) = \begin{cases} L_F, & Z > 1 \\ L_O, & Z < 1 \end{cases}, \quad N(Z) = \begin{cases} (L_F - 1)/S, & Z > 1 \\ (1 - L_O), & Z < 1 \end{cases},$$

$$S = (\nu L_O)/(L_F Y_{O\infty}).$$

As condições de contorno para as equações (11) e (12) são:

$$Z_s = S y_{Fs} + 1, \quad (13)$$

$$H_s = (S + 1)\theta_s/Q + y_{Fs}, \quad (14)$$

$$\left( x^2 \theta^n \frac{\partial Z}{\partial x} \right)_{x=a} = -L_F S (1 - y_{Fs}), \quad (15)$$

$$\left( x^2 \theta^n \frac{\partial H}{\partial x} \right)_{x=a} = \frac{(S + 1)L}{Q} - L_F (1 - y_{Fs}), \quad (16)$$

$$Z(x_f) = 1; \quad H(x_f) = (S + 1)\theta_f/Q, \quad (17)$$

$$Z(x \rightarrow \infty) = 0; \quad H(x \rightarrow \infty) = (S + 1)T_\infty/(T_b/Q) + 1, \quad (18)$$

sendo o subscrito  $f$  a condição na chama. As funções  $H$  e  $Z$  e as primeiras derivadas de cada são contínuas.

Da integração das equações (11) e (12) e combinando-as, na região  $a \leq x \leq \infty$ , obtém-se:

$$\frac{\partial H}{\partial Z} = \frac{H - H_s + \bar{H} + \int_{Z_s}^Z N dZ}{\int_{Z_s}^Z L e dZ - \bar{Z}}, \quad (19)$$

sendo,  $\bar{H} = (S + 1)L/Q + L_F(1 - y_{Fs})$  e  $\bar{Z} = -SL_F(1 - y_{Fs})$ .

A equação (19) junto com as condições de contorno foi resolvida numericamente. O código numérico desenvolvido no trabalho foi baseado no método de Runge-Kutta. O método de Runge-Kutta baseia-se numa idéia semelhante à do método de Euler. O método de Euler de primeira ordem, que se obtém a partir da expansão em série de Taylor da função, ignorando os termos em função das derivadas de ordem superior ou igual a dois. Das fórmulas mais populares, o método de Runge-Kutta de quarta ordem é o que fornece melhores resultados. Embora não seja o mais fácil de implementar, pois exige quatro cálculos da função em cada passo, tem duas propriedades importantes. Tem erro de truncamento local  $O(h^5)$  e é uma fórmula de passo único.

#### 4. Resultados

Os resultados obtidos neste trabalho para três diferentes combustíveis (n-heptano, metanol e etanol) podem ser observados nas Figuras a seguir. Na Figura 1 tem-se a temperatura da chama, na Figura 2 tem-se a temperatura na superfície da gota, e na Figura 3 podemos observar o comportamento da fração mássica de combustível na superfície da gota, sendo que todos esses parâmetros foram relacionados com a temperatura ambiente na qual a gota está sendo queimada.

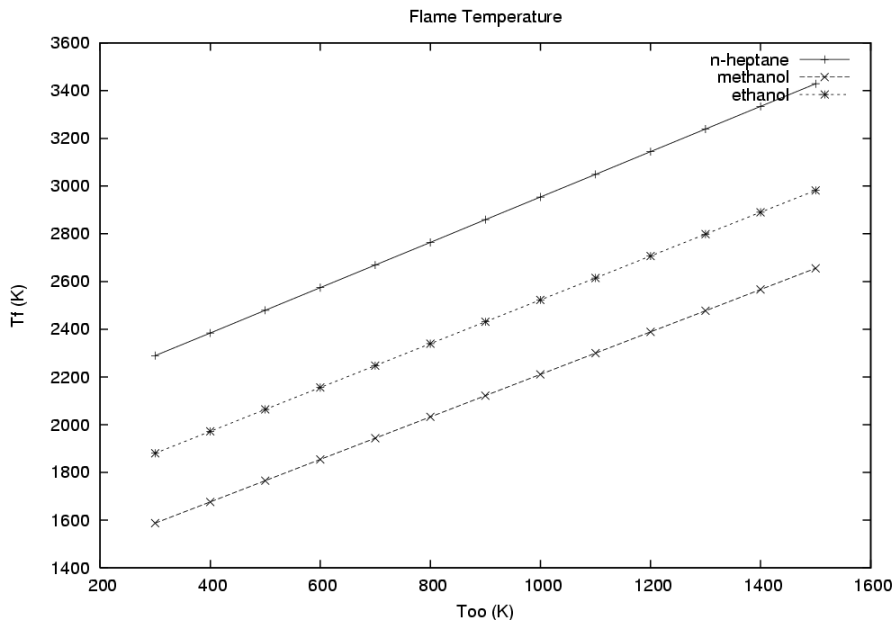


Figura 1: Temperatura da chama em função da temperatura ambiente para n-heptano, metanol e etanol.

Comparando os nossos resultados com os apresentados na literatura (Fachini, 1999) para a temperatura de chama,  $T_f = 2631, 2363, 2375K$ , respectivamente para n-heptano, metanol e etanol, na temperatura ambiente de 298 K, podemos observar que para os três casos há uma considerável discrepância nos valores. Isso pode ter ocorrido pelas diferenças nas propriedades termodinâmicas adotadas para a mistura combustível e produtos da combustão. Podemos observar que para todos os casos analisados a temperatura da chama aumenta linearmente com a temperatura ambiente, e que a inclinação dessas retas é praticamente igual nos três casos.

As duas outras propriedades de combustão de gotas, temperatura e fração mássica na superfície da gota, dependem do calor latente  $L$  do combustível. Quanto maior for o valor de  $L$  mais próximo a temperatura na superfície da gota está do valor da temperatura de ebulição, conseqüentemente  $y_{Fs} \sim 1$ . Então a variação na temperatura do ambiente na combustão

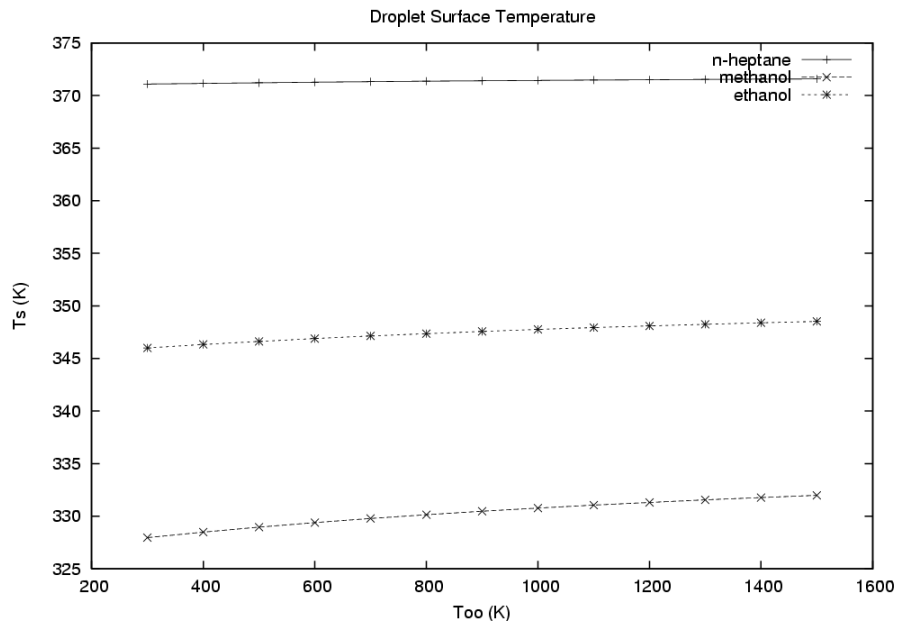


Figura 2: Temperatura na superfície da gota em função da temperatura ambiente para n-heptano, metanol e etanol.

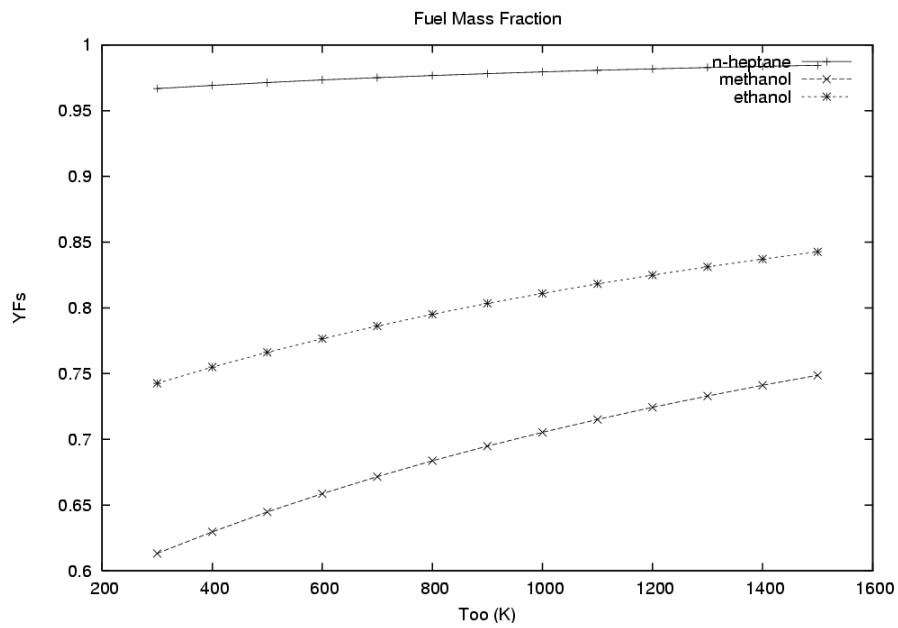


Figura 3: Fração mássica de combustível na superfície da gota em função da temperatura ambiente para n-heptano, metanol e etanol.

de líquidos com altos valores de  $L$  não modifica significativamente a temperatura e fração mássica na superfície da gota. Como observamos na figuras 2 e 3 para o caso do n-heptano. Entretanto, para os outros dois casos, etanol e metanol, o valor do calor latente não é tão alto por isso a vaporização ocorre nas condições  $|\theta_s - 1| = O(1)$  e  $|y_{Fs} - 1| = O(1)$ . Para estes combustíveis, a mudança na temperatura do ambiente resulta em variações expressivas na temperatura e fração mássica na superfície da gota, por causa do aumento do fluxo de calor para a gota.

## 5. Conclusão

O presente trabalho apresenta um modelo para a determinação rápida das temperaturas da superfície da gota e da chama, assim como da fração mássica de combustível na superfície da gota. O baixo custo computacional para o cálculo destas propriedades é uma motivação para o emprego deste modelo em análise de combustão de spray. Para os futuros estudos aplicar-se-á um calor efetivo de combustão,  $Q_e = k_f Q$ , para corrigir a super-estimativa da temperatura da chama e aproximar os valores com os já encontrados por via experimental.

## 6. Referências

- Fachini, F. F., 1999, An analytical solution for the quasi-steady droplet combustion, “Combustion and Flame”, Vol. 116, pp. 302–306.
- Godsave, G., 1953, Studies of the Combustion of Drops in a Fuel Spray - The Burning of Single Droplets of Fuel, “Proc. Combust. Instit.”, Vol. 4, pp. 818–830.
- Goldsmith, M. and Pender, S. S., 1954, On the burning of single drops of fuel in an oxidizing atmosphere, “Jet Propulsion”, Vol. 24, pp. 245–251.
- Imaoka, R. T. and Sirignano, W. A., 2005, A Generalized Analysis for Liquid-Fuel Vaporization and Burnign, “International Journal of Heat and Mass Transfer”, Vol. 48, pp. 4342–4353.
- Kassoy, D. R. and Williams, F. A., 1968, Variable property effects on liquid droplet combustion, “AIAA Journal”, Vol. 6, pp. 1961–1965.
- Kumagi, S. and Isoda, H., 1957, Combustion of fuel droplets in a falling chamber, “Proceedings of Combustion Institute”, Vol. 6, pp. 726–731, New York, USA.
- Law, C. K., 1975, Quasy-Steady Droplet Vaporization Theory with Property Variations, “Physics of Fluids”, Vol. 18, pp. 1961–1965.
- Liñán, A. and Rodrigues, M., 1985, Droplet vaporizacion, ignicion y combustión de gotas, Jornadas Sobre Combustion en Motores Termicos.
- Puri, I. K. and Libby, P. A., 1991, The Influence of Transport-Properties on Droplet Burning, “Combustion Science and Technology”, Vol. 76, pp. 67–80.
- Raghunandan, B. N. and Mukunda, H. S., 1977, Problem of Liquid Droplet Combustion - Re-examination, “Combustion and Flame”, Vol. 30, pp. 71–84.
- Spalding, D., 1953, The Combustion of Liquid Fuels, “Proc. Combust. Instit.”, Vol. 4, pp. 847–864.
- Williams, F. A., 1985, “Combustion theory”, Addison-Wesley, California, USA, Combustion Science and Engineering Series.

## A GENERALIZATION OF THE SHVAB-ZEL'DOVICH FORMULATION FOR DROPLETS COMBUSTION

### Luiz E. M. Lima

National Space Research Institute, 12630-000, Cachoeira Paulista, São Paulo, Brasil.

luizeduardomlima@yahoo.com.br

### Enizete A. Gonçalves

National Space Research Institute, 12630-000, Cachoeira Paulista, São Paulo, Brasil.

enizeteag@yahoo.com.br

### Gabriela S. Moura

National Space Research Institute, 12630-000, Cachoeira Paulista, São Paulo, Brasil.

gabriela@lcp.inpe.br

### Fernando F. Fachini

National Space Research Institute, 12630-000, Cachoeira Paulista, São Paulo, Brasil.

fachini@lcp.inpe.br

**Abstract.** *The aim of this work is the description of the droplet combustion problem using (via) an extended Shvab-Zel'dovich formulation. The previous Shvab-Zel'dovich formulation describes the temperature and the oxygen and fuel mass fractions by determining the enthalpy excess and the mixture fraction functions in the fuel region and in the oxygen region. In the steady and quasi-steady states, the equations for these two functions can be simplified with the description of one function in terms of the other function; for example, the enthalpy excess as a function of the mixture fraction. The contribution of this work is on generalization of the Shvab-Zel'dovich formulation: the two domains of the gaseous phase are treated as one. The spherical droplet combustion problem was chosen to be described by the generalized formulation. The droplet combustion description is relatively simple because it is controlled by quasi-steady state processes in the gas phase near the droplet surface. The numerical integration of the first order differential equation for the excess enthalpy in terms of the mixture fraction provides the droplet surface temperature, that is the eigenvalue of the problem, and as part of the solution the flame temperature is also determined. Once knowing the droplet surface temperature, the fuel mass fraction at the surface is specified via Clayperon relation.*

**Keywords** *droplets combustion, Shvab-Zel'dovich extended formulation.*



## ESTUDO COMPARATIVO DA DISTRIBUIÇÃO DE TEMPERATURA DO GLP E DO ETANOL EM UMA CÂMARA DE COMBUSTÃO CILÍNDRICA

**Paulo Lenço**

Universidade Estadual de Campinas (Unicamp) – R. Gleide Knauer Penedo s/n° Apto E-132, Campinas, SP  
lenco@actualis.com.br

**Waldir A. Bizzo**

Universidade Estadual de Campinas (Unicamp) – R. Mendeliev s/n° Cidade Universitária, Campinas, SP  
bizzo@fem.unicamp.br

**Resumo.** A formação de gases poluentes tais como o CO, CO<sub>2</sub>, e os NO<sub>x</sub>, tem causado grande preocupação e contribuído para fenômenos como o aquecimento global ou formação de ozônio atmosférico. Com a crescente emissão desses gases e de compostos nocivos, as alternativas viáveis são as escolhas de combustíveis renováveis e a adoção de mecanismos minimizantes da formação. A formação de óxidos de nitrogênio, através do mecanismo de Zeldovich, é fornecida por altas temperaturas locais e disponibilidade de oxigênio. Estes fatores, por sua vez, sofrem influência da fluidodinâmica da combustão e a distribuição do tempo de residência. Neste trabalho foi estudada a distribuição de temperatura em uma câmara de combustão cilíndrica isolada termicamente, queimando GLP (gás liquefeito de petróleo) e etanol vaporizado. Foram utilizados o mesmo tempo de residência, a mesma potência específica e temperaturas de saída dos gases de 1000°C e 1175°C. Os dados indicam a distribuição de temperatura e permitiram que se fizesse um comparativo entre os dois combustíveis. Observou-se que nas mesmas condições existem variações nos perfis de temperatura entre os dois combustíveis.

*Palavras-Chave:* álcool, GLP, Swirl Number, combustão, temperatura.

### 1. Introdução

O consumo de combustível fóssil trouxe para a discussão, nas últimas duas décadas do século XX, os problemas ambientais decorrentes destes dois séculos de desenvolvimento industrial. Da máquina a vapor até o uso popular dos computadores, vem trazendo o aprimoramento dos meios de produção, a diversificação dos produtos de consumo e conseqüentemente, um consumo energético cada vez maior causando as agressões ambientais. As atividades industriais do homem moderno e seu volume de bens consumidos geram uma demanda energética cada vez maior, pois é necessário o acesso a produtos e serviços por um número cada vez maior da população, bem como a ampliação destes benefícios aos que já os conquistaram. Isto traz dificuldades crescentes para a demanda energética, e as buscas por alternativas imediatas trazem um aumento das emissões de gases causadores do aquecimento global. Sendo assim eleva-se o grau de importância do estudo e do entendimento dos mecanismos de formação de poluentes e de uma alternativa aos atuais combustíveis. Entre os diversos poluentes atmosféricos, os óxidos de nitrogênio têm despertado interesse e preocupação, devido a sua ação precursora da formação do ozônio troposférico.

### 2. Número de rotação

BEÉR e CHIGIER (1972) descrevem estudos de escoamento com rotação a fim de melhorar a estabilidade de chama e conseqüentemente a eficiência de queima. A instabilidade de chama é responsável pela perda de calor na região de combustão devido à dispersão da chama. Numa chama dispersa a temperatura cai favorecendo a formação de CO devido à queima incompleta do combustível.

A importância do estudo e o entendimento da distribuição de temperatura na queima de combustível se fazem presente para que se elimine ou ao menos se minimize várias emissões, principalmente os óxidos de nitrogênio.

Em um escoamento com rotação, ocorre a recirculação de gases próximos ao queimador, dando origem à região denominada Zona Central de Recirculação (ZCR) e BEÉR e CHIGIER (1972) propuseram o chamado número de rotação (Swirl Number), trata-se de um número adimensional, com a finalidade de avaliar a intensidade dos jatos com rotação como mostra a Eq. (1).

$$S = \frac{G\phi}{Gx.R} \quad \text{Eq.(1)}$$

sendo

$$G_{\phi} = \int_0^R (W.r).\rho.U.2\pi.r.dr \quad \text{Eq. (2)}$$

e

$$G_x = \int_0^R U.P.2\pi.r.dr + \int_0^R U.P.2\pi.dr \quad \text{Eq. (3)}$$

onde:

$G_{\phi}$  – quantidade de movimento tangencial;

$G_x$  – quantidade de movimento axial;

$R$  – raio da saída do gerador de rotação;

$U$  – componente axial da velocidade dos gases;

$W$  – componente tangencial da velocidade dos gases;

$r$  – posição radial;

$P$  – pressão estática;

$\rho$  – densidade dos gases.

BELTAGUI E MACCALLUM (1976), estudando escoamentos com rotação em fornalhas experimentais, concluíram que as dimensões da Zona Central de Recirculação (ZCR) dependiam mais do diâmetro da fornalha do que do diâmetro do gerador de rotação. Propuseram a definição de um novo número de rotação, omitindo o termo da pressão estática e substituindo por  $R$ , o raio do gerador de rotação, por  $D$ , o diâmetro da fornalha. O novo número de rotação  $S'$  permite estabelecer similaridade de escoamentos com maior independência da relação de diâmetro da fornalha e do queimador, e da condição se o escoamento é isotérmico.

KENBAR (1995) estudou a aerodinâmica e a temperatura de combustão para uma câmara com injeção periférica de combustível, e construiu um perfil de velocidade axial experimental e também construiu perfis de temperaturas como na Fig. 1 usando como combustível o gás natural. Neste perfil observa-se uma região de intensa mistura promovida pelo refluxo próximo ao queimador e uma região de fluxo desenvolvido onde o perfil de velocidade é praticamente constante. Isso revela um comportamento semelhante a um reator bem misturado no início da câmara e de reator de fluxo pistonado na parte final.

Este trabalho estudou a distribuição de temperatura dos gases no interior de uma câmara de combustão cilíndrica horizontal, em dois números de rotação, com a finalidade de comparar o comportamento da distribuição de temperatura na combustão do GLP e do etanol vaporizado.

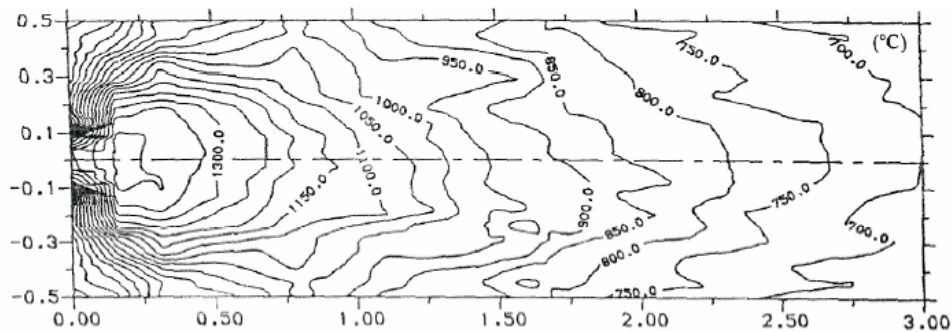


Figura 1. Perfil de temperatura de uma câmara de combustão cilíndrica para um número de rotação de 0,90 (KENBAR, 1995.).

### 3. Fluxograma do Processo

A bancada experimental é composta por uma câmara de combustão cilíndrica horizontal com um queimador equipado com dispositivo de regulação do número de rotação. O queimador pode ser alimentado com gás liquefeito de petróleo (GLP) ou com vapor de combustível líquido, neste caso, etanol vaporizado, produzido num vaporizador. Os produtos de combustão saem da fornalha por um duto de exaustão, onde são resfriados rapidamente por um lavador e então succionados por um exaustor para a

chaminé de descarga de gases que os lança para fora do laboratório. O fluxograma da câmara com a linha de combustível (GLP) está apresentado na Fig. 2.

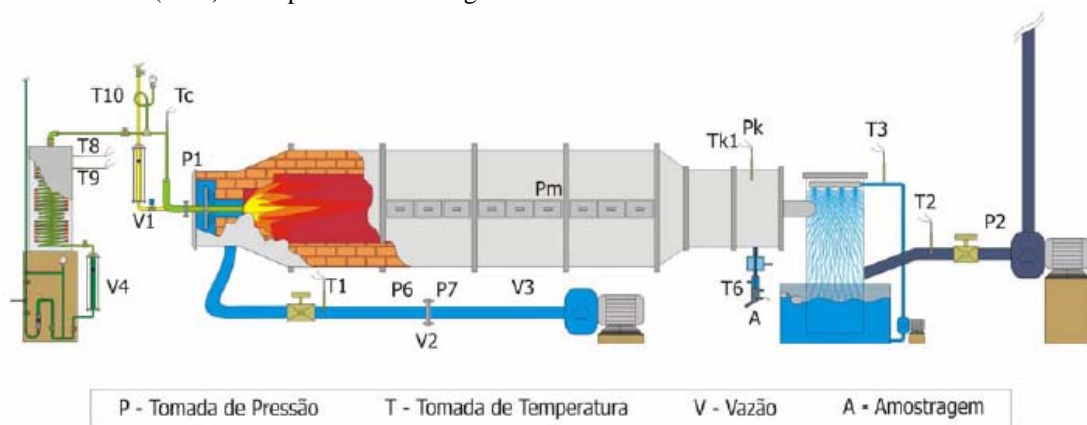


Figura 2. Fluxograma do processo e instrumentação da bancada experimental.

A câmara de combustão tem formato cilíndrico com diâmetro interno de 470 mm e é construída em módulos de 600 mm, num total de 3 módulos, totalizando um comprimento de 1800 mm. As dimensões da câmara foram adotadas de maneira que as sondas de medição de temperatura e concentração de gases produzissem pouca interferência no escoamento e que fosse possível reproduzir condições típicas encontradas em câmaras de combustão.

O corpo da fornalha é construído em chapa de aço carbono com revestimento interno de manta refratária com espessura de 150 mm. Na lateral da fornalha, em cada módulo, foi construída uma abertura retangular com dimensões 50 x 50 mm que permite a inserção de sondas para medição de temperatura e composição dos gases de combustão em 90% do comprimento da fornalha. O fechamento destas aberturas é feito com tijolo isolante de modo a permitir a introdução das sondas com a retirada de apenas um tijolo e fechada completamente por isolante térmico.

A câmara de combustão cilíndrica, utilizada neste trabalho apresenta um mecanismo de roscas paralelas que promove o movimento do bloco móvel do queimador alterando o número de rotação. As rotações escolhidas foram 0,684 e 1,315.

Na fig. 3 é mostrado o esquema do queimador. O número de rotação variável é possível pois o queimador é construído com blocos direcionais, em aço inoxidável, conforme BEÉR E CHIGIER (1972). O número de rotação da fornalha é regulado através da variação da posição angular do bloco móvel, dosando a parcela de ar de combustão na direção radial e outra parcela de ar na direção angular, que possui uma componente de velocidade tangencial.

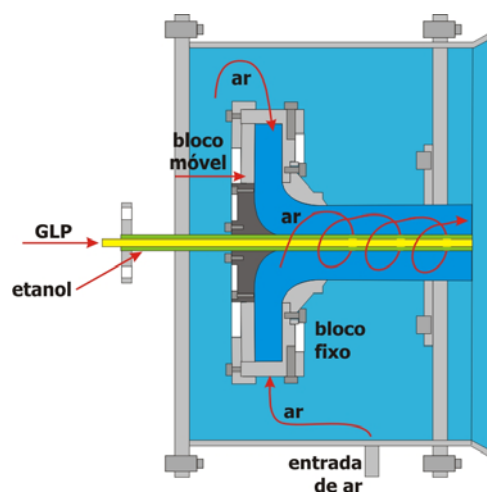


Figura 3. Queimador com gerador de rotação do ar de combustão.

O vaporizador de combustíveis líquidos é composto de uma serpentina de aço inoxidável com nove metros (9 m) de comprimento e diâmetro interno de nove milímetros (9 mm), aquecido externamente por cinco resistências elétricas.

A medida de temperatura dos gases de combustão no interior da fornalha foi feita com uma sonda de sucção de gases, onde um sensor de temperatura é parcialmente protegido da radiação no interior da fornalha por uma dupla couraça de tubo refratário. O pirômetro de sucção foi projetado e construído seguindo recomendações de projeto e operação de CHEDAILLE e BRAUD (1972). A fim de interferir o mínimo no escoamento dos gases de combustão, foi selecionado o menor diâmetro comercial possível, considerando as dimensões dos tubos de alumina e dos tubos capilares para suporte do termopar disponíveis comercialmente. O diâmetro externo da sonda na ponta de cerâmica é 15 mm. A Fig. 4 apresenta um desenho esquemático do pirômetro.

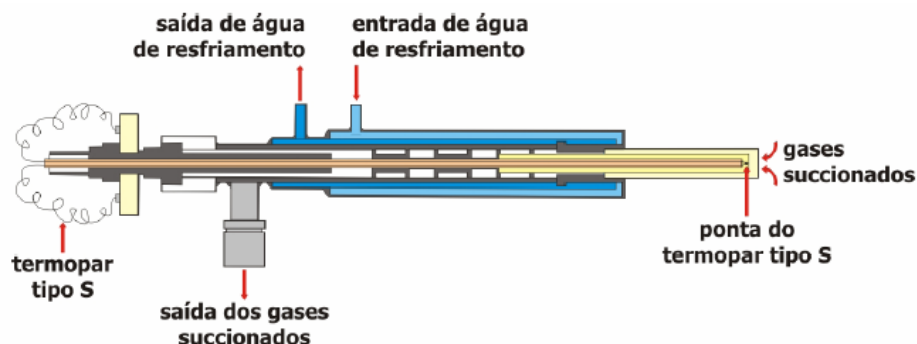


Figura 4. Pirômetro de sucção.

A aquisição de dados foi feita através de um termopar tipo “S” conectado, por um cabo de extensão blindada eletromagneticamente, a uma placa de aquisição de dados da marca Linx, devidamente aterrada, com taxa de aquisição de 2500 pontos por segundo, e uma taxa de registro de 8,8 pontos por segundo, que foi estabelecida através de um programa desenvolvido para este fim, em linguagem C.

A potência nominal da câmara de combustão, temperatura dos gases de saída e o grau de mistura entre ar e os combustíveis (rotação) foram os três principais parâmetros da combustão, que foram considerados para o planejamento dos experimentos. Os efeitos da temperatura foram estudados realizando-se os testes em duas condições de temperatura dos gases de saída da câmara: 1000 e 1175 °C. As temperaturas foram escolhidas usando-se de critérios tais como: garantia de combustão completa; variação suficiente que permitisse notar a influência da temperatura; preservação da bancada experimental e da instrumentação e segurança no processo de operação e amostragem. A Tab. 1 apresenta os principais parâmetros da operação dos testes.

Tabela 1. Principais parâmetros e variáveis de operação.

Parâmetro	Valor Assumido
Temperatura dos gases de exaustão	1000 e 1175 °C
Pressão da câmara	Pressão manométrica Nula
Pressão no sistema de amostragem	~ 100 mmCA
Número de rotação (S')	0,684 e 1,315

O combustível utilizado foi o etanol comercial, por se tratar de um combustível renovável de fácil obtenção e por não conter nitrogênio na sua composição diminui a formação do óxido de nitrogênio. O etanol hidratado tem sua composição  $C_2H_5OH$ , que é um derivado dos hidrocarbonetos, diferindo deles por possuir na sua estrutura molecular o grupo OH altamente polar. Suas moléculas encontram-se ligadas entre si pelos mesmos tipos de forças intermoleculares que agregam as moléculas de água. O GLP comercial é composto basicamente por propano ( $C_3H_8$ ) e butano ( $C_4H_{10}$ ), com pequenas frações de etano, propeno e buteno. Desta forma considerou-se que sua composição em massa é 50% propano e 50% butano conforme especificação do fornecedor do combustível (Petrobras). O poder calorífico superior (PCS) e o poder calorífico inferior (PCI) dos combustíveis são encontrados na Tab. 2 .

Tabela 2. Propriedades do GLP e do Etanol.

Propriedade	GLP	Etanol 96°GL
PCS	45.932 kJ /kg	35.197 kJ/kg
PCI	42.782 kJ/kg	24.919 kJ/kg

Na Tab.3 é mostrado as condições de operação da câmara de combustão tanto para o GLP quanto para o etanol.

Tabela 3. Condições médias de operação da câmara.

Temperatura	1000 °C	1175 °C
Relação (Ar/Comb.) <sub>massa</sub> GLP	26,6	19,3
Relação (Ar/Comb.) <sub>massa</sub> ETANOL	17,2	11,8
Tempo de residência	2 s	2 s
Massa média do GLP	7,416 Kg/h	8,24 Kg/h
Massa média do ETANOL	8,197 Kg/h	11,39 kg/h
Potência específica média do GLP	240 kWh/m <sup>3</sup>	280 kWh/m <sup>3</sup>
Potência específica média do ETANOL	210 kWh/m <sup>3</sup>	290 kWh/m <sup>3</sup>

A Fig. 5 traz todas as posições dos pontos que foram estudados neste trabalho, com destaque aos pontos identificando  $-x/D$  0,36, 2,72 e  $y/D$  0,04, onde se fez um estudo mais detalhado da variação de temperatura.

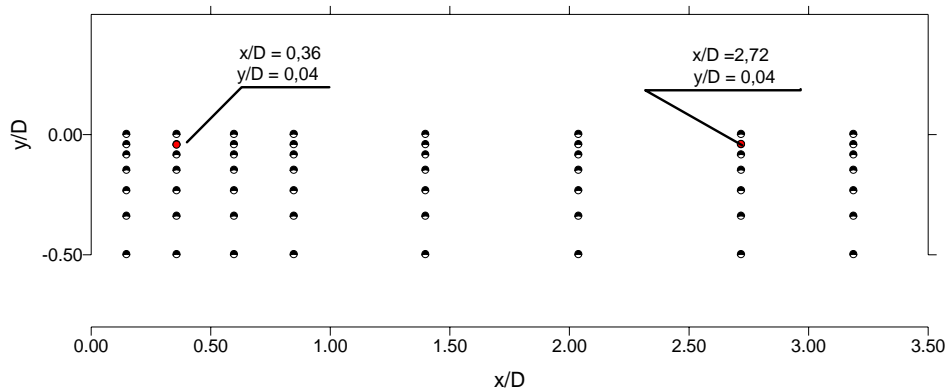


Figura 5. Disposição dos pontos estudados.

Para determinação dos perfis de temperatura foi considerada a simetria com relação ao eixo central da câmara de combustão. Desta forma foram realizadas as medidas somente em metade da câmara de combustão e foram considerados os mesmos valores para os pontos diametralmente opostos com a finalidade de uma melhor visualização da apresentação.

As medições na câmara de combustão cilíndrica foram realizadas em 56 pontos distintos para cada temperatura, em dois números de rotação. Esses pontos são os mostrados na Fig. 5.

#### 4. Análise dos resultados dos perfis de temperatura

A recirculação de gases no interior da câmara, somada aos fenômenos de efeito de parede e distância do queimador, influenciam o perfil de temperatura no interior da câmara de combustão. As Fig. 6 a 9 apresentam a variação de temperatura com relação ao tempo, obtidas com a aquisição de dados do termopar do pirômetro de sucção. A Fig. 5 apresenta as posições do termopar para as temperaturas de operação 1175°C, medidas para os dois combustíveis (etanol e GLP) e com os dois números de rotação  $S' = 0,684$  e  $S' = 1,315$ .

Nota-se que a amplitude da variação da temperatura é inversa ao número de rotação, ou seja, quando o número de rotação é menor ( $S' = 0,684$ ) a variação é maior chegando até 130°C (para o etanol), mas nesta mesma posição, com uma rotação maior ( $S' = 1,315$ ) a variação cai para uma ordem de 45°C (ainda para o etanol). Assim temos que quanto maior o número de rotação menor a variação de temperatura. Isto é observado em todas as condições, independente do combustível.

Observa-se também que a variação de temperatura na parte final da câmara de combustão ( $x/D = 2,72$ ) é menor que na posição mais próxima ao queimador ( $x/D = 0,36$ ). É possível que haja uma correlação entre as magnitudes da variação de temperatura e o número de rotação.

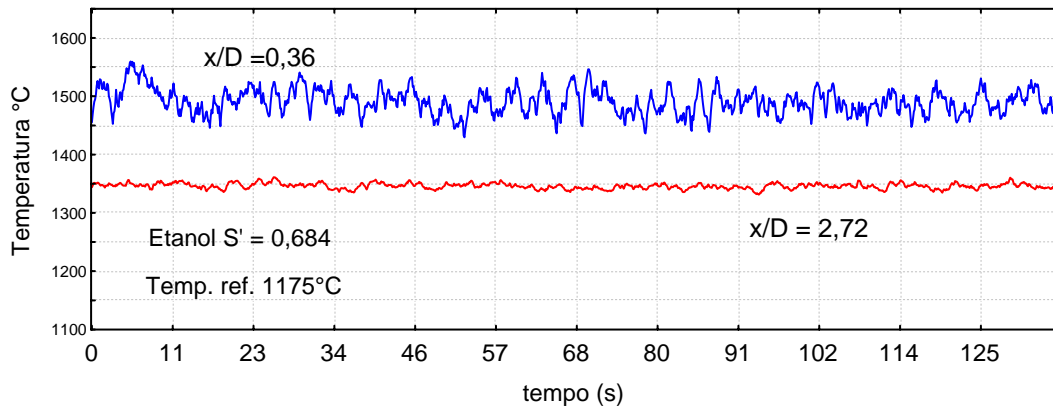


Figura 6. Variação de temperatura do etanol com número de rotação  $S' = 0,684$  e temperatura de referência  $1175^{\circ}\text{C}$

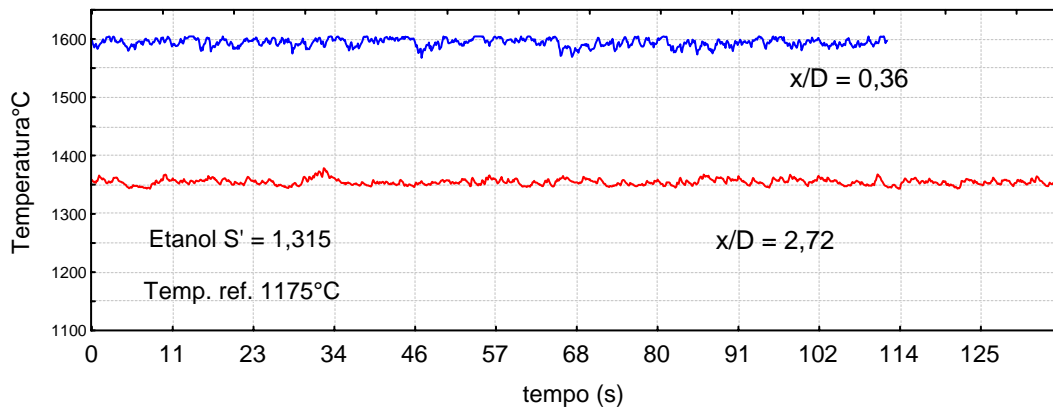


Figura 7. Variação de temperatura do etanol com número de rotação  $S' = 1,315$  e temperatura de referência  $1175^{\circ}\text{C}$

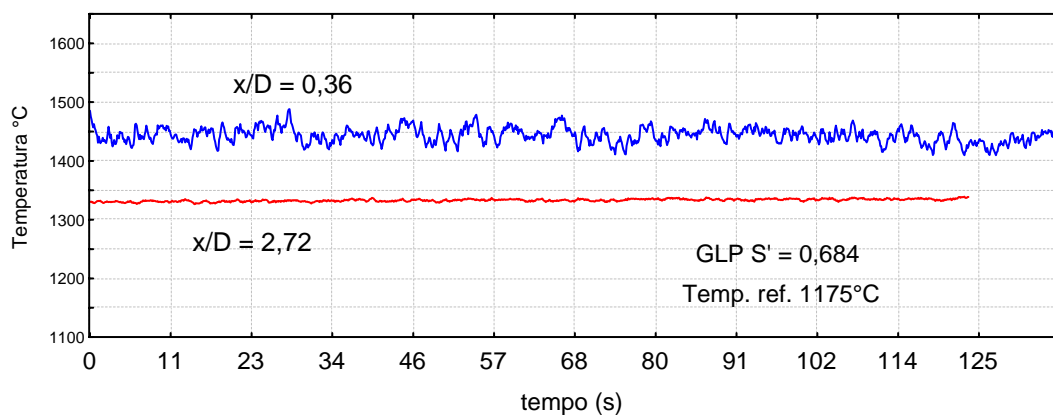


Figura 8. Variação de temperatura do GLP com número de rotação  $S' = 0,684$  e temperatura de referência  $1175^{\circ}\text{C}$

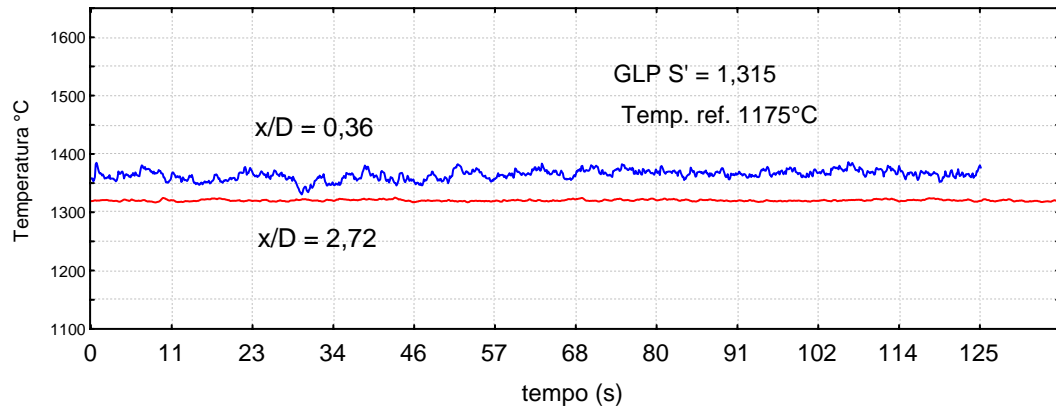


Figura 9. Variação de temperatura do GLP com numero de rotação  $S' = 1,315$  e temperatura de referência 1175°C

As Fig. 10 a 13 apresentam os perfis de temperatura para o GLP e etanol na temperatura de referência 1000°C e número de rotação 0,684 para as posições iniciais ( $x/D = 0,15$ ) e final ( $x/D = 3,19$ ) da câmara de combustão.

Observa-se que o etanol apresenta uma temperatura maior na região central da câmara de combustão em relação ao GLP. Já nas proximidades da parede da câmara de combustão o comportamento é inverso, o GLP apresenta temperatura maior que o obtido na combustão do etanol. Este comportamento é recorrente na operação da câmara à temperatura de referência 1175°C, como pode ser observado nos gráficos de temperatura.

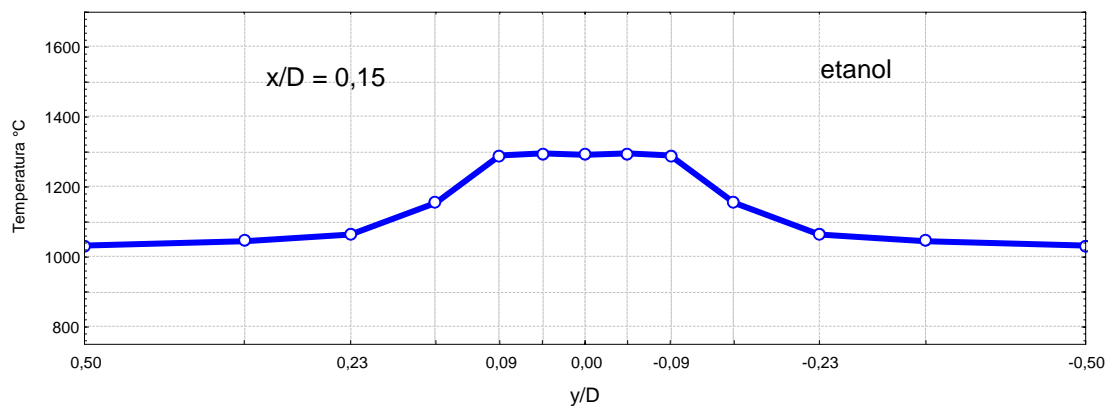


Figura 10. Variação de temperatura ao longo do perfil  $x/D = 0,15$ ,  $S' = 0,684$  para o etanol à temperatura de referência 1000°C.

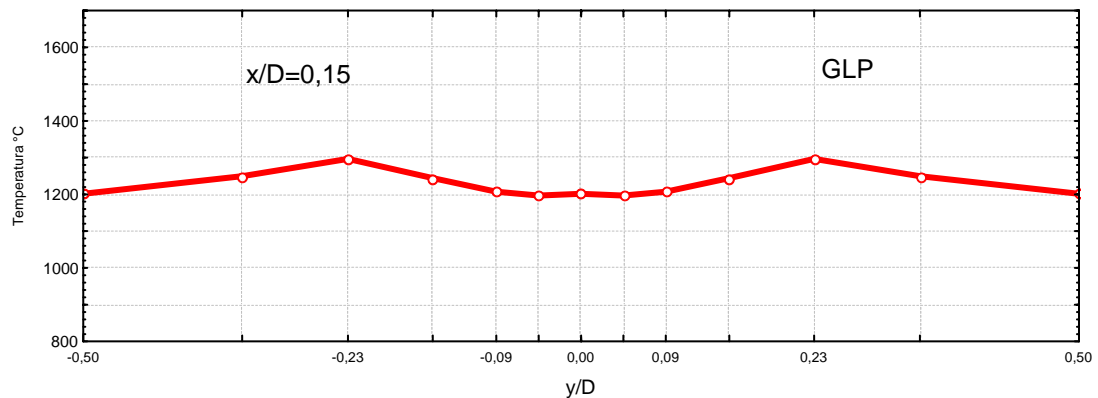


Figura 11. Variação de temperatura ao longo do perfil  $x/D = 0,15$ ,  $S' = 0,684$  para o GLP à temperatura de referência 1000°C.

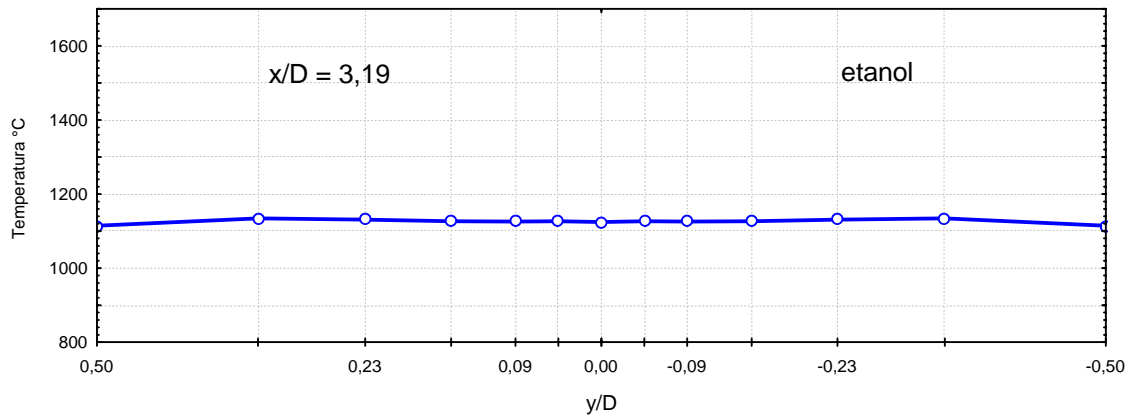


Figura 12. Variação de temperatura ao longo do perfil  $x/D = 3,19$ ,  $S' = 0,684$  para o etanol à temperatura de referência  $1000^{\circ}\text{C}$ .

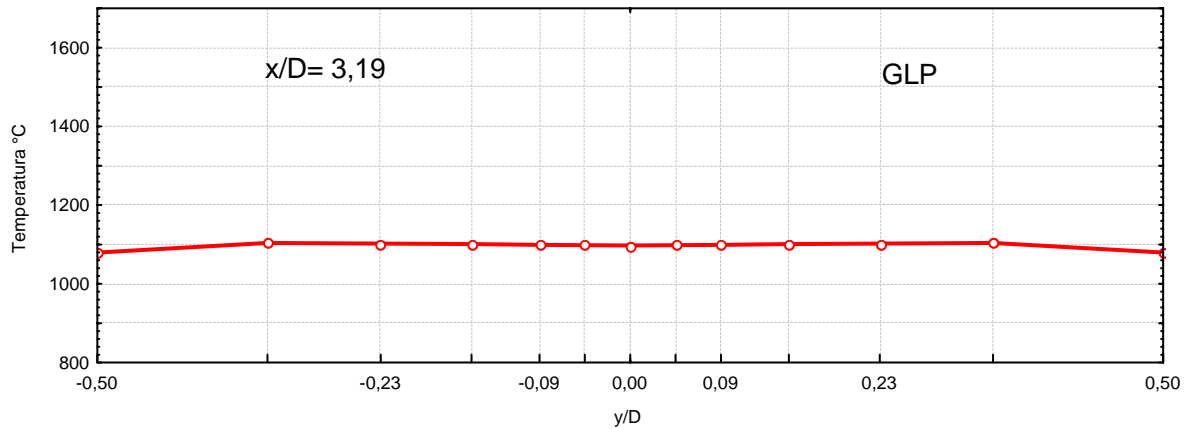


Figura 13. Variação de temperatura ao longo do perfil  $x/D = 3,19$ ,  $S' = 0,684$  para o GLP à temperatura de referência  $1000^{\circ}\text{C}$ .

Verifica-se nas figuras 10 a 13, existe a exata simetria das curvas em relação ao ponto  $y/D$  0,00. Isso se dá pois o estudo foi realizado na metade da câmara e rebatido para a câmara toda, da mesma forma que KENBAR (1995).

O gráfico de isotermas ao longo de toda a câmara que é mostrado nas Fig. 14 e 15, com temperatura de referência  $1175^{\circ}\text{C}$  e número de rotação  $S' = 1,315$ , para os dois combustíveis.

Observando os contornos de isotérmicas do início da câmara (próximo ao queimador) até próximo à saída dos gases nota-se que existe uma homogeneidade maior na distribuição de temperatura do GLP quando comparada com o etanol. Por exemplo, para o GLP à temperatura de referência de  $1175^{\circ}\text{C}$ , com número de rotação  $S' = 1,315$ , a temperatura próxima ao queimador (no centro da câmara) fica em torno de  $1380^{\circ}\text{C}$  e próxima a saída atinge uma temperatura aproximada de  $1300^{\circ}\text{C}$ , com uma diferença em torno de  $80^{\circ}\text{C}$ .

Nota-se que a temperatura sempre estará maior que a temperatura de referência, pois esta temperatura é medida no duto de saída da câmara.

Já para o etanol nas mesmas condições, ou seja, temperatura de referência  $1175^{\circ}\text{C}$  e  $S' = 1,315$ , a temperatura fica próxima dos  $1500^{\circ}\text{C}$  no centro da câmara e na saída dos gases fica próxima de  $1350^{\circ}\text{C}$ , uma diferença em torno de  $150^{\circ}\text{C}$ .

Quando se observa somente o número de rotação, para o mesmo combustível, nota-se que não existe uma grande variação na distribuição de temperatura para os números de rotação maiores em relação aos menores, como por exemplo, para o GLP com número de rotação  $S' = 1,315$  e temperatura de referência  $1175^{\circ}\text{C}$ , a temperatura varia de  $1380^{\circ}\text{C}$ , próximo ao queimador, para  $1300^{\circ}\text{C}$  no final da câmara, próximo a saída dos gases, apresentando uma diferença de  $80^{\circ}\text{C}$ .



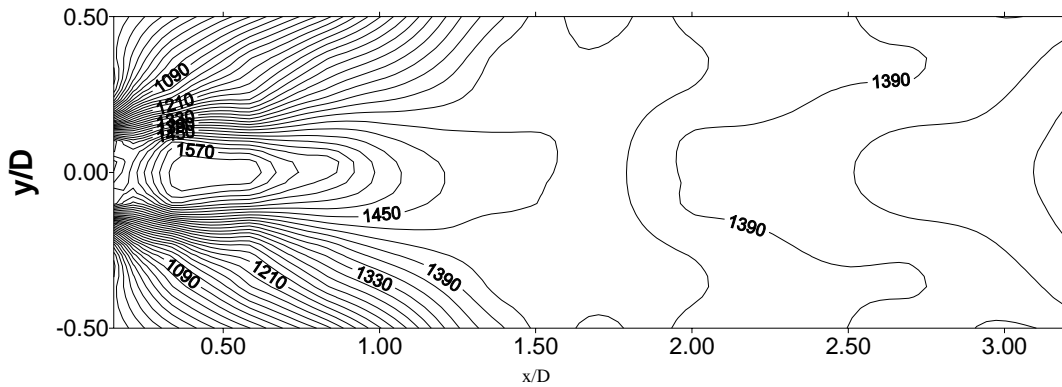


Figura 14. Perfil de temperatura do etanol  $S' = 1,351$ , com temperatura de referência de  $1175^{\circ}\text{C}$  e intervalo de  $20^{\circ}\text{C}$ .

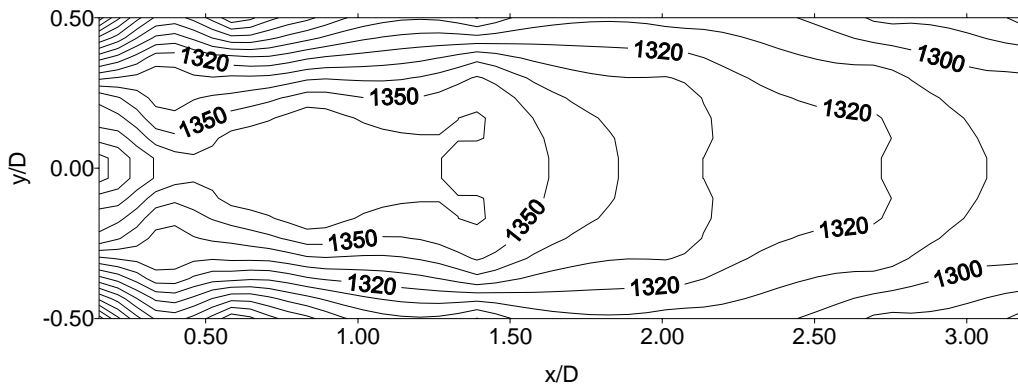


Figura 15. Perfil de temperatura do GLP  $S' = 1,351$ , com temperatura de referência de  $1175^{\circ}\text{C}$  e intervalo de  $10^{\circ}\text{C}$ .

## 5. Conclusão

Este trabalho estudou a variação da temperatura, na combustão de GLP e etanol vaporizado em uma câmara de combustão cilíndrica horizontal isolada termicamente. Nos testes realizados foram mantidos constantes o tempo de residência dos gases e a potência específica da câmara de combustão, foram utilizados duas temperaturas de saída dos gases ( $1000^{\circ}\text{C}$  e  $1175^{\circ}\text{C}$ ) e foram variados os números de rotação relativos à injeção de ar no queimador.

Os resultados obtidos mostraram influência da fluidodinâmica no perfil de temperatura, representada pelo número de rotação do queimador. Assim, as temperaturas locais foram aumentadas significativamente com o aumento do número de rotação.

Verificou-se que a flutuação de temperatura local é maior quando a rotação é menor, conforme mostra as Fig. 6 a 9. Isso é um indicativo de que a mistura em uma rotação maior é mais homogênea, mas esta informação terá que ser confirmada com detalhamento e um estudo maior de pontos.

A evolução da temperatura na combustão do etanol mostrou-se diferente da evolução da temperatura na combustão do GLP, como pode ser verificado através dos gráficos distribuição das temperaturas no interior da câmara de combustão, determinadas para os números de rotação  $S' = 0,684$  e  $S' = 1,315$ . No entanto, a velocidade de saída do jato de etanol e GLP foram diferentes, sendo da ordem de  $55\text{ m/s}$  para o etanol e  $27\text{ m/s}$  no caso do GLP.

Verificou-se ainda que com número de rotação menor  $S' = 0,684$  existe uma variação maior comparada com o número de rotação maior  $S' = 1,315$ . Isto indica que com um número de rotação maior existe uma homogeneidade maior na mistura dos gases.

A distribuição de temperatura no interior da câmara de combustão no caso do etanol mostrou-se muito mais heterogênea que no caso do GLP.

## 6. Referências bibliográficas

- Beér, M. J., Chigier, N. A. "Combustion Aerodynamics". London, Applied Science Publishers LTD, 1972. 264p.
- Beltagui, S. A., Maccallum, N. R. L. "The Modelling of Vene-Swirled Flame in Furnaces", J. Inst. Fuel 1976. vol.69, p. 193-200.
- Bizzo, W. A. "Emissão de monóxido de carbono e hidrocarbonetos totais em câmara de incineração: Efeito do número de rotação e composição do combustível". Campinas, Faculdade de Engenharia Mecânica da Unicamp, 1997. 116p. (Tese, Doutorado em Engenharia Mecânica)
- Chedaille, J., Braud, Y., "Measurements in Flame" Edward Arnold (Publ.), London, 1972. 228p.
- Fenimore, C. P. "Formation of nitric oxide in premixed hydrocarbon flames". 13<sup>TH</sup> Symposium (International) on Combustion, 1970, Salt Lake City, Utah. Combustion Institute. Pittsburgh, Pa, 1971. p. 373-380.
- Fenimore, C. P., Jones, G.W. "Nitric oxide decomposition at 2200 degrees K - 2400 degrees K". Journal of Physical Chemistry, v. 61, n.5, p.654-657, 1957
- Hayhurst, A. N., Vince, I. M. "Nitric oxide formation from N<sub>2</sub> in flames: the importance of 'Prompt' NO". Progress in Energy and Combustion Science, v.6, p.35-51, 1980.
- Kenbar, A. M. A., Beltagui, S. A., Maccallum, N. R. L. "Combustion aerodynamics of a gas-fired furnace with peripheral injection". Experimental Thermal and Fluid Science, v.10, p.335-346, 1995.
- Levenspiel, O. "Engenharia das Reações Químicas". Ed. Edgard Blucher, São Paulo, 1972. 481p.
- Zeldovich, Ya. B. et al. "The mathematical theory of combustion and explosions". p.30-36, Consultants Bureau, 1946.

### COMPARATIVE STUDY OF THE DISTRIBUTION OF TEMPERATURE OF THE LPG AND THE ETHANOL IN A CYLINDRICAL COMBUSTION CAMERA

#### Paulo Lenço

Universidade Estadual de Campinas (Unicamp) - R. Mario Sproesser 181 apto. 32-O, Monte Mor, SP  
lenco@actualis.com.br

#### Waldir A. Bizzo

Universidade Estadual de Campinas (Unicamp) - R. Mendeliev s/n° Cid. Universitária, Campinas, SP  
bizzo@fem.unicamp.br

#### Abstract

The formation of gas pollutants such as CO, CO<sub>2</sub> e NO<sub>x</sub> has caused great concern and this has contributed to phenomena as global warning or formation of atmospheric ozone. Due to the growth of emissions of these gases and harmful compounds, the viable alternatives are both the choice of renewable combustibles and the adoption of mechanisms to reduce the formation of the gases and the compounds. A formation of nitrogen oxides, by Zeldovich mechanism, takes place due to local high temperatures and available oxygen. These factors are influenced by combustion fluidynamic and variation in the residence time. It was studied the variation in temperature in a cylindrical combustion camera, with thermal insulation, where was burned LPG (liquefied petroleum gas) and vaporized ethanol. In this study were used the same residence time, the same specific power and exit temperature of 1000° C and 1175° C. The data showed the variation in temperature, therefore the combustibles were compared. It was noted that in the same conditions there are variations in the behavior of temperature between the combustibles.

Keywords: ethanol, LPG, swirl number, combustion, temperature.

## LARGE EDDY SIMULATION OF A METHANE TURBULENT DIFFUSION FLAME USING FLAME-SHEET APPROXIMATION

**Araújo, H. F. S**

University of São Paulo

**Fukumasu, N. K.**

University of São Paulo

**Krieger Filho, G. C.**

University of São Paulo

guenther@usp.br

**Abstract.** A numerical simulation of a methane turbulent diffusion flame using Large Eddy Simulation is carried out in the present work. The turbulence model is based on the Large Eddy method, where the large-scale flow is calculated directly and the subgrid-scale processes are modeled. In this method, the time-step of the simulation is set small enough to capture the characteristic time scale of the turbulence. The conservation equations are filtered so that only spatial mean values are available. Therefore, a model to the spatial averaged reaction rate, due the chemical reactions that take place in the molecular level, is need. In order to avoid the formulation of such spatial averaged reaction rate, as a first approach in the present work, the combustion processes is assumed to be described by the flame sheet approximation and the mixture fraction. No radiation losses are taken into account. The numerical method is based on finite volume method and the pressure-velocities coupling is done with the PRIME method. The time integration is based on the Euler method. The averaged conservation equations are written in cylindrical coordinates. The used subgrid approach is the Smagorinsky model. The investigated flame is a turbulent diffusion free jet flame burning methane. Experimental data of velocities, mixture fraction and temperature were taken from the International Workshop on Measurement and Computation of Turbulent Nonpremixed Flame. Averaged velocities and temperature are compared with the experimental data. Reasonable agreement is obtained for the velocities. By the temperature comparison, very large deviations are observed and are still under investigation

**keywords:** Combustion, Diffusion Flame, Large Eddies Simulation, Methane Flame

### 1. Introduction

The numerical simulation of combustion processes can be performed nowadays by the three classes of models: Direct Numerical Simulation (DNS), Large Eddy Simulation (LES) and Reynolds Averaged Navier-Stokes equations (RANS). The DNS needs no closure model to the Navier-Stokes equations but is not feasible for the simulation of engineering relevant flames due to the very large computing requirements. The limitations of the RANS methods are well documented in the literature. As a very promising method rises the LES method. In the LES the equations of motion are filtered so that the large scales of the turbulent motion are simulated whereas the smaller unresolved scales, smaller than the filter width, are modeled. The features of LES are twofold: on one hand the closure models are limited to the small scales of the turbulent flow and on the other hand, the computational time is practicable. Compared to RANS, LES is more computationally expensive but physically much more realistic. In the present work a nonpremixed turbulent methane flame is simulated with the LES method. A recent work simulating the same non-premixed turbulent methane flame has been done by R. Mustata and Bondi, 2006, using for the thermochemical model stocastic fields of the PDF transport equation. The presented results are very good. A very detailed reference on LES applied to nonpremixed turbulent flames is Kempf, 2003, where results for a turbulent non-premixed Hydrogen flame are presented. The turbulent thermochemical model used in the present work is based on the flame sheet model with the solution of the spatial averaged mixture fraction transport equation. The results are compared with the experimental data obtained from International Workshop on Measurement and Computation of Turbulent Nonpremixed Flame (TNF, 2006).

## 2. Mathematical formulation

Fluid motion can be described by a set of coupled partial differential equations. The main equations describe the transport of the conserved quantities and hence are known as conservation-equations. Assuming isothermal incompressible flow, the equations of conservation of mass and momentum (in all three spatial directions) adequately describe the flow. For reactive flows, additional transport-equations for the enthalpy and species concentrations must be considered. In LES a spatial filter is applied to the equations of motion and scalars. Doing this, only the large scale structures of the velocity and scalars fields are computed and the effects of the subgrid scales are modeled.

### 2.1. Filtering

The governing equations for a turbulent flame (continuity, momentum, species and energy) comprise the whole spectrum of length-scales. Therefore, the equations must be altered to purely resolve the large-scale features. This is done by low-pass filtering of the equations using a filter function  $h$ . This filter removes all the finer fluctuations, so that the governing equations only describe the space-averaged fields.

The filtered field  $\overline{\Phi}(x_j, t)$  is determined by convolution with the filter-function  $h(x_j - x'_j)$ . As a result, the product of the local filter and the field  $\Phi$  are averaged in space:

$$\overline{\Phi}(x_j, t) = \iiint_{-\infty}^{\infty} \Phi(x_j - x'_j) h(x'_j) dx'_1 dx'_2 dx'_3, \quad (1)$$

where  $x'_j$  refers to local coordinates, so  $x'_j = 0$  at  $x_j$ .

The difference between the filtered field  $\overline{\Phi}$  (large-scale portion of  $\Phi$ ) and the original field  $\Phi$  is called its fine-structure or the small-scale portion  $\Phi'$ .

$$\Phi - \overline{\Phi} = \Phi' \quad \Leftrightarrow \quad \Phi = \overline{\Phi} + \Phi' \quad (2)$$

A typical example for a filter function is the rectangle filter (top-hat filter) of the widths three  $\Delta_j$ , which is defined by equation (3). In general, any low-pass filter can be chosen for LES, although only some make sense.

$$h(x_j - x'_j) = \begin{cases} \prod_{j=1}^3 1/\Delta_j & : |x'_j| \leq \frac{\Delta_j}{2} \\ 0 & : |x'_j| > \frac{\Delta_j}{2} \end{cases} \quad (3)$$

In turbulent reactive flows, there are density fluctuations, which originate unclosed terms that are difficult to model (Kempf, 2003). However, this can be avoided by applying density-weighted *Favre-filtering* instead. Favre filtering of a scalar  $\Phi$  results in  $\tilde{\Phi}$  and the fine-structure contribution  $\Phi''$ , which are defined in eq. (4). With Favre-filtering, a correlation  $\overline{\rho\phi}$  is equal to  $\overline{\rho}\tilde{\Phi}$ .

$$\tilde{\Phi} = \frac{\overline{\rho\Phi}}{\overline{\rho}} \quad \text{with} \quad \Phi = \tilde{\Phi} + \Phi'' \quad (4)$$

In LES, a special filter is able to simplify the further proceeding: The *Schumann* filter is the top-hat filter on the base of the local mesh-cell, having the filter-widths  $\Delta_j$  set equal to the size  $\Delta x_j$  of the local cell. This is the concept of *implicit* filtering (Kempf, 2003).

With Schumann-filtering, the integration interval in equation (1) can be narrowed to  $-\Delta x_j/2 \leq x'_j \leq \Delta x_j/2$ . With the substitutions  $x_j^- = -\Delta x_j/2$  and  $x_j^+ = \Delta x_j/2$ , as well as the filter out of the integral, we obtain eq. 5. In this equation, the product in front of the integral is just the inverse volume of the local CFD-cell.

$$\overline{\Phi}(x_j, t) = \left( \prod_{k=1}^3 \frac{1}{\Delta x_k} \right) \int_{x_3^-}^{x_3^+} \int_{x_2^-}^{x_2^+} \int_{x_1^-}^{x_1^+} \Phi(x'_j, t) dx'_1 dx'_2 dx'_3 \quad (5)$$

In other words, Schumann-Filtering reduces the filtering process to volume-averaging over one cfd-cell, which happens anyway if finite volumes are applied.

### 2.2. Filtered Governing Equations

To obtain the LES equations, the governing equations must be filtered. After applying the filtering-operator, transformations are performed which are only valid if filtering- and derivation-operators commute, what is accepted as valid for the Schumann-Filtering.

### 2.2.1. Transport of Mass

Filtering equation of continuity yields the equation (6) for LES, which can be solved in filtered quantities just like the original equation:

$$\frac{\partial \bar{\varrho}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{\varrho u_j}) = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \frac{\partial \bar{\varrho}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\varrho} \tilde{u}_j) = 0 \quad (6)$$

### 2.2.2. Transport of Momentum

The same filtering technique is employed to the Navier-Stokes equations resulting:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\bar{\varrho} \tilde{u}_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\varrho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j) = \\ \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \bar{\varrho} \left( \nu \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} + \nu \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} \right) - \frac{2}{3} \bar{\varrho} \tilde{\nu} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right] - \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \bar{\varrho} g_i \end{aligned} \quad (7)$$

Equation (7) still includes unknown terms. With an negligible error, the diffusive term can be approximated by

$$\nu \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \approx \tilde{\nu} \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \quad (8)$$

and the correlation  $\tilde{u}_i \tilde{u}_j$  can be split up to the resolved part  $\tilde{u}_i \tilde{u}_j$  and a fine-structure contribution  $\tau_{ij}^{\text{sgs}}$ :

$$\tilde{u}_i \tilde{u}_j = \tilde{u}_i \tilde{u}_j + \tau_{ij}^{\text{sgs}} \quad (9)$$

The fine-structure contribution  $\tau_{ij}^{\text{sgs}}$  is known as *sub-grid stress* since it is representative of the shear stress due to the unresolved turbulent motion.

With (8) and (9), equation (7) can be altered to be solved in filtered quantities similarly to the unfiltered equation. The only difference is the addition of the sub-grid stresses to the diffusion term:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\bar{\varrho} \tilde{u}_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\varrho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j) = \\ \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \bar{\varrho} \tilde{\nu} \left( \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} + \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} \right) - \frac{2}{3} \bar{\varrho} \tilde{\nu} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \delta_{ij} + \bar{\varrho} \tau_{ij}^{\text{sgs}} \right] - \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \bar{\varrho} g_i \end{aligned} \quad (10)$$

### 2.2.3. Transport of the Mixture-Fraction

The thermochemical model used in the present work is based on the conserved scalar formulation (Turns, 1996). In this framework, one has to solve the transport equation of the mixture fraction, which after the filtering reads:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\overline{\varrho f}) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{\varrho f u_j}) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \overline{\varrho D_f} \frac{\partial f}{\partial x_j} \right) \quad (11)$$

Here again, the convection term  $\overline{\varrho f u_j}$  is split into its resolved part  $\tilde{f} \tilde{u}_j$  and a fine-structure contribution  $F_j^{\text{sgs}}$ , which describes the flux due to unresolved turbulent motion:

$$\overline{\varrho f u_j} = \tilde{f} \tilde{u}_j + F_j^{\text{sgs}} \quad (12)$$

Using (12), equation (11) is modified to:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\varrho} \tilde{f}) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\varrho} \tilde{f} \tilde{u}_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \bar{\varrho} \tilde{D}_f \frac{\partial \tilde{f}}{\partial x_j} + \bar{\varrho} F_j^{\text{sgs}} \right) \quad (13)$$

With the filtered governing equations for mass (6), momentum (10) and mixture-fraction (13), a set of coupled differential equations exists that describes the large-scale features of the flame investigated in this work.

## 2.3. Modeling the Sub-grid-Stresses $\tau_{ij}^{\text{sgs}}$

In eq. (10), the sub-grid-stresses  $\tau_{ij}^{\text{sgs}}$  represent the influence of the turbulent fine-structure  $u'_j$  on the resolved velocity field. Since the information on the small scales was removed by filtering, these terms can no longer be computed. However, they may be modeled as a function of known values.

### 2.3.1. The Eddy Viscosity Approach

The eddy-viscosity approach is based on the assumption that small-scale turbulence affects the flow in the same way as the molecular viscosity. Therefore, the fine-structure term  $\tau_{ij}^{\text{sgs}}$  should be modeled by adding a turbulent viscosity  $\nu_t$  to the molecular viscosity  $\nu$ , resulting in an effective viscosity  $\nu_{ef} = \tilde{\nu} + \nu_t$ .

Adding the turbulent viscosity  $\nu_t$  to model the sub-grid-stresses  $\tau_{ij}^{\text{sgs}}$  in the filtered Navier-Stokes equations (10) corresponds to applying the following model:

$$\tau_{ij}^{\text{sgs}} = \nu_t \left( \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} + \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} \right) - \frac{2}{3} \nu_t \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \quad (14)$$

However, this model would result in the trace of the stress-tensor  $\tau_{ij}^{\text{sgs}}$  being zero. When using a pressure-correction scheme such as in this work, this constraint may be lifted by using the following model for the sub-grid-stresses:

$$\tau_{ij}^{\text{sgs}} - \frac{1}{3} \tau_{kk}^{\text{sgs}} \delta_{ij} = \nu_t \left( \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} + \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} \right) - \frac{2}{3} \nu_t \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \quad (15)$$

With this approach, the trace elements of  $\tau_{ij}^{\text{sgs}}$  remain unknown and the filtered Navier-Stokes equation (10) can be rewritten to yield:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{u}_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j) = \\ \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \bar{\rho} \nu_{ef} \left( \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} + \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} \right) - \frac{2}{3} \bar{\rho} \nu_{ef} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right] - \frac{1}{3} \frac{\partial}{\partial x_i} \bar{\rho} \tau_{kk}^{\text{sgs}} + \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \bar{\rho} g_i \end{aligned} \quad (16)$$

As mentioned previously, this work relies on a pressure correction scheme to determine the value of the pressure so that the equation of continuity is satisfied. This pressure correction is able to compute the sum of the pressure and the trace-term of the stress-tensor. Therefore, the pressure-parameter  $\bar{P}$  is introduced as shown in equation (17). The reader should be aware that solving equation (18) will only yield the pressure parameter  $\bar{P}$ , whilst the physical pressure  $\bar{p}$  remains unknown.

$$\bar{P} = \bar{p} - \frac{1}{3} \bar{\rho} \tau_{kk}^{\text{sgs}} \quad (17)$$

With the substitution given in eq. (17), the filtered momentum-equation (18) is obtained:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{u}_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j) = \\ \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \bar{\rho} \nu_{ef} \left( \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} + \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} \right) - \frac{2}{3} \bar{\rho} \nu_{ef} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right] + \frac{\partial \bar{P}}{\partial x_i} + \bar{\rho} g_i \end{aligned} \quad (18)$$

### 2.3.2. The Smagorinsky Model

To solve the momentum-equation (18), a model providing an approximation for the turbulent viscosity  $\nu_t$  is needed. As mentioned before, the model by Smagorinsky et al. (apud. Kempf, 2003) was used in this work.

The Smagorinsky model relates the eddy viscosity  $\nu_t$  to the width  $\Delta$  of the LES-filter and to the deformation-velocity-tensor  $\tilde{S}_{ij}$ :

$$\nu_t = (C_s \Delta)^2 \left| \frac{1}{2} \left( \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} + \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} \right) \right| \quad \text{or} \quad \nu_t = (C_s \Delta)^2 |\tilde{S}| \quad (19)$$

$$\text{with} \quad \tilde{S}_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} + \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} \right) \quad \text{and} \quad |\tilde{S}| = \sqrt{2 \tilde{S}_{lk} \tilde{S}_{lk}} \quad (20)$$

This model is based on a typical length-scale  $C_s \Delta$  and a typical timescale (determined by the contraction of the deformation-velocity-tensor). The length-scale is chosen to be proportional to the local cell-width, which is coherent with the idea that only the unresolved structures (i. e. smaller than the cell-size) are to be modeled. In the present work, the value  $C_s = 0.2$  was used.

## 2.4. Modeling the Turbulent Fluxes $F_j^{\text{sgs}}$ of Mixture-Fraction

In the filtered mixture-fraction equation (11), the unknown term  $F_j^{\text{sgs}}$  must be modeled. Assuming once again that turbulence contributes to mixing like additional diffusion,  $F_j^{\text{sgs}}$  is approximated with an *eddy diffusivity* approach. This is similar to the *eddy viscosity* approach. With this approach, the structure of the transport equation (11) for the mixture-fraction remains similar to the non-filtered form. Herein,  $F_j^{\text{sgs}}$  is modeled by applying the “*turbulent diffusivity*”  $D_{f,t}$  combined with the gradient of the filtered mixture-fraction  $\partial\tilde{f}/\partial x_j$ :

$$F_j^{\text{sgs}} = D_{f,t} \frac{\partial\tilde{f}}{\partial x_j} \quad (21)$$

With this model, the right hand side of equation (11) now reads:

$$\frac{\partial}{\partial x_j} \left( \bar{\varrho} \left( \tilde{D}_f + D_{f,t} \right) \frac{\partial\tilde{f}}{\partial x_j} \right) \quad (22)$$

The diffusion coefficients  $\tilde{D}$  and  $D_{f,t}$  are proportional to the viscosities  $\tilde{\nu}$  and  $\nu_t$  and are only scaled by the Schmidt-Number  $\sigma$ . This describes the ratio of momentum transport due to viscosity to mixture-fraction transport due to diffusion:

$$\sigma = \frac{\nu}{D_f} \approx \frac{\tilde{\nu}}{\tilde{D}_f} \quad \text{and} \quad \sigma_t = \frac{\nu_t}{D_{f,t}} \quad (23)$$

We finally obtain the filtered and modeled equation for the mixture-fraction:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\varrho}\tilde{f}) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\varrho}\tilde{f}\tilde{u}_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \bar{\varrho} \left( \frac{\nu_t}{\sigma_t} + \frac{\tilde{\nu}}{\sigma} \right) \frac{\partial\tilde{f}}{\partial x_j} \right) \quad (24)$$

The laminar Schmidt-number  $\sigma$  is formally accepted as 0.7 for air, whereas a wide range of turbulent Schmidt-numbers  $\sigma_t$  have been reported for the turbulent case.

## 2.5. Turbulent Thermochemical Model

A detailed description of methane combustion involves a large number of chemical species and reaction steps. The thermochemical model used in the present work is, however, very simple and based on the well-known flame sheet model (Turns, 1996). In the framework of the flame sheet model, reactions take place in a thin layer in the flame, where fuel and oxidator are present at stoichiometric ratio. Using the assumption that fuel and oxidator cannot co-exist, one is able to formulate algebraic relations between the mixture fraction and the mass fractions of fuel, oxidator and products (Turns, 1996). If, additionally, the flame is presumed to be adiabatic, then the enthalpy can be obtained in terms of the mixture fraction and thus the temperature and density can also be determined. The flame sheet has some severe shortcomings. In real flames, a high concentration of intermediate species (like OH, H or O radicals) exists in the (thin) flame-front. Since flame sheet neglects chemical kinetics, it cannot distinguish *reacting* from *reacted* gases. Hence, the concentration of intermediate species is neglected and the position of the flame-front remains unknown. Furthermore, the the flame sheet cannot describe effects like flame-quenching or re-ignition. Despite of all these shortcomings, the flame sheet model is deemed sufficient for the present purposes.

In LES, only the filtered value  $\tilde{f}$  of the mixture-fraction is known. To compute the dependent variables  $\overline{\Phi(f)}$  (e. g. density or temperature), the sub-grid distribution of the mixture-fraction must be considered since  $\Phi$  is generally a non-linear function of the mixture-fraction  $f$ . In order to do this several authors use a presumed PDF (probability density function)  $p(f)$ , which is a measure for the occurrence of a certain mixture-fraction. In the present work, however, a very crude approximation is used doing:

$$\overline{\Phi(f)} = \Phi(\tilde{f}) \quad (25)$$

In the future, the variance of the mixture fraction will be included in the calculations, so that a presumed  $\beta$ -function PDF will be constructed.

## 3. Test Case

In order to evaluate the proposed model, experimental data of a turbulent diffusion flame was used. The TNF D flame (TNF, 2006) is a piloted methane-air jet diffusion flame. The fuel consisting of 25 % methane and 75% air forms the inner fuel jet with a diameter of  $D = 7.2$  mm. The flame is stabilized using a pilot

with a diameter of  $D_p = 18.2$  mm. The pilot has a composition corresponding to that of a burnt fuel mixture. The central jet has a bulk velocity ( $U_0$ ) of 49 m/s and the coflow velocity is 0.2 m/s. The bulk velocity of 49m/s leads to a fuel Reynolds number based on the nozzle diameter of  $Re = 22400$ . Experimental data of temperature and velocity were taken at the centerline of the jet.

#### 4. Numerical Solution

The presented partial differential equations for mass, momentum and mixture fraction were solved using a finite volume based code. The convective terms are discretized in space with a hybrid method which switches from upwind to central difference schemes, depending upon the cell Peclet number. The pressure-velocity coupling is done using the PRIME method (Maliska, 1995). A explicit algorithm is used for time advance. The computational domain comprises a cylinder of  $5D \times 60D \times 2\pi$  in radial, longitudinal and tangential directions, where  $D$  is the jet diameter. The used grid has  $24 \times 100 \times 5$  nodes in the radial, longitudinal and tangential directions respectively. Convergence was achieved for each LES time-step after the residuals fall down to  $1e-3$ . A total of 5 flow-through time was used to collect the mean values presented in the next section. The flow-through time is defined herein as the time taken for a fluid particle on the centerline of the jet to travel through the domain.

#### 5. Results

In this section the simulated mean values of axial velocity, mixture fraction and temperature are presented. All figures show the distribution of the variables along the centerline of the flame.

The centreline distribution of the mean axial velocity is depicted in Figure 1. One can see that the decay of the calculated velocity is overpredicted in comparison with the experimental data.

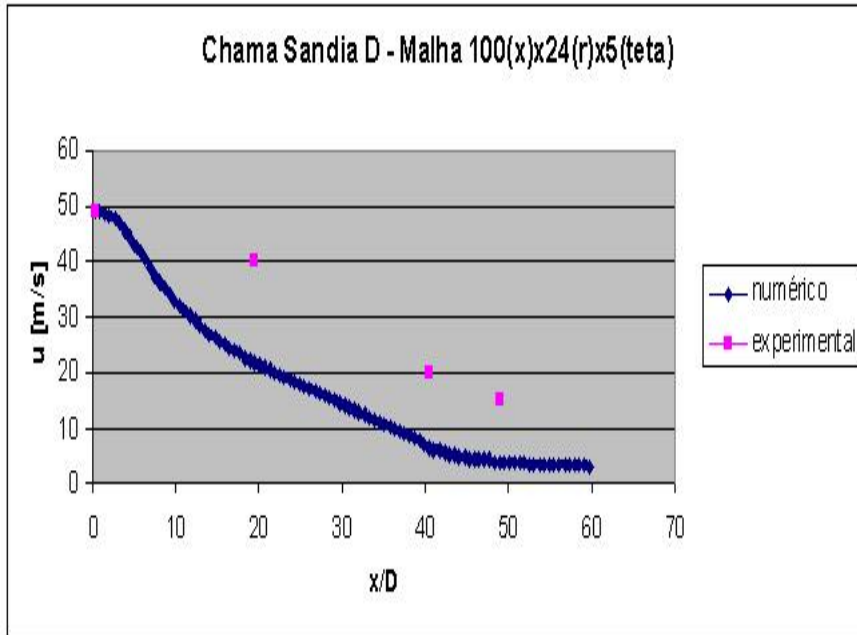


Figure 1: Mean axial velocity along the centerline. Line - simulation; dots experimental data

The centreline distribution of the mean mixture fraction is shown in Figure 2. Once again, one can see that the decay of the mixture fraction is overpredicted in comparison with the experimental data.

The centreline distribution of the mean temperature is shown in Figure 3. As a consequence of the mixture fraction, the temperature slope is too high in in comparison with the experimental data.

The distribution of the mean temperature shows a abrupt fall down at  $x/D=40$ , which is not verified at the experimental data. This is likely due the very crude aproximation, eq. (25), used for the sub-grid distribution of the mixture-fraction .

The simulation shows very large departure from the experimental data. These problems are still under investigation. Possible causes are the sub-grid model and grid dependence.



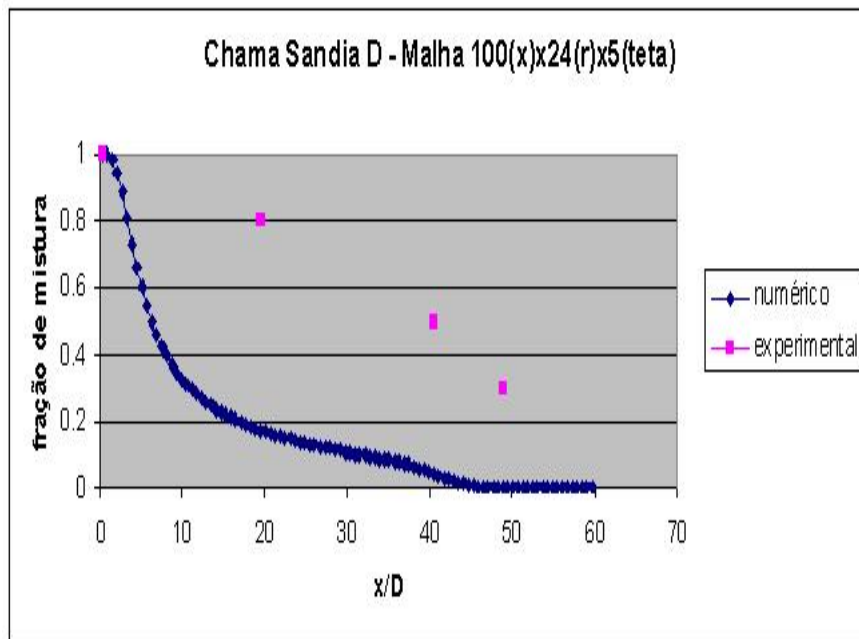


Figure 2: Mean mixture fraction along the centerline. Line - simulation; dots experimental data

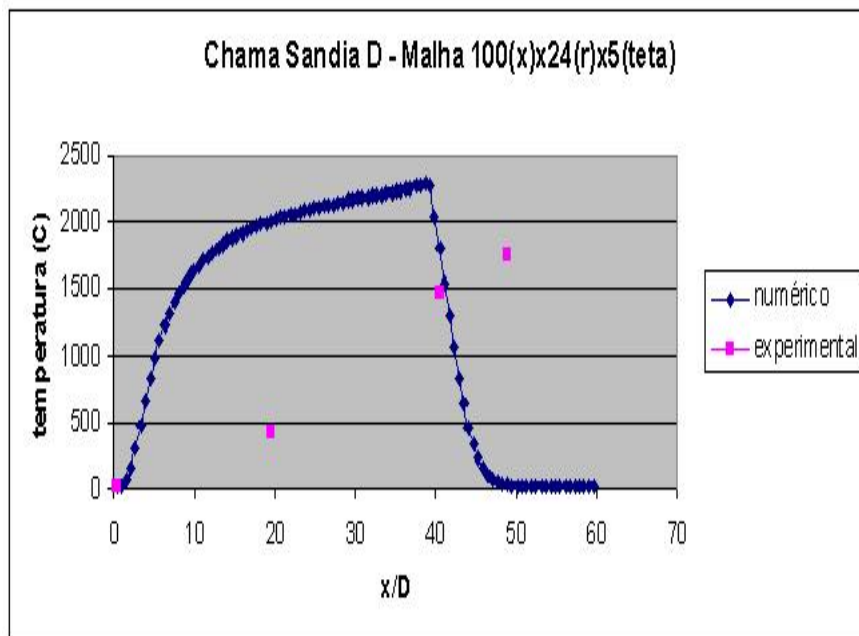


Figure 3: Mean temperature. Line - simulation; dots experimental data

## **6. Acknowledgements**

The authors would like to thank FAPESP (São Paulo/Brazil) for supporting this project.

## **7. References**

- Kempf, A. M., 2003, "Large Eddy Simulation of Non-Premixed Turbulent Flames", PhD thesis, Technische Universitaet Darmstadt, Germany.
- Maliska, C. R., 1995, "Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional", LTC Ed., Brazil.
- R. Mustata, L. Valiño, C. J. W. P. J. and Bondi, S., 2006, A probability density function Eulerian Monte Carlo field method for large eddy simulations: Application to a turbulent piloted methane/air diffusion flame (Sandia D), "Combustion and Flame", Vol. , No. 145, pp. 88–104.
- TNF, 2006, International Workshop on Measurement and Computation of Nonpremixed Flames.
- Turns, S. R., 1996, "An Introduction to Combustion - Concepts and Applications", McGraw-Hill.

## DESENVOLVIMENTO DE UM QUEIMADOR POROSO RADIANTE PARA TESTES DE INFLAMABILIDADE SUPERFICIAL DE MATERIAIS

### Rafael Hafemann Moser

Departamento de Engenharia Mecânica  
Universidade Federal de Santa Catarina  
Florianópolis/SC  
moser@labcet.ufsc.br

### Guilherme Brisot

Departamento de Engenharia Mecânica  
Universidade Federal de Santa Catarina  
Florianópolis/SC  
brisot@labcet.ufsc.br

### Rafael de Camargo Catapan

Departamento de Engenharia Mecânica  
Universidade Federal de Santa Catarina  
Florianópolis/SC  
catapan@labcet.ufsc.br

### Fernando Marcelo Pereira

Departamento de Engenharia Mecânica  
Universidade Federal de Santa Catarina  
Florianópolis/SC  
fernando@labcet.ufsc.br

### Amir Antonio Martins Oliveira

Departamento de Engenharia Mecânica  
Universidade Federal de Santa Catarina  
Florianópolis/SC  
amirol@emc.ufsc.br

**Resumo.** O trabalho aqui apresentado trata do desenvolvimento de um queimador poroso radiante de grande razão entre área superficial e espessura capaz de operar com temperaturas superficiais entre 600° C e 900° C. O queimador poroso desenvolvido foi feito com camadas de esponjas cerâmicas de carvão de silício de 10 ppi, totalizando uma área radiante de 0,15 m<sup>2</sup>. Os testes de operação foram realizados com ar e gás natural pré-misturados em razões de equivalência entre 0,42 e 0,80. Para estabilizar a chama dentro do queimador foi utilizada uma placa perfurada para a distribuição do fluxo de mistura na matriz porosa. Obteve-se um queimador poroso radiante com boa homogeneidade na temperatura superficial, que opera com potências de até 35 kW e com até 49% de eficiência de radiação. A adição do mecanismo fluidodinâmico de estabilização, promovido pela placa distribuidora de fluxo, revelou-se uma forma eficaz de controle da estabilidade de chama e da temperatura superficial em queimadores porosos radiantes.

*Palavras chave:* painel radiante, teste de inflamabilidade superficial, queimador poroso radiante.

### 1. Introdução

Queimadores porosos radiantes são equipamentos usados como fonte de calor radiante a partir da queima de combustíveis gasosos. A reação de combustão ocorre no interior da estrutura tridimensional de cavidades interconectadas que forma a matriz porosa, alterando as características da chama. A matriz sólida promove o pré-aquecimento da mistura de reagentes através da transferência de calor por condução e radiação térmica. Este pré-aquecimento traz como consequência a elevação da temperatura na zona de reação, o aumento na eficiência de conversão do combustível em produtos saturados da combustão (maior eficiência de queima e baixa emissão de poluentes), o aumento da velocidade de chama (elevadas potências), além de possibilitar a queima de misturas pobres em combustível (Howell et al., 1996). A elevada temperatura da matriz porosa confere a estes queimadores um grande potencial de troca de calor direcional por radiação a partir do meio sólido, podendo alcançar eficiências de radiação de até 50% (Catapan, et. al, 2005).

Estruturas porosas cerâmicas e metálicas são comumente usadas como matriz sólida e com frequência empregam-se materiais de estruturas diferentes em um mesmo queimador, buscando tirar vantagem das interfaces em que ocorre uma abrupta variação de propriedades (Khanna et al. 1994). O projeto ideal de um queimador poroso radiante é definido pela temperatura e forma da carga que se deseja aquecer, pela potência requerida e faixa de estabilidade necessária, pela intermitência ou continuidade do processo em questão, pela temperatura máxima de operação da matriz porosa, pela resistência mecânica dos materiais empregados, entre outros.

Vários setores industriais utilizam o aquecimento por radiação térmica em seus processos de produção. Os queimadores porosos radiantes apresentam grandes perspectivas de emprego nestes setores, trazendo vantagens econômicas e operacionais em relação ao aquecimento elétrico e aos queimadores convencionais (Pereira et al., 2004). Atualmente, queimadores porosos radiantes já podem ser encontrados em processos como secagem de papel, cura de plásticos e revestimentos, cocção de alimentos e aquecimento de ambientes.

Este trabalho descreve o desenvolvimento de um queimador poroso radiante para ser utilizado como fonte de radiação térmica em testes de inflamabilidade superficial de materiais. Foi construída uma bancada para a realização de testes de acordo com a norma americana ANSI/ASTM E 162 – 79 “Standard Test Method for Surface Flammability of Materials Using a Radiant Heat Energy Source” (1979), constituída basicamente pela fonte radiante e por uma seção de testes onde a inflamabilidade superficial das amostras de materiais de construção é avaliada.

Para desenvolver um queimador capaz de atender às especificações da norma foram realizados experimentos a fim de encontrar a melhor configuração para o painel. Obteve-se um queimador de grande razão entre área superficial e espessura com eficiência de radiação de 49%. Uma ampla faixa de estabilidade de chama foi alcançada com a distribuição de reagentes em apenas alguns pontos do queimador através de uma placa distribuidora de fluxo (mecanismo fluidodinâmico de estabilização).

## **2. Descrição Geral da Bancada**

A bancada construída para a realização do procedimento de testes de inflamabilidade superficial de materiais segue as especificações da norma ANSI/ASTM E 162 – 79. A Fig. 1 apresenta o projeto em 3D da bancada e fotos do protótipo final.

O método para medição de inflamabilidade superficial de materiais consiste primeiramente em promover a ignição da amostra na sua extremidade superior, através de uma chama piloto, e então, submetê-la a um campo de radiação equivalente a um corpo negro a 670°C. O deslocamento da frente de chama na superfície da amostra e a temperatura dos gases gerados (medidos por termopares na chaminé superior) são usados no cálculo do índice de inflamabilidade superficial padronizado pela norma.

O painel radiante (Fig. 1b-1) está montado em um suporte de aço na posição vertical. O ar necessário para alimentar o painel radiante provém de um ventilador radial monofásico (Fig. 1b-2) de  $\frac{3}{4}$  de HP. A medição da vazão de ar é feita através de um rotâmetro (Fig. 1d-1) marca OMEL, modelo 4T71205x12, com faixa de operação de 0 à 45 Nm<sup>3</sup>/h (25°C e pressão de 1 ATM). O painel foi testado com gás natural e metano, podendo ser usado com outros combustíveis desde que se defina experimentalmente a nova faixa de estabilidade. A medição da vazão de gás é controlada por meio de um rotâmetro (Fig. 1d-2) marca OMEL, modelo R-3 BL, com faixa de operação de 0 à 4,0 Nm<sup>3</sup>/h (25°C e pressão de 1 ATM). O controle da vazão de ar e gás é manual, feita através de válvulas (Fig. 1d-3) instaladas imediatamente antes dos rotômetros.

Os reagentes chegam ao painel já pré-misturados. O gás combustível é injetado na corrente de ar restando um comprimento de mistura de aproximadamente 0,5 m, o que mostrou-se suficiente para a obtenção de uma mistura homogênea.

O acendimento do painel radiante é feito através de uma chama piloto (Fig. 2a-1) posicionada na parte inferior. A bancada possui ainda outra chama piloto (Fig. 2c-1) com a função de promover a ignição do material a ser testado. A chama piloto deve atingir a superfície da amostra horizontalmente, com uma inclinação de aproximadamente 15° (como mostra a Fig. 2d).

Na parte superior da bancada existe uma chaminé (Fig. 1c-1) posicionada acima do painel radiante com a função de confinar parte dos gases liberados na queima do material testado. No seu interior estão fixados oito termopares tipo K conectados a um sistema de aquisição de dados.

Durante o procedimento de teste a amostra do material deve permanecer em frente ao painel com uma inclinação de 30° em relação a vertical, de forma que a sua extremidade superior fique próxima do queimador. No suporte (Fig. 1b-3) são feitas marcações a cada 76 mm que servem de referência para quantificar a propagação da chama.

## **3. Desenvolvimento do painel**

O queimador é constituído por 30 esponjas porosas de carbetto de silício com temperatura máxima de operação de 1500 °C e dimensão de 10x10x2cm. A Fig. 3b mostra como estas cerâmicas são montadas no queimador. As laterais do painel são isoladas por uma manta de fibra de Alumina (3 – Fig. 3a) resistente a temperaturas de até 1200°C.

O queimador poroso radiante desenvolvido para a bancada construída tem como característica uma grande razão entre área superficial e espessura. A área radiante total é de 0,15 m<sup>2</sup> (0,3m x 0,5m) e a espessura do painel é de 0,10 m.

Queimadores porosos com tal característica geométrica podem apresentar dificuldades de estabilização, principalmente devido à tridimensionalidade da chama. Para aumentar a faixa de estabilidade do queimador foi adicionada uma placa perfurada (Fig 3a-1) que restringe a injeção dos gases a alguns pontos da matriz porosa. Em cada orifício ocorre um aumento na velocidade dos gases, dificultando o retorno de chama. Além de representar um mecanismo fluidodinâmico de estabilização, a placa constituída de fibra de alumina também atua como isolamento térmico. A Fig. 3b apresenta um desenho esquemático da placa perfurada.

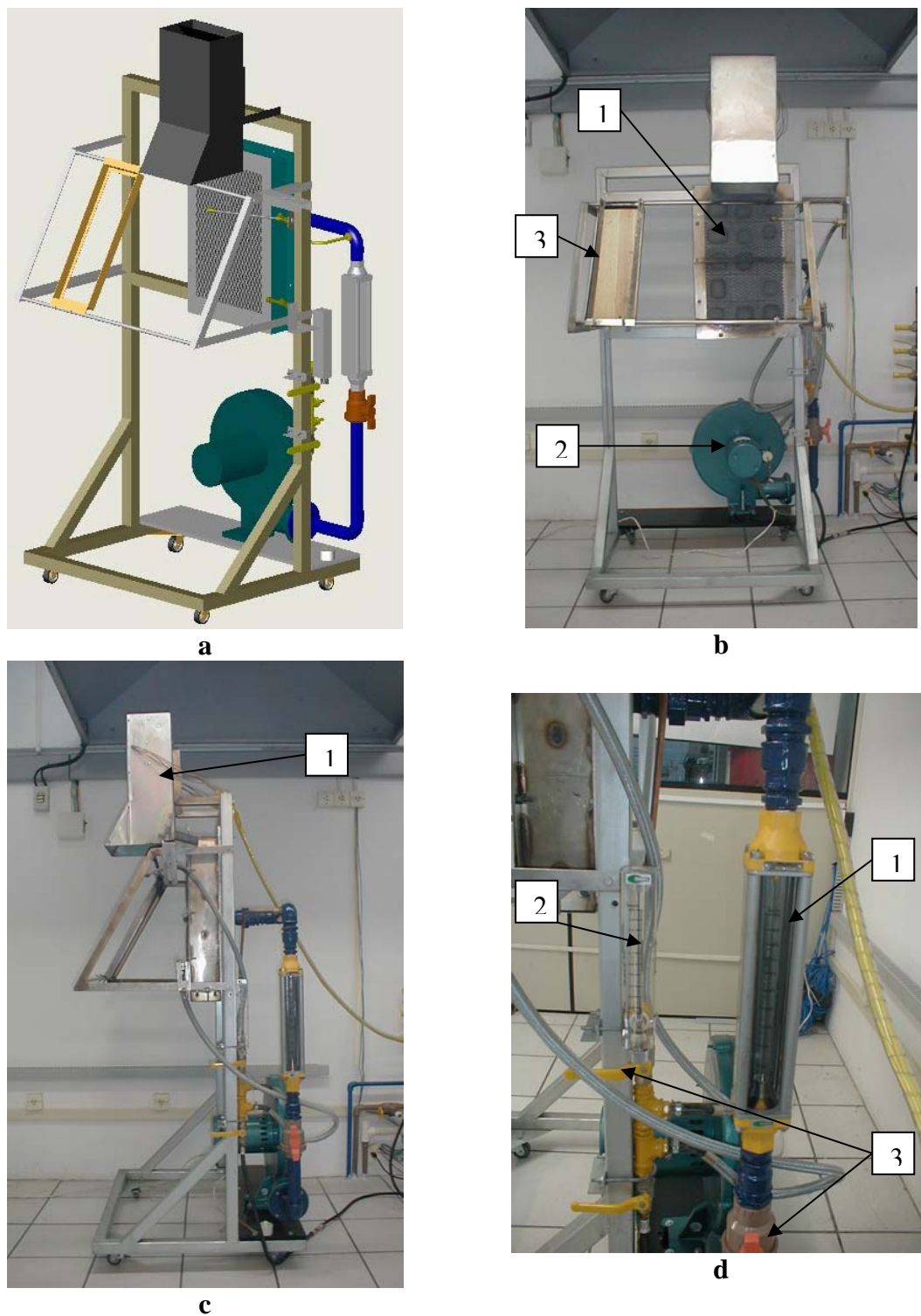
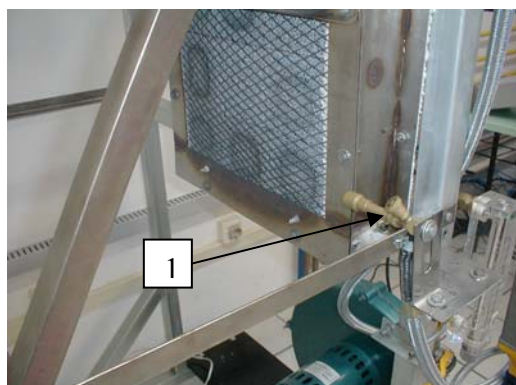


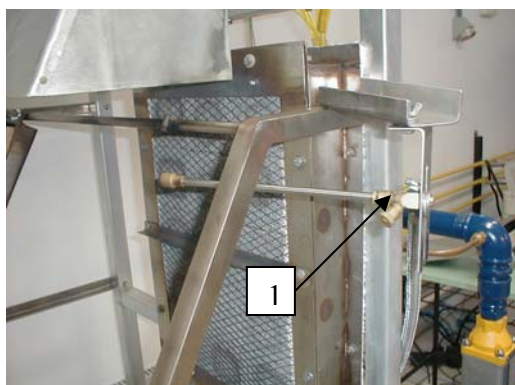
Figura 1. Bancada de teste de inflamabilidade superficial de materiais (norma ANSI/ASTM E 162 – 79): a) Projeto 3D, b) foto frontal, c) foto lateral e d) rotômetros.



a



b



c



d

Figura 2. a) Chama piloto de acendimento do painel, b) início do acendimento do painel c) chama piloto de ignição da amostra, d) início da ignição da amostra.

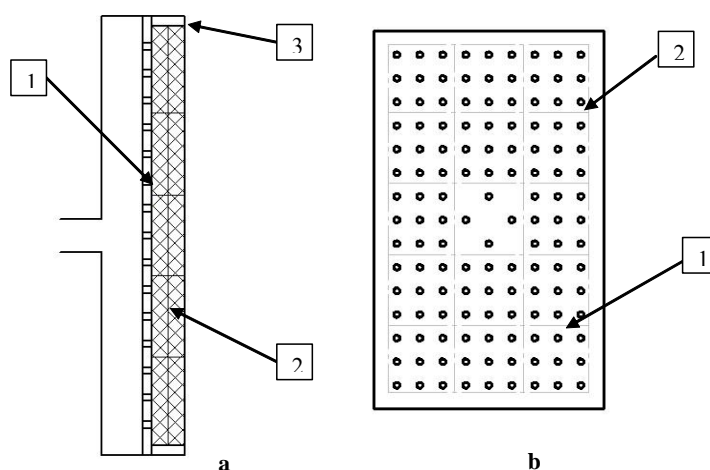


Figura 3. a) Esquema da vista lateral em corte do painel radiante, b) Desenho esquemático da placa perfurada.

A placa distribuidora de fluxo possui ao longo de toda a sua superfície vários orifícios com diâmetro de 8mm (Fig. 3b-1). Na parte central, em razão da posição do duto de alimentação de reagentes, diminuiu-se a quantidade de orifícios, promovendo uma distribuição mais homogênea do fluxo dos gases.

A pequena dimensão das cerâmicas disponíveis fez necessário a adição de uma tela de aço inox e uma travessa para manter as cerâmicas em sua posição. A tela tem também a função de proteger o operador em caso de retorno de chama.

#### 4. Resultados

A Fig. 4a mostra a foto do queimador poroso em funcionamento e a Fig. 4b a correspondente imagem em infravermelho. Picos de temperatura de até 880°C foram observados, sobretudo nas extremidades superior e inferior do painel. Mesmo assim, obteve-se uma razoável homogeneidade de temperatura superficial sendo que o valor médio foi de aproximadamente 670 °C.

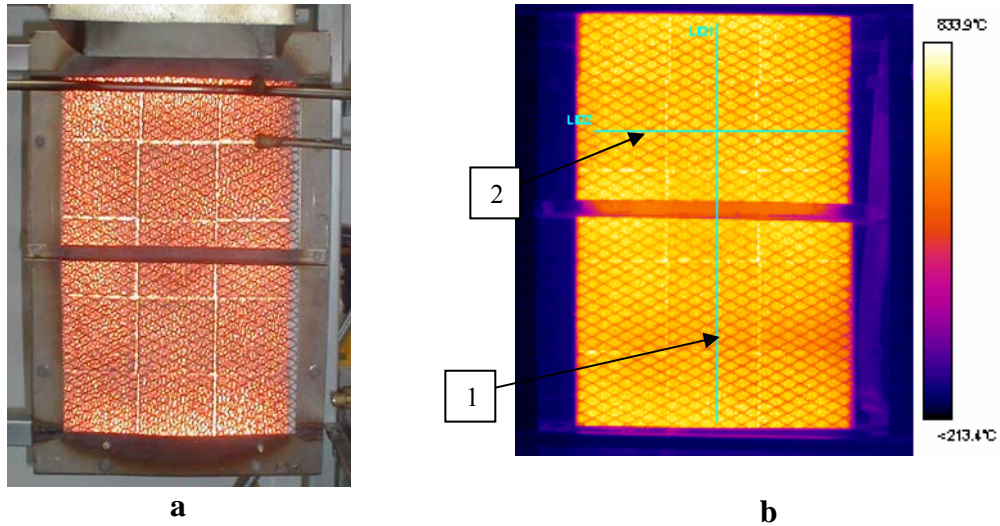


Figura 4. Painel radiante em operação: a) foto convencional e b) foto infravermelha.

Sobre a Fig. 4b foram traçadas duas linhas, uma vertical (1) e uma horizontal (2). A Fig. 5 permite visualizar as variações de temperatura na superfície do painel em cada ponto ao longo do comprimento das linhas 1 e 2.

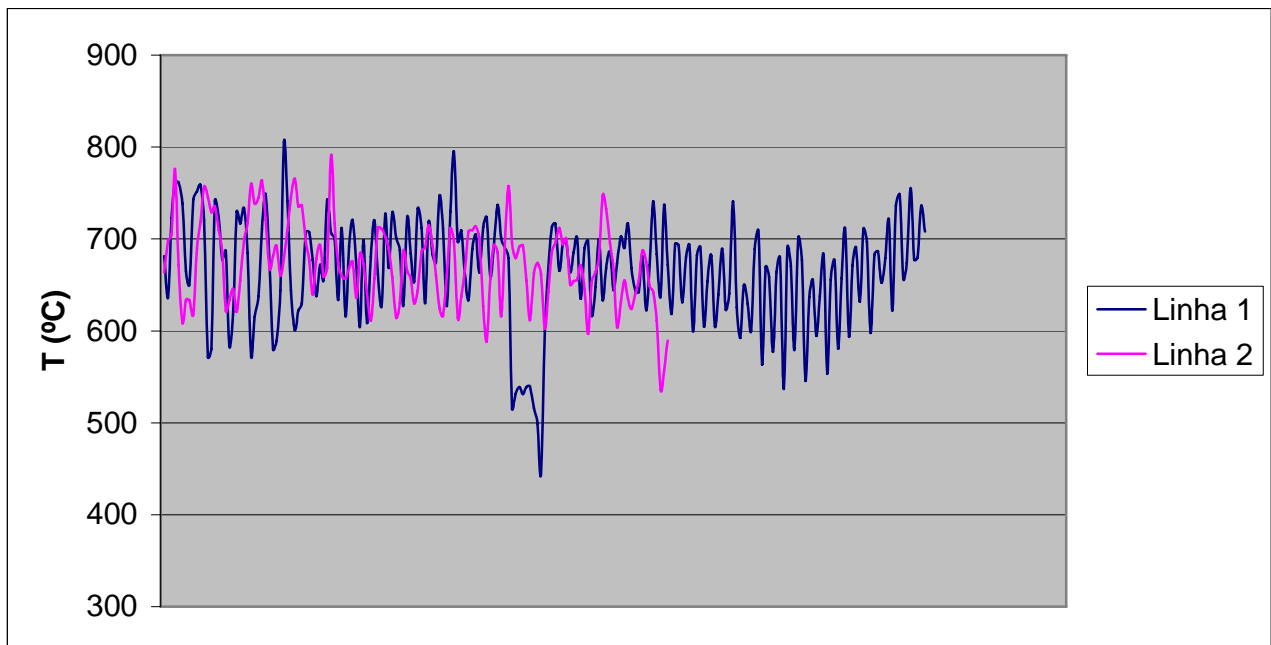


Figura 5. Perfil de temperatura do painel sobre as linhas 1 e 2.

Observa-se que a média se situa em torno de 670°C com uma variação de temperatura de  $\pm 80^\circ\text{C}$ . O ponto central indicando uma temperatura de 450°C corresponde à posição da travessa de suporte das placas cerâmicas como mostrado na Fig.4.

A Tab. 1 mostra alguns resultados de medições dos pontos de partida e de operação do painel, onde  $V_{GN}$  é a vazão de gás natural,  $V_{ar}$  é a vazão de ar,  $\Phi$  é a razão de equivalência,  $u_{ch}$  é a velocidade de chama (definida como a vazão total dividida pela área do queimador),  $T_s$  é a temperatura superficial média obtida pela câmera IV Flir, modelo ThermaCam SC500,  $S_r$  é a potência total do queimador e  $\eta_{rad}$  é a eficiência de radiação (definida como a razão entre a radiação emitida pelo queimador e a energia total liberada pela chama). Observa-se que elevadas eficiências de radiação são obtidas com o painel desenvolvido, o que implica em um baixo consumo de combustível para gerar a radiação de um corpo negro a 670°C.

Tabela 1. Dados do ponto de partida e do ponto de operação do painel radiante.

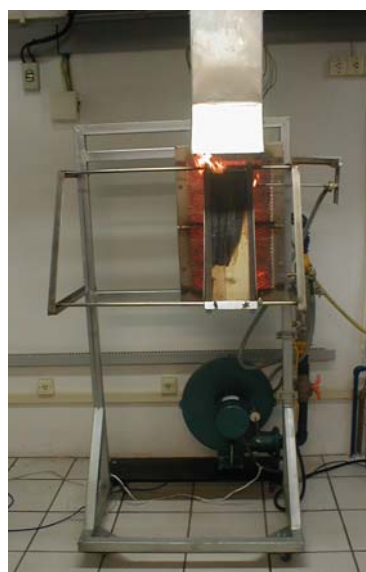
	$V_{GN}$ [Nm <sup>3</sup> /h]	$V_{ar}$ [Nm <sup>3</sup> /h]	$\Phi$	$u_{ch}$ [cm/s]	$T_s$ [°C]	$S_r$ [kW]	$\eta_{rad}$ [%]
Ponto de partida	3,2	38	0,80	8,3	860	35	39
Ponto de operação	1,2	27	0,42	5,7	670	13	49

O ponto de operação destaca-se por se encontrar abaixo do limite de inferior inflamabilidade para misturas de metano e ar ( $\Phi = 0,5$ ). As placas cerâmicas de carbeto de Silício (SiC) utilizadas (marca FOSECO) mostraram boa resistência à fadiga térmica imposta pela intermitências dos testes, não tendo sido observada severa degradação ou fraturas.

A seqüência de imagens da Fig. 6 mostra a realização de um teste preliminar com o objetivo de avaliar o funcionamento da bancada. Neste teste foi utilizada uma placa de madeira de pinus com 20 mm de espessura e área de 150 por 450 mm. O campo de radiação gerado pelo queimador propicia as condições necessárias para a propagação da chama através da superfície da amostra. Testes padronizados para a medição da inflamabilidade de superficial de materiais típicos de construção estão em fase de preparação.



**a**



**b**





Figura 6. Bancada em procedimento de teste.

## 5. Conclusão

Este trabalho apresentou o desenvolvimento de um queimador poroso radiante de elevada razão entre área radiante e espessura para ser utilizado como fonte de radiação térmica em testes de inflamabilidade superficial de materiais. de acordo com a norma ANSI/ASTM E 162 – 79 “Standard Test Method for Surface Flammability of Materials Using a Radiant Heat Energy Source” (1979), chegando-se às seguintes conclusões:

- O queimador poroso desenvolvido apresentou uma razoável homogeneidade de temperaturas, sendo que a temperatura superficial média de 670°C, requerida pela norma, foi obtida.
- O mecanismo fluidodinâmico de estabilização promovido pela adição da placa perfurada contribuiu para obtenção de um bom desempenho do painel. A placa de orifícios aumentou a faixa de estabilidade do queimador e promoveu uma distribuição satisfatória do fluxo da mistura de reagentes.
- Eficiências de radiação de 39 a 49% foram obtidas para a faixa de operação do painel.
- Chamas pobres, abaixo do limite de inferior inflamabilidade para misturas de metano e ar, foram obtidas ( $\Phi = 0,42$ ).
- As placas cerâmicas de carbeto de Silício (SiC) utilizadas (marca FOSECO) mostraram boa resistência à fadiga térmica imposta pela intermitências dos testes, não tendo sido observada severa degradação ou fratura.

## 6. Referências

- ANSI/ASTM E 162 – 79 “Standard Test Method for Surface Flammability of Materials Using a Radiant Heat Energy Source” (1979)
- Catapan, R.C., Pereira, F.M. and Oliveira, A.A.M., 2005, "Development of a Radiant Porous Burner with a Combined Thermal and Fluiddynamic Mechanism of Flame Stabilization", Proceedings of the 18th Congress of Mechanical Engineering, Ouro Preto.
- Howell J. R., Hall M. J., Ellzey J. L., 1996, “Combustion of hydrocarbon fuels within porous inert media”, *Prog. Energy Combustion Science*, Vol. 22, pp. 121-145.
- Khanna, R., Goel, R. and Ellzey, J. L., 1994, “Measurements of emissions and radiation for methane combustion within a porous medium burner”, *Comb. Sci. and Tech.*, 99:133-142.
- Pereira, F. M., Catapan, R. C., Oliveira, A. M., “Relatório de Análise Técnico-Econômica de Aplicações para Queimadores Porosos Radiantes”, Technical Report, UFSC, RedeGásEnergia, 2004.

### **DEVELOPMENT OF A RADIANT POROUS BURNER FOR SURFACE FLAMMABILITY TEST OF MATERIALS**

Rafael Hafemann Moser  
Department of Mechanical Engineering Federal University of Santa Catarina – Florianópolis/SC  
moser@labcet.ufsc.br

Fernando Marcelo Pereira  
Department of Mechanical Engineering – Federal University of Santa Catarina – Florianópolis/SC  
fernando@labcet.ufsc.br

Rafael de Camargo Catapan

Department of Mechanical Engineering – Federal University of Santa Catarina – Florianópolis/SC  
catapan@labcet.ufsc.br

Guilherme Brisot

Department of Mechanical Engineering – Federal University of Santa Catarina – Florianópolis/SC  
brisot@labcet.ufsc.br

Amir Antonio Martins de Oliveira Júnior

Department of Mechanical Engineering – Federal University of Santa Catarina – Florianópolis/SC  
amirol@emc.ufsc.br

**Abstract**

The development of a radiant porous burner panel with large surface area is reported. The panel was designed to operate at mean superficial temperatures between 600° C and 900° C. The radiant porous burner was built with silicon carbide ceramic foams of 10 ppi, totalizing a 0,15m<sup>2</sup> radiant area. Tests were conducted with premixed air and natural gas for equivalence ratios between 0,42 and 0,80. To stabilize the flame inside the burner, a perforated plate was used to distribute the mixture flow in the porous matrix. A radiant porous burner with reasonable homogeneous superficial temperature has been obtained. The results showed that the panel can operate at the powers up to 35 kW and achieve radiant efficiencies up to 49%.

**Keywords:** radiant panel, porous burner, surface flammability test.

## AN EMPIRICAL MODEL TO PREDICT THE MASS FLOW RATE OF SOLIDS IN A HIGH TEMPERATURE CIRCULATING FLUIDIZED BED SYSTEM

Rogério Ishikawa Hory - [rogerioh@fem.unicamp.br](mailto:rogerioh@fem.unicamp.br)

Jhon Jairo Ramírez Behainne - [jorabe@fem.unicamp.br](mailto:jorabe@fem.unicamp.br)

Araí Augusta Bernárdez Pécora - [arai@fem.unicamp.br](mailto:arai@fem.unicamp.br)

Leonardo Goldstein Jr - [leonardo@fem.unicamp.br](mailto:leonardo@fem.unicamp.br)

Department of Thermal and Fluids Engineering  
Faculty of Mechanical Engineering,  
State University of Campinas, P.O. Box 6122  
13083-970, Campinas, SP, Brazil

**Abstract.** A second-order empirical model to predict the mass flow rate of solids recirculating in a pilot scale circulating fluidized bed system (CFB) has been proposed. Tests were performed with quartz sand, 353 $\mu$ m mean diameter, at riser temperatures around 400 °C, using a L-valve as a recycle device. A central composite design (CCD) based on response surface methodology was programmed. The factors involved were gas fluidization velocity, solids inventory and air mass flow rate injected in the L-valve, and the response was the solids recirculation rate. Experimental runs showed that the solids inventory was the main factor influencing the solids recirculation, followed by the gas fluidization velocity and by the interaction between both factors. Further, it was evidenced that the mass flow rate of air injected in the L-valve had no effect, with a level of confidence of 95%. Results were consistent with CFB loop principles and they were in agreement with the solids flow rate range found in the literature, suggesting that the proposed model can also be applied to the CFB coal combustion process, using quartz sand as inert material and limestone as the SO<sub>2</sub> absorber, in the same experimental system.

**Keywords:** Circulating fluidized bed, L-valve, Solids circulation rate, Central composite design..

### 1. Introduction

Circulating fluidized beds (CFB) are utilized by numerous gas–solid contacting processes such as coal combustion, coal gasification and catalytic reactions. Normally, CFB systems work in the fast fluidization regimen, in which the gas superficial velocity into the riser overcomes the mean solids transport velocity (Bai et al., 1993). The main components of a CFB system are the riser, the cyclone, the downcomer (or standpipe) and the solid particles feeding device (Kim and Kim, 2002). Additionally, when operating at high temperatures, a non-mechanical valve, L, J or V type is used to get solids returned from the downcomer to the riser (Arena et al., 1998).

Solids mass flow rate circulating through a CFB system has been recognized as key operational parameter, which affects the mass and heat transfer phenomena inside the riser (Yan, et al., 2005). For instance, in combustion applications, the external solids circulation flux affects the process efficiency, and for this reason, suggested optimal values are in the range of 15 to 90 kg.m<sup>-2</sup>.s (Davidson, 2000). The literature presents several works related with the mass flux rate of solids in CFB systems, but most have been carried out in cold prototypes (Knowlton and Hirsan, 1978; Weinstein et al., 1983; Reiyng, et al., 1985; Matsen, 1988; Kim and Kim, 2002). These studies indicated the superficial fluidization velocity, solids inventory, aeration mass flow rate in the non-mechanical valve and solid particles properties as the most important factors on determining the solids mass flux through the standpipe, and some empirical correlations were proposed. Additionally, Knowlton (1988), Rhodes and Laussmann (1992), and Basu and Cheng (2000) showed that the effect of these parameters on the CFB hydrodynamics can be explained by a loop pressure balance analysis. However, in spite of the information obtained from previous searches, data reported in the literature for a CFB loop with L-type valve driving solids at high temperature are limited (Wang et al. 1995).

In the present work, an experimental study was carried out to determine the mass flux of recirculated solids in a bed of inert material (quartz sand), at a mean riser temperature of 400°C, and to establish the proper level of the main operational parameters for the steady operation of a CFB system. An empirical correlation to predict the external solids mass flux, to be applied in the combustion of a Brazilian coal, with limestone as a SO<sub>2</sub> absorber, was built. A technique for the design of experiments was used to reduce development time and overall cost for the process studied, being also an effective via to learn how systems or processes work (Montgomery, 1997).

## 2. Experimental

### 2.1. Apparatus and Material

Figure 1 illustrates the schematic diagram of the experimental assembly, composed by a riser (schedule 40S, AISI 310 stainless steel pipe of 102.26 mm internal diameter and 4,500 mm length), and a downcomer (schedule 40S, AISI 310, stainless steel pipe with 62.8mm internal diameter). The assembly was also composed by a tangential cyclone, a solids sampling valve, a solids feeding device and a L-valve.

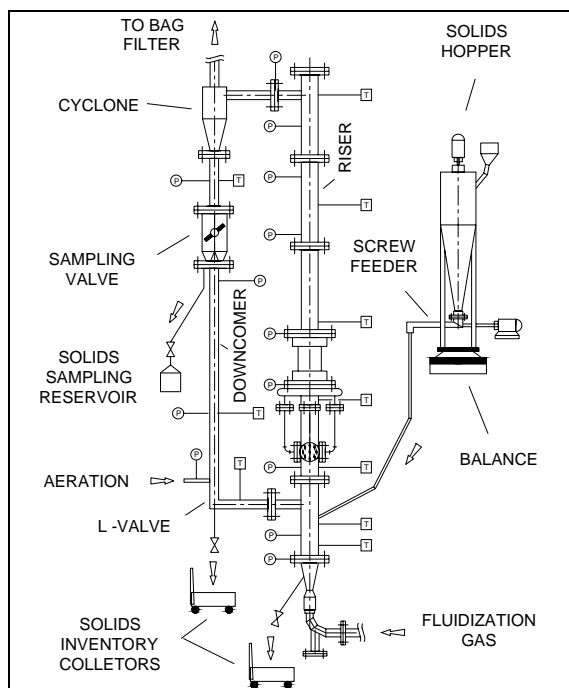


Figure 1 - Experimental CFB System Set-up

Solids are fed by a horizontal screw conveyor positioned at the bottom of a cylindrical hopper and both are positioned over a digital balance. The screw conveyor shaft is connected to a DC motor with rotation controlled by a frequency inverter, which in conjunction with a digital balance controls the solids being fed into the riser. Physical and fluidization properties of quartz sand are shown in Table 1.

Table 1 - Quartz sand properties.

$d_p$ ( $\mu\text{m}$ )	Distribution size (% mass)						$\rho_s$ ( $\text{kg/m}^3$ )	Geldart group	$u_{mf}$ <sup>(2)</sup> (m/s)	$u_{tr}$ <sup>(3)</sup> (m/s)
	<53 <sup>(1)</sup>	53-105	105-210	210-420	420-840	>840				
353	0.20	0.48	4.62	57.16	37.48	0.08	2700	B	0.06	5.78

<sup>(1)</sup> Sieve aperture range ( $\mu\text{m}$ ); <sup>(2)</sup> Wen and Yu (1966); <sup>(3)</sup> Bai *et al.* (1993) – 95.2 kPa, 400°C.

### 2.2. Experimental Design and Test Procedure

According to Montgomery (1997), conventional experimental procedure, which considers the analysis of only one factor each time is not appropriate for a multi-parameter experiment. Effects of operational parameters, such as the superficial gas velocity, solids inventory and L-valve aeration flow rate, are frequently discussed independently and provided with qualitative descriptions, not informing which parameter is really dominant or how much significant it is. Because the conventional strategy usually jumps to a conclusion merely based on a given operational condition, such a procedure is not sufficient to find out important potential interactions between parameters. On the other hand, when involving many factors, full factorial experiments would not be viable from the viewpoint of time and resources required. Also, they are not indicated to use when factors and response do not follow a linear relationship. In these cases, other alternatives, such as central composite designs are preferable to use.

A central composite design, just as the one shown in Fig. 2, for two factors, consists of a  $2^k$  factorial or “cube” points (coded as  $-1$  and  $+1$ ), where “ $k$ ” is the number of factors; axial points (also called “star” points) located at  $(+\alpha, 0)$ ,  $(-\alpha, 0)$ ,  $(0, +\alpha)$  and  $(0, -\alpha)$ , and center points positioned at  $(0,0)$ . The alpha value, which is used to define axial points, corresponds to  $\sqrt[3]{2^k}$ . In Figure 2, the points represent the experimental runs performed.

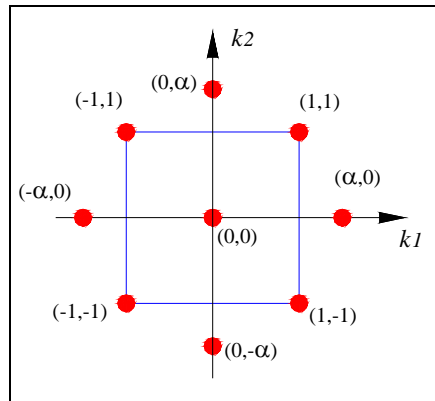


Figure 2 - Central composite design configuration for two factors ( $k_1, k_2$ ).

The factorial or “cube” portion and center points only serve as a preliminary stage where is possible to fit a first-order (linear) model, but still provide evidence regarding the importance of a second-order contribution or curvature. Adding axial points to the cube portion, an efficient estimation of the quadratic terms for a second-order model is achieved.

In the present work, a central composite design constituted of three controlled factors: solids inventory  $I_s$ , fluidization velocity  $u_f$ , and aeration mass flow rate in the L-valve  $\dot{m}_a$ , and one response variable, the mass flow rate of solids through the downcomer  $G_s$ , was programmed. Previous runs were done to define the appropriate operational range of the factors involved in the process. For the CFB system analyzed, the  $-1$ ,  $0$  and  $+1$  levels of each factor were respectively: 5, 6.5 and 8 kg for the solids inventory, 5, 6 and 7 m/s for the gas fluidization velocity, and 1.4, 2.0 and 2.6 kg/h for the aeration mass rate. Additionally, for the three factors being studied, the alpha value was  $\sqrt[3]{2^3} = 1.682$ . The sequence of the 17 runs performed, with three runs included at the center point, is presented in Table 2.

Table 2 - Experimental runs.

Run	Factor		
	Solids inventory $I_s$ (kg)	Fluidization velocity $u_f$ (m/s)	Aeration mass rate $\dot{m}_a$ (kg/h)
1	5.0 (-1 level)	5.0 (-1 level)	1.4 (-1 level)
2	5.0 (-1 level)	5.0 (-1 level)	2.6 (+1 level)
3	5.0 (-1 level)	7.0 (+1 level)	1.4 (-1 level)
4	5.0 (-1 level)	7.0 (+1 level)	2.6 (+1 level)
5	8.0 (+1 level)	5.0 (-1 level)	1.4 (-1 level)
6	8.0 (+1 level)	5.0 (-1 level)	2.6 (+1 level)
7	8.0 (+1 level)	7.0 (+1 level)	1.4 (-1 level)
8	8.0 (+1 level)	7.0 (+1 level)	2.6 (+1 level)
9	6.5 (0 level)	6.0 (0 level)	2.0 (0 level)
10	6.5 (0 level)	6.0 (0 level)	2.0 (0 level)
11	6.5 (0 level)	6.0 (0 level)	2.0 (0 level)
12	6.5 (0 level)	6.0 (0 level)	3.0 (+1.682 level)
13	6.5 (0 level)	6.0 (0 level)	1.0 (-1.682 level)
14	4,0 (-1.682 level)	6.0 (0 level)	2.0 (0 level)
15	6.5 (0 level)	4,3 (-1.682 level)	2.0 (0 level)
16	6.5 (0 level)	7,7 (+1.682 level)	2.0 (0 level)
17	9,0 (+1.682 level)	6.0 (0 level)	2.0 (0 level)

Fluidization air was provided by a roots blower. The air was heated in an electrical heater up to 200°C, and next by a petroleum gas burning heater, up to 650°C. Gas flow rate was measured by an orifice plate. Heated gas flowed through the riser during thirty minutes before solids were fed into the system. Just after the entire inventory was loaded, aeration of the L-valve started. The solids recirculation was confirmed by monitoring the pressure and temperature profiles of the system. Steady state was assumed to exist when the mean riser temperature stayed at 400±20°C during thirty minutes. Three solids samples were collected by diverting the particles during periods of 5, 10 and 20s. Solids were re-introduced into the system after sampling, so that the variation of the solids inventory was no more than ± 5% of the initial value.

### 3. Results and Analysis

Table 3 shows the average solids mass flow rate,  $G_s$ , obtained experimentally with the different sampling times (5s, 10s and 20s). An analysis of these results is presented next.

Table 3 - Solids mass flow rate - Experimental runs.

Run	$G_s$	Run	$G_s$
1	1.08	10	21.85
2	2.80	11	26.47
3	2.69	12	26.04
4	4.36	13	25.40
5	19.64	14	0.22
6	21.74	15	7.69
7	39.23	16	27.93
8	40.19	17	35.67
9	24.11	--	--

#### 3.1. Factor Effects on the Recirculated Solids Mass Flow Rate

Pareto’s chart, shown in Fig. 3, shows the solids mass flow rate estimated by a full statistical model based on a CCD experiment design, involving linear and quadratic main effects together with two-ways interactions. Results demonstrate that only linear terms have a significant influence of 95% of confidence level on the response for solids inventory, fluidization velocity and its interaction. These effects are positive, indicating that an increment in such values increases the solids mass flow rate.

Figure 3 also shows that the quadratic terms referred to the solids inventory and fluidization velocity were also important and had similar effects on the quantity of particles going down through the downcomer, but with values almost equal to the significant p-value (0.05). In this case, the two weak significant effects were negative, which induced the profile to a curvature, and specifically, to the presence of a maximum value on the response.

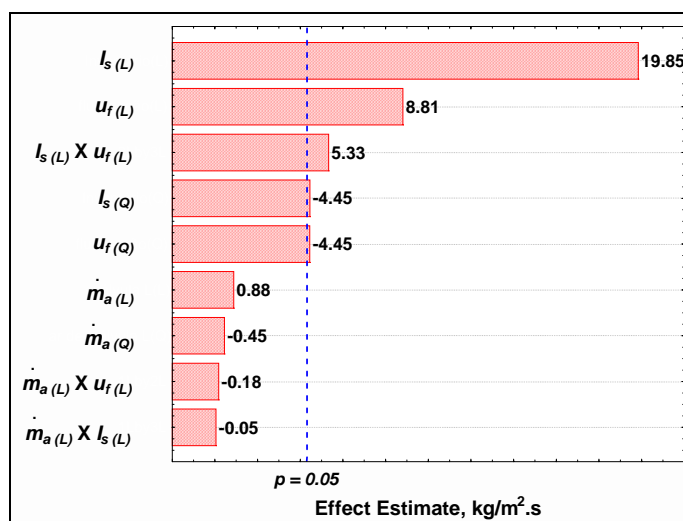


Figure 3 Effect and interaction estimate on the solids mass flow rate (absolute values)-Pareto’s chart. Subscripts: (L) - linear effect; (Q) - quadratic effect.

These results are in agreement with expectations and can be explained based on the three fundamental requirements for a CFB loop operation: mass balance, pressure equilibrium, and relationships between solids mass flow rate, fluidization velocity and riser height (Reiying, et al, 1985; Matsen, 1988, Knowlton, 1988; Rhodes and Lausmann, 1992, Basu and Cheng, 2000).

Mass balance implies that the quantity of solid particles in the fast bed, cyclone, L-valve and downcomer of the CFB loop must be equal to the amount charged into the system, also called solids inventory. Any increase in the quantity of solids in the riser must be accompanied by an equal decrease of the solid particles in the return leg. The solids mass distribution is also associated to the pressure equilibrium around the CFB loop, which basically can be expressed by Eq. (1), where the downcomer pressure drop ( $\Delta p_{DC}$ ) is considered as the dependent term:

$$\Delta p_{DC} = \Delta p_R + \Delta p_{CY} + \Delta p_{LV} \quad (1)$$

The riser pressure drop ( $\Delta p_R$ ) is determined by the mean concentration of the gas-solid suspension along the riser height, which is proportional to the ( $G_s/u_f$ ) ratio (Rhodes and Lausmann, 1992). The pressure drop through the cyclone ( $\Delta p_{CY}$ ) is proportional to the square of the inlet gas velocity and is usually not dependent on the solids mass flow rate (Matsen, 1988), while the L-valve pressure drop ( $\Delta p_{LV}$ ) is proportional to the solids mass flux through it (Arena et al., 1998).

The pressure drop through the downcomer ( $\Delta p_{DC}$ ) can be calculated by the modified Ergun equation, assuming that there is a packed bed in the return leg. Such hypothesis is admitted in many CFB configurations (Basu and Cheng, 2000):

$$\Delta p_{DC} = \left[ \frac{150(1-\varepsilon)}{\varepsilon^3} \cdot \frac{\mu_g (u_0 + u_s)}{(\phi_s \cdot d_p)^2} + \frac{1.75(1-\varepsilon)^3}{\varepsilon^3} \cdot \frac{\rho_g (u_0 + u_s)^2}{\phi_s \cdot d_p} \right] \cdot L_{PB} \quad (2)$$

### 3.1.1. Solids Inventory Effect

Considering the aspects above detailed, the experimental results were as expected. When the solids inventory was increased from 5 to 8 kg, maintained constant both the fluidization velocity and the L-valve aeration mass flow rate, the mass of solids in the CFB zones increased proportionally. As shown in Fig. 3, an average effect estimate of 19.85 kg/m<sup>2</sup>.s on the  $G_s$  value is attributed to the isolated variation of  $I_s$  in the experimental range tested.

The addition of mass in the riser implied in increased solids concentration and higher bed density at the bottom of the column, to preserve the pressure balance around the loop. Consequently, higher solids mass flux through the downcomer should be obtained. For the specific levels analyzed in the experiments and the used CFB configuration, the solids inventory was the more important factor affecting the solids mass flux in the downcomer.

### 3.1.2 Superficial Fluidization Velocity Effect

Experimental results showed that the fluidization velocity also has a significant effect on the solids mass flux. Figure 3 shows an average effect estimate of 8.81 kg/m<sup>2</sup>.s on  $G_s$  caused only by the variation of  $u_f$ . From Fig. 3 also was evident that, for the range of factors analyzed, the effect caused by  $I_s$  was more than twice the one due to  $u_f$ . For higher gas fluidization velocities it is expected that particle concentration at the top of the riser and the void fraction at the bottom of the column increase, due to the higher carrying capacity of the fluidization gas. However, a more detailed analysis must be done concerning the pressure balance, in order to know the magnitude of such effect. When the gas fluidization velocity and the solids inventory increase, while the aeration mass flow rate in the L-valve is maintained constant, a larger mass of particles is transferred from the riser to the downcomer and a higher packed bed is created in the return leg. Consequently, the solids hold up in the fast bed column tends to be continuously reduced if no more particles are transferred by the L-valve to the riser. In fact, for a CFB loop under such conditions, the increase of the solids mass flux going through the valve occurs due to a higher proportion of the aeration gas being forced through the L-valve horizontal leg, induced by the increase on the volumetric concentration of solid particles at the standpipe above the aeration point.

### 3.1.3 Aeration Mass Flow Rate Effect

The results showed that the air mass flow rate injected in the L-valve had no significant effect on the solids mass flux at 95% of confidence level. As can be seen in Fig. 3, a weak effect of 0.88 kg/m<sup>2</sup>.s on  $G_s$  was due to  $\dot{m}_a$  variations. Apparently such result contradicts the expected behavior of an L-valve, considering this factor is normally used to control the solids flow rate in CFB systems (Arena et al., 1998).

However, Knowlton (1988) suggested that an L-valve can also work in an automatic mode in which, an increase in the aeration mass flow rate, does not necessarily produce a positive variation of the solids flux, because the packed bed localized above the aeration point becomes fluidized. In this circumstance, the downcomer pressure loss attains its maximum value, and therefore, a further pressure drop in the return column, induced by increasing the solids mass flux passing through both the L-valve (below aeration point) and the riser, can not be achieved anymore.

### 3.2 Empirical Model

A second-order empirical model was proposed, based on the results obtained, to predict the external solids mass flux. Equation (3) expresses the fitted compact model, involving only the most significant factors,  $u_f$ ,  $I_s$ , and their interactions in the tests.

$$G_s = -111.386 + 21.624u_f + 8.326I_s + 2.906u_f \cdot I_s - 2.919u_f^2 - 1,342.I_s^2 \quad R^2 = 0.967 \quad (3)$$

for  $4.0 \text{ kg} \leq I_s \leq 9.0 \text{ kg}$  ;  $4.3 \text{ m/s} \leq u_f \leq 7.7 \text{ m/s}$  ; and  $1.0 \text{ kg/h} \leq \dot{m}_a \leq 3.0 \text{ kg/h}$

The associated response surface of Eq. (3) is shown in Fig. 4.

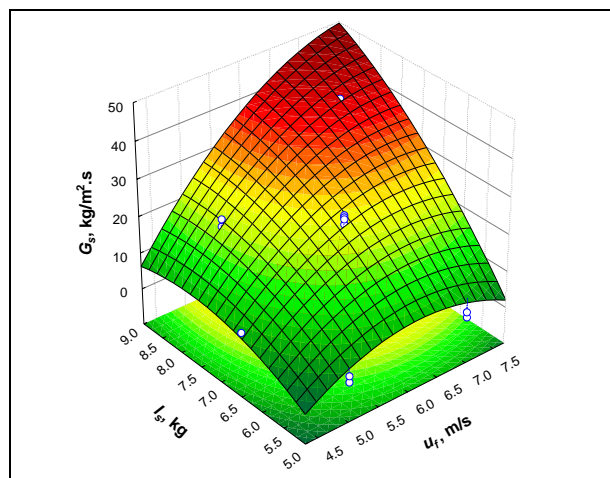


Figure 4 - Response surface of the compact model.

It can be seen that the response surface tends to a maximum value for the solid mass flux, in the analyzed region. Specifically, for the CFB system configuration and operational conditions studied, the maximum mass flux that can be attained is close to  $50 \text{ kg/m}^2 \cdot \text{s}$ , when the superficial gas velocity and the solid inventory tend to 8 m/s and 9.0 kg, respectively.

An statistical analysis, including fitting tests and residual studies, was carried out to check the validation of the compact model. The analysis showed that the lack of fit was not significant with 95% of confidence level (p-value=0.407), evidencing the absence of any important deviation in the prediction of the solids flux, as shown in Fig. 5.

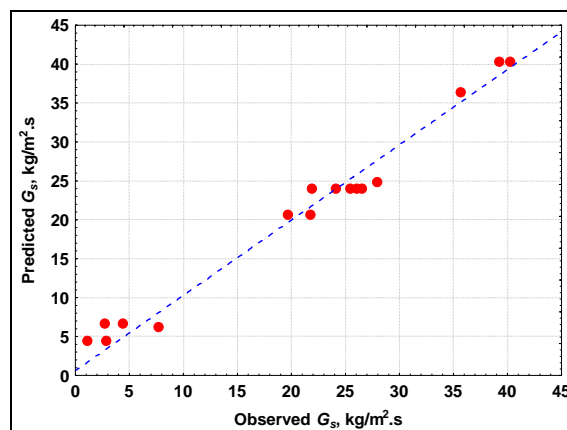


Figure 5 - Observed vs. predicted solids flux for the compact model.



Finally, a residual analysis of the fitted model to predict the solid mass flux was executed. Figure 6 shows that the residuals follow basically a normal distribution, with zero mean and constant variance. These results indicate that the proposed second-order correlation is satisfactory.

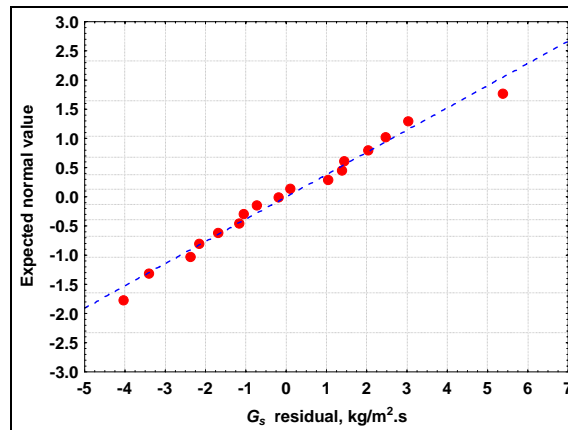


Figure 6 - Expected normal values vs. solids mass flux residuals  
Compact empirical model.

#### 4. Conclusions

The analysis of the experiments showed that the particles mass flux through the downcomer of a CFB system was mainly affected by the solids inventory and the gas fluidization velocity. On maintaining these operational parameters fixed, it was found that the air mass flow rate injected in the L-valve had no influence on the solids mass flux. Experimental results were in accord with the expected behavior of a CFB loop.

For quartz sand at high temperature, an empirical second-order model was developed, based on the experimental results from a CCD designed program of tests. The response surface obtained suggests that the solids mass flux in a CFB system tends to attain a maximum value.

Although the empirical model proposed gave a rough estimate of the particle mass flux level for the several solids inventories and gas fluidization velocity combinations, it may be considered an useful correlation, that can be used in studying the combustion of a Brazilian coal in the specific CFB system used, with quartz sand as the inert material.

As a final remark, one can say that the results were satisfactory and relevant, given the complexity of the process and that fewer experimental runs had to be carried out.

#### 5. Acknowledgement

The authors are grateful to CAPES and CNPq concerning the students scholarships and to FAPESP (Process 05/56621-7) for the financial support.

#### Nomenclature

$d_p$	Mean Sauter particle diameter (m)
$G_s$	Solids mass flow rate based on the cross-section of downcomer ( $\text{kg/m}^2\cdot\text{s}$ )
$I_s$	Solids inventory (kg)
$L_{PB}$	Packed bed height at downcomer (m)
$\dot{m}_a$	Air mass flow rate (kg/h)
$P$	Statistical significant level (-)
$R$	Correlation coefficient (-)
$u_f$	Superficial gas velocity in the riser (m/s)
$u_{mf}$	Minimum fluidization velocity (m/s)
$u_o$	Superficial gas velocity in the packed bed (m/s)
$u_s$	Solid particles velocity in the packed bed (Pa)
$u_{tr}$	Transport velocity (m/s)
$\rho_g$	Gas density ( $\text{kg/m}^3$ )
$\mu_g$	Gas viscosity ( $\text{kg/m}\cdot\text{s}$ )
$\Delta p_{CY}$	Pressure drop across cyclone (Pa)

$\Delta p_{DC}$	Pressure drop across downcomer (Pa)
$\Delta p_{LV}$	Pressure drop across L-valve (Pa)
$\Delta p_R$	Pressure drop across riser (Pa)
$\rho_s$	Solid particles density (kg/m <sup>3</sup> )
$\phi_s$	Particle sphericity (-)
$\varepsilon$	Voidage in the packed bed (-)

## 6. References

- Arena, U., Langeli, C.B., Cammarota, A., 1998, "L-valve Behavior with Solids of Different Size and Density", *Powder Technology*, Vol. 98, pp. 231–240.
- Bai, D., Jin, Y., Yu, Z., 1993, "Flow Regimes in Circulating Fluidized Beds", *Chemical Engineering Technology*, Vol. 16, pp. 307–313.
- Basu, P., Cheng, L., 2000, "An Analysis of Loop Seal Operations in a Circulating Fluidized Bed", *Transactions of the Institution of Chemical Engineers*, Vol. 78, pp. 991–998.
- Davidson, J. F., 2000. "Circulating Fluidized Bed Hydrodynamics", *Powder Technology*, Vol. 113, pp. 249–260.
- Kim, S.W, Kim, S.D., 2002, "Effects of Particle Properties on Solids Recycle in Loop-seal of a Circulating Fluidized Bed", *Powder Technology*, Vol. 124, pp. 76–84.
- Knowlton, T. M., 1988, "Non-mechanical Solids Feed and Recycle Devices for Circulating Fluidized Beds", *Proceedings of the Second International Conference on Circulating Fluidized Beds, Compiègne, France*, pp. 31–41.
- Knowlton, T. M., Hirsan, I., 1978, "L-valves Characterized for Solids Flow", *Hydrocarbon Processing*, Vol. 57, No. 3, pp. 149–156.
- Matsen, J.M., 1988, "The Rise and Fall of Recurrent Particles: Hydrodynamics of Circulation", *Proceedings of the Second International Conference on Circulating Fluidized Beds, Compiègne, France*, pp. 3–11.
- Montgomery, D. C., 1997, "Design and Analysis of Experiments", Ed. John Wiley and Sons Inc., New York, USA, 704 p.
- Reiying, Z., Dabao, C., Guilin, Y., 1985, "Study on Pressure Drop of Fast Fluidized Bed", *Fluidization '85: Science and Technology, Second China-Japan Symposium, Kunming, China*, pp. 148–157.
- Rhodes, M. J., Laussmann, P., 1992, "A Study of the Pressure Balance Around the Loop of a Circulating Fluidized Bed", *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, Vol. 70, pp. 625–630.
- Weinstein, H., Graff, R. A., Meller, M., Shao, M. J., 1983, "The Influence of the Imposed Pressure Drop Across a Fast Fluidized Bed", *Fluidization, Kunni, D. and Toei, R. (eds), New York*, pp. 299–306.
- Wang, X. S., Rhodes, M. J., Gibss, B. M., 1995. "Influence of Temperature on Solids Flux Distribution in a CFB Riser", *Chemical Engineering Science*, Vol. 50, No. 15, pp. 2441–2447.
- Wen, C.Y., Yu, Y. H., 1966, "A Generalized Method for Predicting the Minimum Fluidizing Velocity", *American Institute of Chemical Engineers Journal*, Vol. 12, pp. 610–612.
- Yan, A., Ball, J., Zhu, J., 2005. "Scale-up Effect of Riser Reactors (3) Axial and Radial Solids Flux Distribution and Flow Development", *Chemical Engineering Journal*, Vol. 109, pp. 97–106.

## AVALIAÇÃO DO POTENCIAL DOS CAROÇOS DE AÇAÍ PARA A GERAÇÃO DE ENERGIA

Jessé Luís Padilha

UFPA- Universidade Federal do Pará-Campus Universitário do Guamá -CT- LABEM ,CEP 66075-110  
[jessepadilha@hotmail.com](mailto:jessepadilha@hotmail.com)

Sergio Aruana Elarrat Canto

UFPA- Universidade Federal do Pará-Campus Universitário do Guamá -CT- LABEM ,CEP 66075-110  
[aruana@ufpa.br](mailto:aruana@ufpa.br)

Gonçalo Rendeiro

UFPA - Universidade Federal do Pará - Campus Universitário do Guamá -CT- LABEM, CEP 66075-110  
[rendeiro@ufpa.br](mailto:rendeiro@ufpa.br)

*Resumo. O Estado do Pará é o principal produtor de Açaí do Brasil. Depois de extraído o suco do Açaí, seu caroço de forma esférica não possui nenhuma aplicação significativa, estes resíduos são depositados em grande quantidade. Estudos feitos pelo grupo EBMA mostraram que seu poder calorífico é alto 4576 kcal / kg, possui 19% de carbono fixo, 79% de voláteis e 1% de cinzas, estes dados foram obtidos em base mássica seca. Estas informações qualificam o caroço do Açaí como um combustível de biomassa bom para ser usado em combustão ou processo de gaseificação. Resultados de uma pesquisa executada em Belém, onde foram levantadas as localizações dos pontos de vendas de Açaí, quantidade de resíduos disponíveis, onde cada local teve suas coordenadas registradas por um GPS. Todas estas informações foram adicionadas em um banco de dados e a um sistema GIS. Estas informações permitiram o cálculo anual da potencia elétrica disponível.*

*Palavras Chave: Açaí, sistema GIS, Potencia Elétrica, biomassa, banco de dados.*

### 1. A Energia na Região Amazônica

A Amazônia dispõe de um potencial hidro-energético invejável, conta com importantes hidrelétricas como: Tucuruí, no Pará, uma das maiores do mundo; Coaracy Nunes, no Amapá; Samuel, em Rondônia; e Balbina, no Amazonas, no entanto as linhas de transmissão são incompletas e deixam muitas localidades sem energia, fato que se pode constatar no mapa de distribuição de energia elétrica da ELETRONORTE exibido na figura 1. Percebe-se grandes áreas não atendidas pela rede de distribuição energia elétrica formal. Estas áreas em geral se concentram em torno das capitais. Criando grandes contrastes entre capitais e cidades interioranas.



Figura 1. Mapa da rede de geração e transmissão de energia elétrica gerenciadas pela ELETRONORTE, nota - se que os sistemas não se limitam aos estados da Região Norte

Eletrificar satisfatoriamente a Amazônia exige um planejamento energético complexo devido às condições impostas. A simples extensão da rede encontraria muitos inconvenientes, já que seria necessário transpor grandes extensões de floresta com rios largos para atender demandas que podem ser tão pequenas que não compensaria o investimento.

Como alternativas para atender os sistemas isolados conta-se com os grupos geradores diesel, entretanto, não são apropriados para locais distantes dos centros supridores, pois a deficiência no transporte compromete o suprimento de combustível e com isto, a operação. As alternativas dos sistemas de geração fotovoltaico e eólico, esbarram no valor do investimento e nas tecnologias que ainda estão se adequando à região. Já o uso da biomassa como fonte energética satisfaz grande parte destas exigências, pois é abundante regionalmente. Dentro desta proposta, o uso dos frutos do açaí, tidos como rejeitos da produção da bebida açaí atende não somente ao problema energético, mas também ao problema do descarte do rejeito, oferecendo sustentabilidade ao processo.

## 2. O Açaizeiro

O açaizeiro (*Euterpe Olerácea* Mart.) pertence à ordem dos Arecales, ao gênero *Euterpe* da família *Palmae*, é uma palmeira nativa da Amazônia, abundante nas áreas de várzeas daquela região, especialmente no estuário amazônico. Para os nativos, esta palmeira representa uma importante fonte natural de recursos. POULLET (1998) considera que o açaí é um dos produtos mais importantes da vida alimentar e cultural da população regional. ROGEZ (2000) vai além ao afirmar que o açaizeiro é a palmeira mais produtiva do ecossistema que abriga a população do delta do Amazonas. Para CALZAVARA (1972), as duas mais importantes palmeiras brasileiras, sob o ponto de vista comercial, são *Euterpe Edulís* Mart. e *Euterpe Olerácea* Mart.

O açaí é um alimento abundante, barato, de consumo diário e tradicional. Tornou-se um símbolo da cultura nortista e está presente no cotidiano tanto do ribeirinho como do cidadão, independente das posses. Esta influência é refletida na economia, nas paisagens, nos cartões postais, nos dizeres populares, nas manifestações artísticas, nas estratégias de ocupação do solo.

MATTOS et al (1999) CALZAVARA, LOPES e SOUZA (1982), RÊGO (1993), NOGUEIRA (1997), MOURÃO (1999) e outros autores constataram a multiutilidade do açaizeiro apresentadas Tabela 1

Componentes		Produtos e sub – produtos
Gema Apical		Palmito para alimentação humana e ração animal
Folhas		Cobertura de casas, parede, cesto, tapetes, chapéu, esteira, adorno caseiro, celulose, ração animal, adubo orgânico, cobertura morta e sombreamento de sementeiras e peçonhas.
Frutos	Polpa	Alimento, suco, creme, sorvete, licor, geléia, mingau, pudim, produção de álcool, pigmento para tintas Produção de energia.
	Caroço	Adubo orgânico, carburante, aterro.
Cacho (inflorescência)		Vassoura, artesanato, adubo orgânico.
Estipe (caule)		Construção civil, construções rurais, lenha, adubo orgânico, celulose e isolamento térmico, pequenas armadilhas.
Raízes		Vermífugo
A planta		Paisagismo

## 2.1. A Sustentabilidade da Cultura do Açaí

O açaizeiro é uma palmeira cespitosa, ou seja, capacidade de emitir brotações, ou perfilhos, que surgem na base da planta crescendo em touceiras, figura 2. Esta característica dá a planta uma grande capacidade de regeneração, facilitando a sua exploração de forma sustentável. Na literatura é encontrado que uma touceira chega a ter até 25 plantas, em diferentes estágios de crescimento, variando em função das condições ambientais. ROGEZ (2000) relata a existência de açaizeiros com até 45 perfilhos por touceiras.

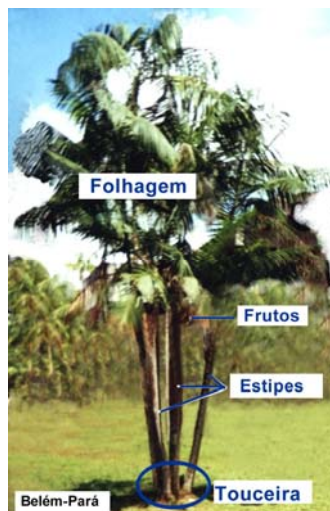


Figura 2. O Açaizeiro (Euterpe Olerácea)  
Fonte: Canto,S.A.E. 2001

Os açaizeiros são dominantes nas regiões de várzea e quando crescem formam açaizais nativos densos e quase homogêneos (figura 3). Estima-se que o domínio se estenda por 10.000 km<sup>2</sup> principalmente no estuário Amazônico (figura 4). Espera-se que diante das perspectivas de crescimento dos mercados interno e externo tendem a aumentar o interesse de agricultores e grupos empresariais e conseqüentemente as áreas de cultivo.



Figura 3. Ambiente nativo dos açaizeiros  
Fonte: Canto,S.A.E. 2001



Figura 4. Local de ocorrência do açaizeiro (Euterpe Olerácea) no Brasil <sup>1</sup>

<sup>1</sup> Fonte:MOURÃO, L. (1999)

O açaizeiro produz praticamente o ano inteiro (ROGEZ, 2000). Entretanto, cada ecossistema apresenta condições naturais diferentes de produção de frutos no açaizeiro (MOURÃO, 1999), caracterizando safras. POULLET (1998) indica que no Estado do Amapá a principal época de frutificação acontece entre os meses de janeiro a junho, enquanto JARDIM e STEWART (1994) e outros autores que estudaram o assunto nas microrregiões próximas a Belém do Pará, concluíram que a maior produção ocorre nos período da estação menos chuvosa na região, ou seja, entre julho a dezembro.

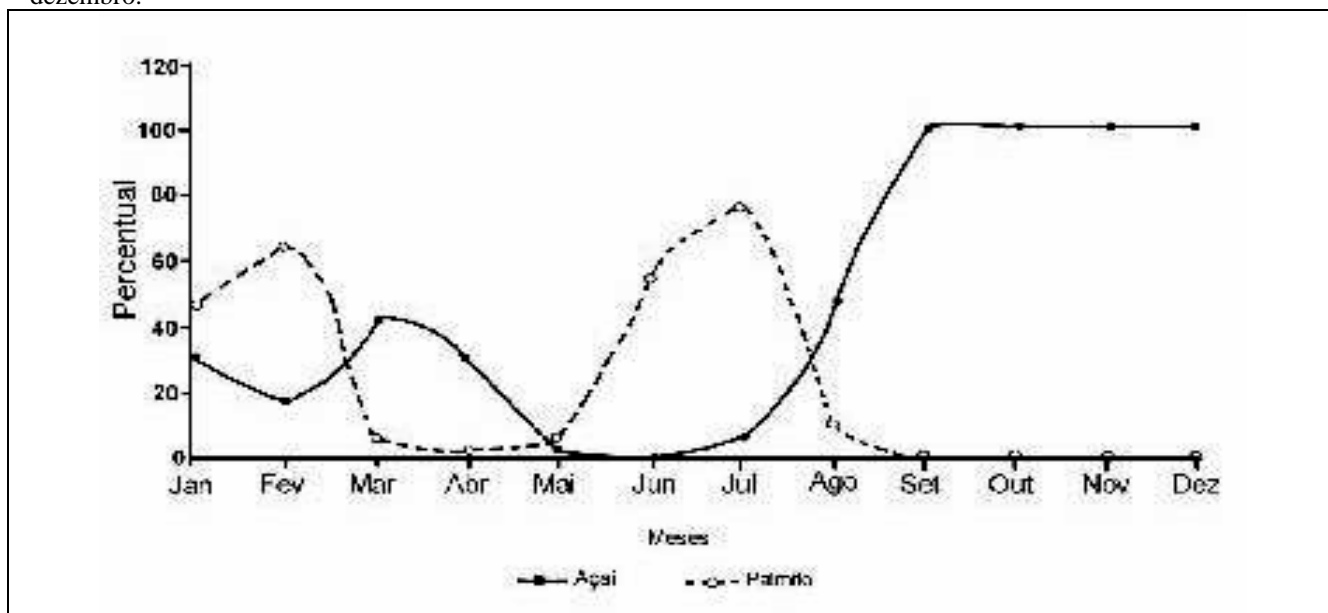


Figura 5. Variação na produção mensal de frutos e palmito (%) comercializados na Feira do Açaí, município de Belém. <sup>2</sup>

Uma palmeira pode gerar até 120 kg de frutos por safra, dependendo do manejo realizado. Como exemplo, a ilha das Onças, próximo de Belém, onde os ribeirinhos manejam os açaizais para atender os mercados de Belém. A produção média é de 1.158 kg /ha (SHANLEY; CYMERYYS e GALVÃO, 1998).

## 2.2. Frutos

O fruto, figura 6, além de ser o produto mais importante do açaizeiro, também é o interesse principal deste trabalho. Da polpa dos frutos obtém-se o suco de açaí. Um produto que é consumido como alimento, de diversas formas. A produção de polpa varia em torno de apenas 5 a 15% do volume do fruto, evidenciando uma grande quantidade de resíduos gerados no processamento, que pode ser empregado para a geração de energia térmica e elétrica.

<sup>2</sup> Fonte: JARDIM, M. (1996)

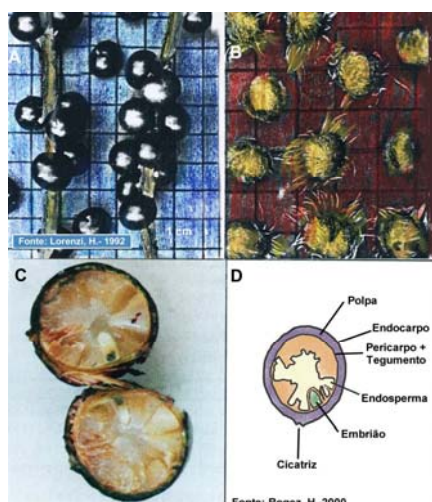


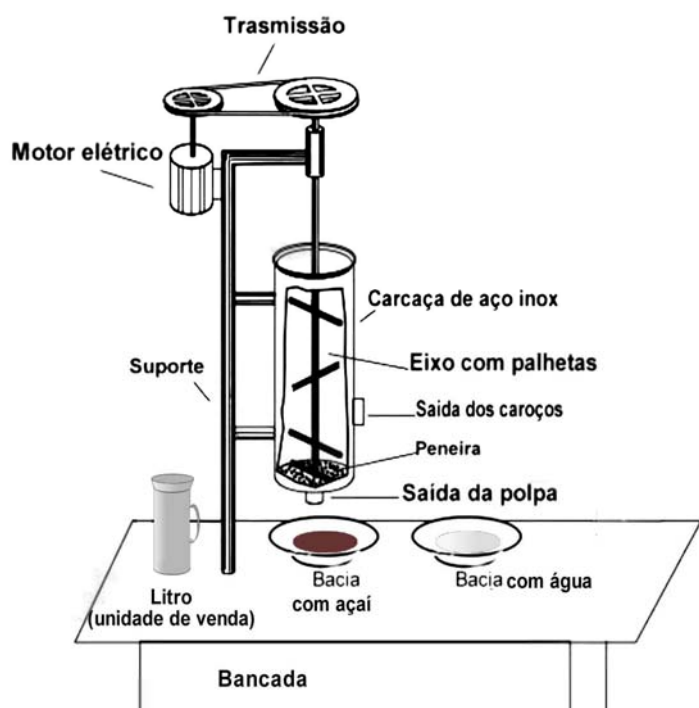
Figura 6. A) Frutos *in natura*, B) Caroços despolpados, C) Caroço seccionadas e D) Esquema da secção.

### 2.3. Os rejeitos das Amassadeiras como fonte de energia

A rápida deterioração exige que o açaí seja processado e consumido em horas. Desta maneira, o processamento e a venda são urbanos, em pontos conhecidos como *amassadeiras*. (figuras 7, 8 e 9). É possível encontrá-las tanto em subúrbios como nos centros das cidades. As amassadeiras têm estrutura similar, contando com uma máquina elétrica típica (figura 7), que é operada por um *maquineiro*. Numa explicação simplista, a máquina provoca a fricção dos caroços, com adição de água para dar a consistência desejada ao líquido. O rejeito é descartado. Considerando que o processamento é feito em áreas urbanas, o rejeito geralmente é tratado como lixo urbano, trazendo transtorno para a coleta.

As amassadeiras realizam uma atividade comercial informal. São populares e tão numerosas que o controle é difícil, tanto que não se tem conhecimento do número exato dos pontos, mas alguns autores estimam que existam mais de 2.000 amassadeiras de açaí somente em Belém, com produção total em torno de 180 t/dia de polpa. Se for considerada a exportação, este número será muito maior. GUIMARÃES (1999) estima que a Ceasa do Rio de Janeiro receba 2.400 toneladas /ano de polpa de açaí vindas somente do Pará. Considerando que a polpa representa apenas 5% a 15 % pode se ter uma idéia da quantidade de rejeito gerado.

A produção de um maquineiro varia bastante em função da safra, nos dias da semana e do tipo de açaí vendido. Baseado nas entrevistas realizadas com maquineiros, a média de consumo é de dois sacos de 60 kg por dia, alguns chegam a consumir até seis sacos nos finais de semanas.



Fonte: Canto,S.A.E. 2001

Figura7. Máquina elétrica de açaí, em perspectiva, com corte parcial na carcaça



Figura 8. Açaí do tipo grosso no momento do beneficiamento

Fonte: Canto,S.A.E. 2001



Figura 9. Amassadeira de açaí Típica

Fonte: Canto,S.A.E. 2001

Como a produção de açaí é dispersa, o aproveitamento dos rejeitos para geração de energia como foi previsto no projeto Iaçã, do qual este trabalho está vinculado, irá requerer a identificação, a quantificação, o transporte e a concentração do material nas usinas termelétricas propostas para gerar energia. Desta maneira, a estratégia de gestão montada empregou um banco de dados para armazenar os dados coletados sobre as amassadeiras, principalmente: produção e localização que foram registradas através de coordenadas georeferenciadas.

O banco de dados também foi alimentado com informações sobre:

- Especificações técnicas dos equipamentos empregados
- Dados de análise laboratorial da biomassa

### 3. A Simulação Computacional do Sistema de Co-geração de Energia Elétrica

O tratamento de dados permitiu substanciar a obtenção de informações sistematizadas como:

1. Simulação computacional do funcionamento de uma planta de geração de vapor nas condições da tabela 2

Tabela 2. Constantes utilizadas nos cálculos

Volume da sacas	0,032 m <sup>3</sup>
Índice de Aproveitamento	100%
Densidade à Granel	723,14 kg / m <sup>3</sup>
PCI	2738,8007 kcal/kg
Rendimento da Caldeira	85 %
Entalpia do Vapor	666 kcal/kg
Consumo Específico da Turbina	10 kg/kW

2. Simulações computacionais do funcionamento de uma planta a vapor para geração de energia com turbinas a vapor, utilizando ciclo Reankine. A 21 kg de vapor/hora
3. Informação do índice de aproveitamento (%): quantidade de matéria prima que é aproveitado (produzido) para o calculo da produção de energia.



4. Informação da densidade à Granel ( $\text{kg/m}^3$ ) (-é a massa específica por unidade de volume das amostras de biomassa)
5. Informação do PCI ( $\text{kcal/kg}$ ): ( o poder calorífico inferior da biomassa )
6. Informação do rendimento de uma caldeira, é indicado em termos de percentagem, e estabelece a relação entre a energia gasta pela (ou fornecida) à caldeira e a energia que ela consegue produzir.
7. Informação da Entalpia do Vapor ( $\text{kcal/kg}$ ): é dada em função da pressão de operação da turbina
8. Consumo Específico da Turbina ( $\text{kg/kW}$ ): quociente entre poder calorífico do combustível consumido e a quantidade de energia elétrica produzida no intervalo de tempo considerado

#### 4. Procedimentos de Simulação

Para os cálculos de simulação, foram elaborados códigos computacionais utilizando a linguagem Visual Basic, tomando como base os parâmetros de entrada da tabela 02 Os dados de saída da simulação para cada amassadeira pesquisada foram:

- Volume da sacas produzidas por dia pelas amassadeiras ( $\text{m}^3$ ): quantidade média em volume de uma saca de açaí
- Cálculo do vapor para geração de energia (ano, mês, dia, hora):vapor destinado à produção de Energia
- Cálculo da densidade energética: densidade energética é a quantidade de energia por unidade de volume de um combustível.
- Cálculo da potência elétrica gerada: é a potência gerada pela biomassa energética, que pode ser transformada em energia elétrica.

#### 5. Sistema de informação geográfica (GIS)

Esse sistema consiste na implementação de dados georeferenciados, com o intuito de obter a localização das amassadeiras pesquisadas, utilizando um aparelho de localização por coordenadas georeferenciados (GPS). A partir dos dados de georeferenciamento, foram gerados mapas do município de Belém e seus bairros contendo informação de bairros, hidrografia etc., além da interface com as informações do banco de dados do Microsoft Access.

Para esta aplicação, foi utilizado o Software ARC VIEW 3.2a, devido fácil manipulação dos dados e interface simples com o banco de dados Microsoft Access, a partir de consultas geradas no mesmo, onde essas consultas consistem em dados filtrados do banco de dados “banco açaí”.

## 6. Resultados

Dos 72 bairros pesquisados, 51 apresentaram potencial para gerar energia elétrica através de biomassa energética. O levantamento do número de proprietário, quantidade de sacas produzidas por dia e o potencial elétrico de geração são mostrados nos gráficos 1, 2 e 3.

Determinação da densidade das unidades produtoras (amassadeiras) na cidade

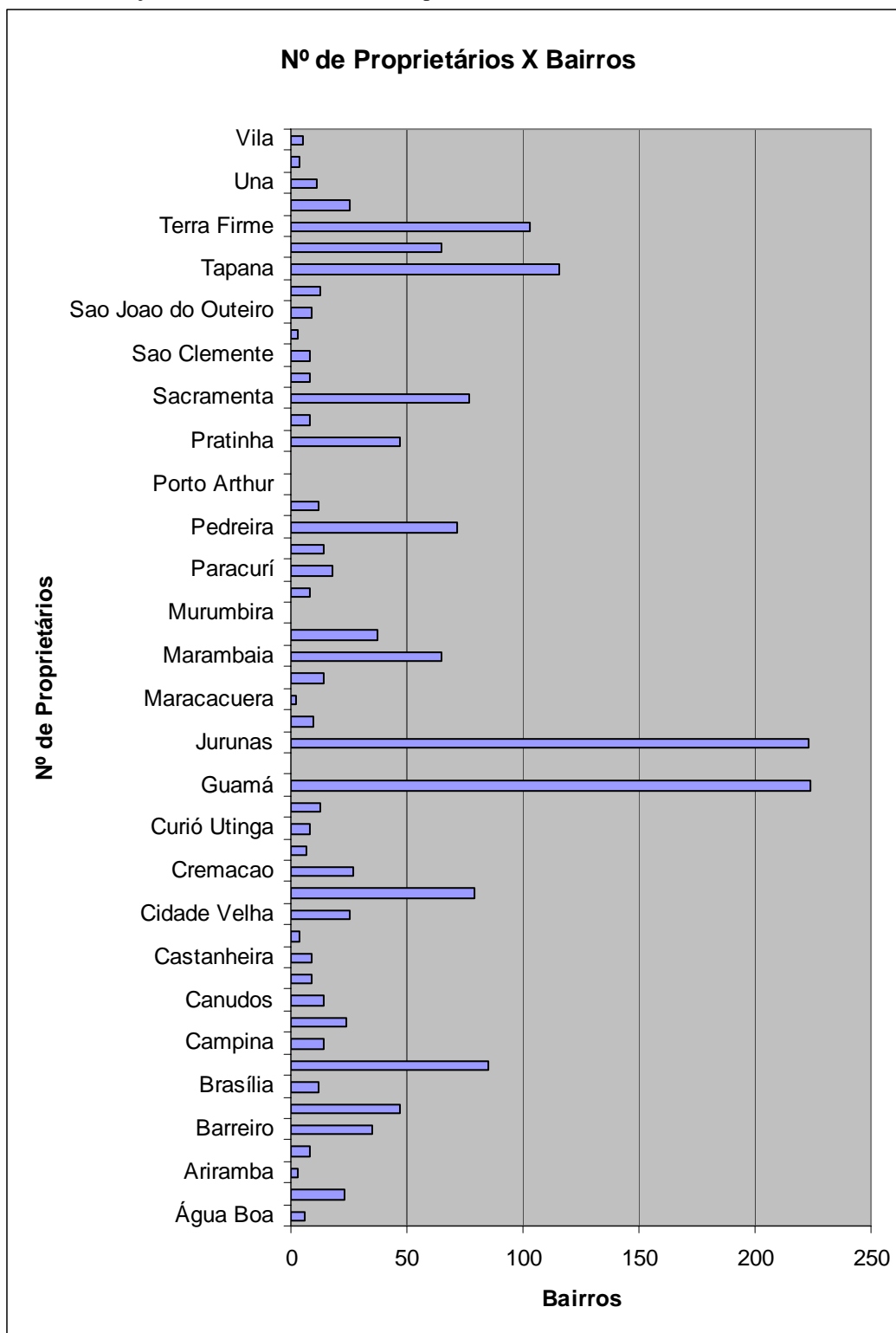


Gráfico 1. Numero de Proprietários por Bairro

Numero de sacas de resíduos produzidas por dia pelas “amassadeira” (pontos de venda)

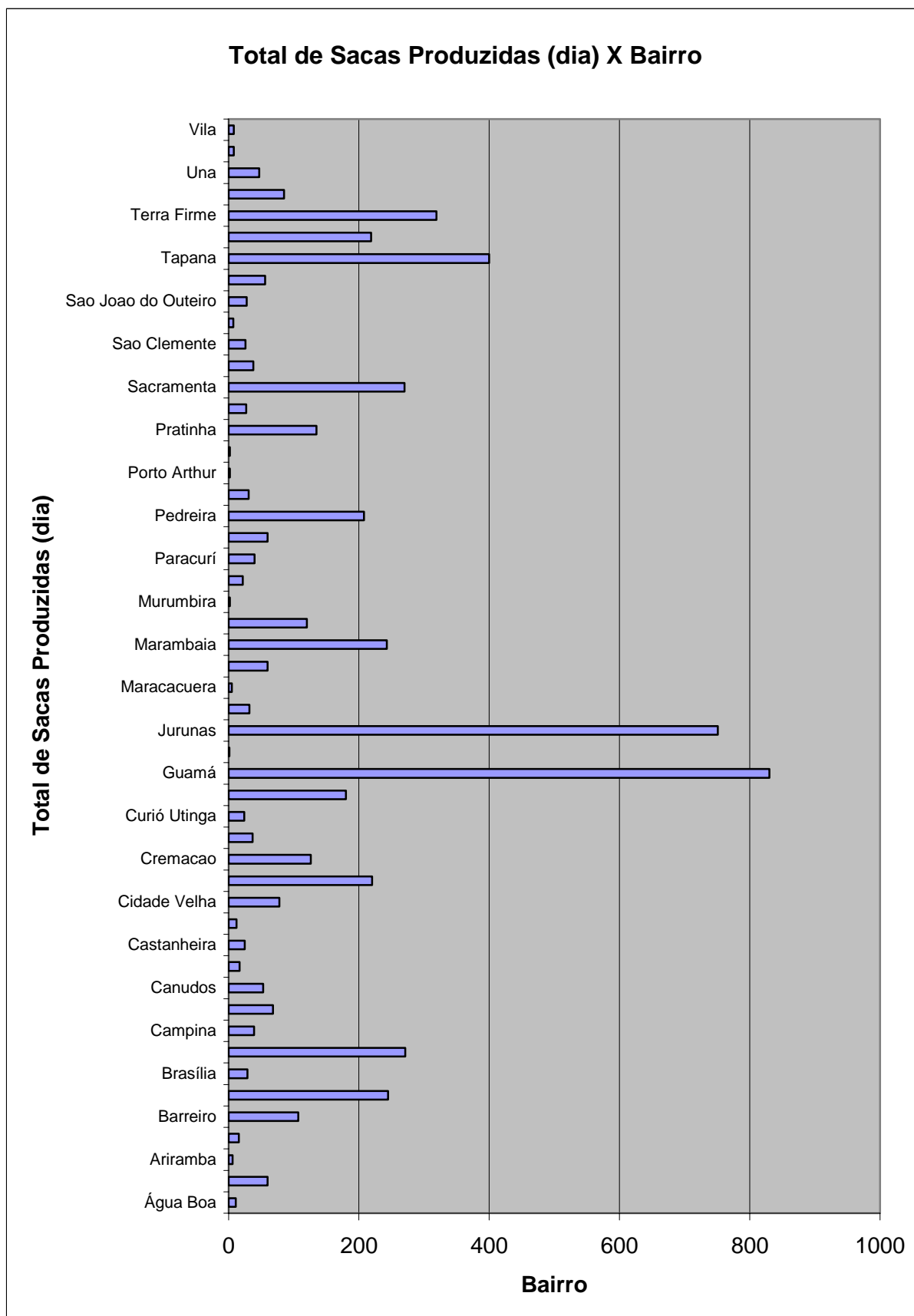


Gráfico 2. Número de sacas por Bairro

Quantificação do potencial energético global e por bairro em consequência dos resíduos.  
Simulação da geração de energia elétrica por ponto de venda identificado, levando em conta o volume de sacas de açaí produzidas.

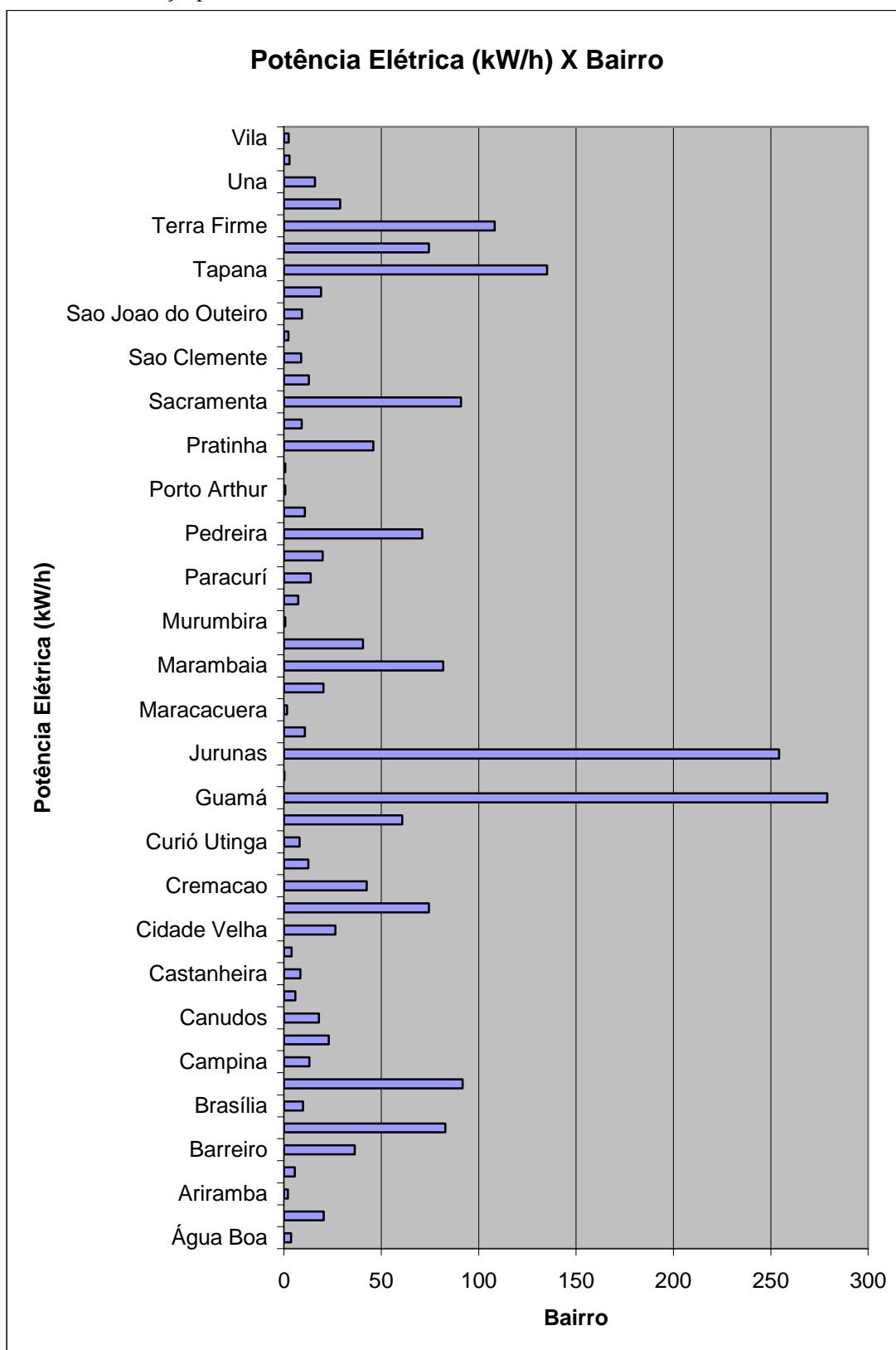


Gráfico 3. Potencial Elétrico de Geração (kW) por Bairro

## 7. Conclusões

Foram levantados ao todo 1657 pontos de venda de açaí, gerando um volume de 5707 sacas gerando aproximadamente 2 MW de potência para utilização de energia elétrica através de um ciclo Reankine.

Os bairros do Jurunas e Guamá foram os que apresentaram o maior potencial seguido pelos bairros do Tapanã e da Terra Firme, isto se deve a alta concentração de pontos de vendas nestes bairros.

Bairro como Bengui e Cremação apesar de possuírem poucos pontos de venda de açaí, se sobressaem sob os demais, pelo fato de pequenos pontos possuírem alta produtividade, caracterizando empresas de açaí.

O registro dos dados em banco de dados permitirá a elaboração de outras simulações, dada a facilidade de manipulação das informações oferecidas por este tipo de ferramenta. Tornando uma importante referência para pesquisas futuras e gestão dos resíduos para a geração de energia.

Este estudo demonstrou que há uma enorme possibilidade de aproveitamento desta biomassa para geração de energia elétrica, principalmente aos sítios limítrofes a região metropolitana de Belém que são ainda desassistidas pela concessionária local.

## Referências

- CALZAVARA, B. B. **As possibilidades do açazeiro no estuário Amazônico** Belém-PA: Boletim FCAP. vol 5, 103p, 1972
- CALZAVARA, B. B; LOPES A. V. F. e SOUZA, J. M. S. de. **Aspectos econômicos do Açazeiro** Belém-PA: SUDAM-Departamento. de Setores Produtivos. 1982
- CUNHA A. C. da C e JARDIM, M. A. G. Avaliação do potencial germinativo em açaí (Euterpe Olerácea Mart.). Variedade Preto, Branco e Espada. **Boletim do Museu Paraense Emílio Goeldi - Paraense Emílio Goeldi - Botânica**, Belém-Pará, vol 12 nº 1, p.55/60, julho/ 1995.
- EBMA- Grupo de Energia, Biomassa & Meio Ambiente da Universidade Federal do Pará. [www.cultura.ufpa.br/ebma](http://www.cultura.ufpa.br/ebma). Acesso em: 04 de outubro de 2006.
- ELETRONORTE. **Relatório de Operação dos sistemas 1999**. disponível em: <http://www.eln.org.br>. Acesso em: 20 de abril de 2000
- JARDIM, M. A. G. e CUNHA A. C. da C. Usos de Palmeiras em uma Comunidade ribeirinha do Estuário Amazônico. **Boletim do Museu Paraense Emílio Goeldi - Paraense Emílio Goeldi - Botânica**, Belém-Pará, vol 12 nº 1, p. 69/76 julho/ 1998a.
- JARDIM, M. A. G. e KAGEYAMA P. Y. Fenologia de floração e frutificação em população natural de açazeiro (Euterpe Olerácea Mart.) no Estuário Amazônico. **Boletim do Museu Paraense Emílio Goeldi - Botânica**, Belém-Pará, vol 10 nº 1, p77/82 julho/ 1994.
- JARDIM, M. A. G. e STEWART P. J. Aspectos Etnobotânicos e Ecológicos de Palmeiras do Município de Novo Airão, Estado do Amazonas, **Boletim do Museu Paraense Emílio Goeldi - Botânica**, Belém-Pará, vol 10 nº 1, p 69/76 julho/ 1994
- MATTOS, M. M. de et al. **A Extração de Palmito de Açaí no Estuário Amazônico: Extrativismo Sustentável ou Atividade Predatória?** Belém-PA: MPEG, 1990, 18p. Relatório técnico.
- MOCHIUTTI, S e QUEIROZ J.A.L. Estrutura e Manejo de Sistemas Agroflorestais Tradicionais do Estuário Amazônico. **Congresso Brasileiro de Sistemas Florestais, 3, Resumos Expandidos 2000**, Manaus-AM. p. 360/362.
- MOURÃO, L. **Do açaí ao Palmito: Uma História Ecológica das Permanências, Tensões e Rupturas no Estuário Amazônico**. Belém-Pará, 1999. 355p. Tese de doutorado em Desenvolvimento Sustentável Núcleo de Altos estudos Amazônicos-NAEA, UFPA-Universidade Federal do Pará.
- MURRIETA, S. S; BRONDÍZIO, E. e SIQUEIRA, A. Estratégias de Subsistência de Uma População Ribeirinha do Rio Marajó-Açu, Ilha do Marajó. **Boletim do Museu Paraense Emílio Goeldi - Antropologia**, Belém-Pará, vol 5 nº 2, p. 147/163, dez. 1989
- NOGUEIRA, O. L. **Regeneração de Açazeiros Nativos de Várzea Submetidos ao Extrativismo do Palmito**. Belém PA ,1997. 139 p. Tese apresentada para a obtenção do grau de doutor em Ciências biológicas-UFPA- Universidade Federal do Pará, MPEG-Museu Paraense Emílio Goeldi e EMBRAPA-Empresa Brasileira de pesquisa Agropecuária.
- PADILHA, J L & LEÃO, A. O. **Diagnóstico do Potencial energético das Empresas Madeireiras Estimativas dos Custos de Transporte de Biomassa para comunidades isoladas no Estado do Pará**. Belém-Pará, 2006. 58 p. Monografia apresentada para a obtenção do título de Engenheiro Mecânico. UFPA - Universidade Federal do Pará.

- POULLET, D. **Açaí: Estudo da Cadeia Produtiva**. 1 ed. Macapá-AP: IEPA-GEA, 1998
- RÊGO, I. F. **As Multi - Possibilidades do Aproveitamento Econômico do Açaizeiro - Estudo Particular do Beneficiamento do "Vinho"**. Belém-PA, 1993, p. 28. Monografia apresentada para a obtenção do grau de bacharel em ciências econômicas-UNAMA-Universidade da Amazônia
- ROGEZ, H. **Açaí: Preparo, Composição e Melhoramento da Conservação**. 1 ed. Belém-Pará: EDUFPA, 2000,313p.
- SHANLEY, P.; CYMERYS, M.; GALVÃO J. **Fruteiras da Mata na Vida Amazônica**. 1 ed, Belém-PA: 1998

### **AÇAÍ SEEDS POTENTIAL ASSESSMENT TO GENERATE POWER**

Jessé Luís Padilha

UFPA- Universidade Federal do Pará-Campus Universitário do Guamá- CT- LABEM, CEP 66085-310  
[jessepadilha@hotmail.com](mailto:jessepadilha@hotmail.com)

Sergio Aruana Elarrat Canto

UFPA- Universidade Federal do Pará-Campus Universitário do Guamá- CT- LABEM, CEP 66085-310  
[aruana@ufpa.br](mailto:aruana@ufpa.br)

Gonçalo Rendeiro

UFPA- Universidade Federal do Pará-Campus Universitário do Guamá- CT- LABEM, CEP 66085-310  
[rendeiro@ufpa.br](mailto:rendeiro@ufpa.br)

#### **Abstract**

Pará State is the major producer of Açaí in Brazil. After Açaí juice is removed, its seed with spherical shape has no application identified so far and is disposal in large amount at residues areas. Studies done for the EBMA showed that its high heating value is 4576 kcal/kg, has 19% of fixed carbon, 79% of volatiles matter and 1% of ash, all in dry mass basis. These figures qualify Açaí seeds as a good biomass fuel to be used either at combustion or gasification process. This work show the results of a survey performed in Belém where the location of Açaí residues deposit are and available amount of residue of Açaí at each location. Each residue location had its coordinates recorded through a GPS and the amount of seeds registered. All the information was assembled as a data base in a SIG system. This information allowed to calculation the annually amount of available energy to be used to generate power.

Keywords: Açaí, SIG system, generate power, biomass, data base.

## BURNING OF WOOD SLABS IN A CONICAL CALORIMETER. PART I: CONSUMPTION RATES AND CHARACTERISTIC TIMES

**Fernando de Souza Costa**

Laboratório Associado de Combustão e Propulsão, INPE  
Rodovia Presidente Dutra KM 40, Cachoeira Paulista, SP, 12630-000  
e-mail: fernando@lcp.inpe.br

**André de Castro**

Laboratório Associado de Combustão e Propulsão, INPE  
Rodovia Presidente Dutra KM 40, Cachoeira Paulista, SP, 12630-000  
e-mail: andre@lcp.inpe.br

**Abstract.** *This work presents experimental data concerning the combustion characteristics of wood slabs of pinus (Pinus elliot) burned in a conical calorimeter. The mass evolution, normalized mass evolution, consumption rates, percent consumption rates, times of self-ignition, pyrolysis and flaming of square slabs (10x10x5cm<sup>3</sup>) were obtained for a constant heat output of 2000 W. The behaviours of slabs with fibers parallel or perpendicular to the heating surface are compared during pre-heating, drying, self-ignition, pyrolysis, flaming, flame extinction and smoldering.*

*Keywords.* Combustion, self-ignition, pyrolysis, smoldering, conical calorimeter, slab

### 1. Introduction

Ever since prehistoric times humans have known that wood burns and the ability of wood to burn has been both a benefit and a problem. The capability to predict the burning rate of wood in modern times has become increasingly important as fire safety engineering moves toward a performance-based approach to building design (Spearpoint, 1999, 2001).

Combustion of biomass, mainly wood, releases pollutants in the atmosphere, increasing global warming, acid rain formation, production of smoke and particulates. It causes direct problems to the health of populations, worsen visibility conditions, produces ecological unbalance with reduction in biodiversity, damage the biogeochemical cycles and other adverse effects (Crutzen and Andreae, 1990).

Combustion of biomass presents several phases: pre-heating, drying, ignition, pyrolysis, flaming, flame extinction, smoldering and smoldering extinction. The flaming phase occurs when the volatiles from wood pyrolysis mix with air above the lean flammability limit in the boundary layer adjacent to the wood sample, and the gas temperature is above the ignition point (Kanury, 1977). Smoldering is a slow flameless heterogeneous burning process in which the residual char from pyrolysis is oxidized by air. Smoldering can last several days after fires, especially in the case of large logs or ground vegetation.

Several of the burning phases can occur simultaneously in several conditions, for example, drying and pyrolysis in the high temperature zones of fixed-bed concurrent and fluid-bed gasifiers/combustors.

Many studies of different aspects of the burning of wood have been made. Abu-Zaid and Atreya (1989) took into account the effect of moisture on the ignition of cellulosic materials in their studies. Suuberg, Milosavljevic and Lilly (1994) made a detailed analysis of pyrolysis kinetics of cellulose, the main component of wood. Saastamoinen and Richard (1996) made a numerical study of the simultaneous drying and pyrolysis of solid fuel particles. Di Blasi et al. (2003) investigated numerically and experimentally the drying of pinus cylinders in fixed bed under a heated counterflow air, to analyze drying conditions of wood in gasifiers/combustors. Galgano and Di Blasi (2004) modeled the propagation of drying and decomposition fronts in wood. Di Blasi et al. (2003) simulated the propagation of an evaporation front during the entire duration of the process together with significant gas phase convective transport. In general, the presence of moisture introduces a delay in the heating time, with consequent variations in reaction temperatures, product distribution and ignition times (Di Blasi et al., 2003).

Pyrolysis is the chemical decomposition of organic materials by heating in the absence of oxygen. Pyrolysis is also a common technique to produce liquids from solid biomass. The most common technique uses very low residence times (< 2 s) and high heating rates using a temperature between 350-500 °C and is called either fast or flash pyrolysis. The production of charcoal through the pyrolysis of wood has been widely used. In many industrial applications the process is done under pressure and at operating temperatures above 430°C.

The effects of moisture, diameter and heat input on burning characteristics of wood cylinders of several Brazilian species have been studied experimentally by Castro (2005) and Castro and Costa (2005a,b) using a cylindrical calorimeter. A theoretical model of burning of wood cylinders was presented by Costa et al. (2003) and a simplified numerical model to describe the combustion process of wood cylinders was developed by Costa and Castro (2005).

There is still a limited amount of data in literature related to the drying, pyrolysis and burning processes of Brazilian woods under controlled conditions. The previous studies made by Costa and Castro focused on combustion characteristics of wood cylinders with the same wood fiber orientation, i.e., parallel to the heating surface.

Therefore, the objective of this work is to determine and compare combustion characteristics of pinus wood (*Pinus elliot*) slabs burned inside a conical calorimeter, considering the effects of wood fiber orientation on burning. Samples with fibers parallel and perpendicular to the heating surface are tested.

In this paper data are presented concerning mass evolution, mass consumption rates, normalized mass evolution, percent consumption rates, self-ignition times, end of pyrolysis times, flaming times, of oven-dry square wood slabs with exposed area of 10x10 cm<sup>2</sup> and 5 cm thickness.

Results of this work can be employed in the validation of numerical codes, assessment of fire risk, related studies of fire prevention and simulation of forest fires and fires, in general.

## 2. Experimental Setup

The tests and the methodology of testing in a cone calorimeter are established by the ASTM E1354-03 "Standard Test Method for Heat and Visible Smoke Release Rates for Materials and Products Using an Oxygen Consumption Calorimeter".

The objective of ASTM E1354-03 standard is to measure the response of materials exposed to controlled levels of radiating heat, with or without an external igniter. The test is used to determine the ignitability, heat release rates, mass consumption rates, effective heat of combustion and the release of visible smoke of materials and products.

A cone calorimeter, with a maximum heater output of 5000 W, was built based on the ASTM E1354-03 standard. Figure 1 depicts the cone calorimeter and Fig. 2 shows the test workbench.

A support was positioned below the heater system and placed on a digital scale, which had a 0.005 g precision and stabilization time less than 2 s. The heater was turned on by a temperature PID controller connected to a thermocouple positioned below the heater, outside the flame zone.

A data acquisition system and a continuous gas analyzer were used to register the instantaneous masses and emissions of CO, CO<sub>2</sub> and NO, the O<sub>2</sub> concentrations and temperatures.

The gases generated by the combustions process were removed by a radial fan to avoid smoke accumulation inside the hood above the calorimeter. The sampling of gases was made by a collection ring with twenty holes symmetrically distributed. A K-thermocouple registered the exhaustion temperatures of the gas samples. A detailed description of the cone calorimeter is given by Castro (2005).

## 3. Sample Preparation

Wood samples were obtained from pinus (*Pinus elliot*) trees, recently cut. The logs were cut in 30 cm dowells, which were packed and frozen until machining. Freezing reduced moisture losses and wood deterioration, thus yielding good machining conditions. The samples were machined as slabs (10x10x5 cm<sup>3</sup>) and, after machining, the slabs were packed and frozen again.

Due to density variations in the samples, 24 dry slabs were selected with standard deviation less than 5 %. Dry slabs were used in order to reduce the mass dispersion and to assure more similar physical properties among the samples.

Before test, the slabs were oven dried during 24 h, at 103 °C, since tests were made at a 600 m altitude. At the sea level the standard temperature is usually 105 °C. It was assumed that only moisture is released from wood at this temperature.

Six oven-dry square slabs with total dry mass similar were chosen for measuring mass evolution and consumption rates in the cone calorimeter: 3 slabs with exposed surface parallel to the wood fibers and 3 slabs with exposed surface perpendicular to the wood fibers.

## 4. Test procedure

Initially the heater system and the sample support were aligned vertically on the scale and the computer was connected to the scale serial output and turned on. The heat output was set at 2000 W by a PID controller. The heater was turned on until the air flow to reach a steady temperature, measured by a thermocouple below the heater. This temperature remained approximately constant until the flaming period, when it raised to 700-850 °C, depending on the sample characteristics. During the smoldering phase the measured air flow temperatures were about 550 °C.

The samples were unfrozen 24 hr before the test and then oven-dried. After their masses were verified, they were placed on the sample support, below the cone heater. Thus, the scale registered the instantaneous mass of the sample at intervals of 1s during about 25 min, with a constant heat output from the heater.

The data acquisition system was started just after the sample was placed on the sample support.

Radiation heating and burning convected the hot air upward and brought cold air from the ambient into the heater.

Figure (3) shows photos of burning of pinus slabs in the cone calorimeter.



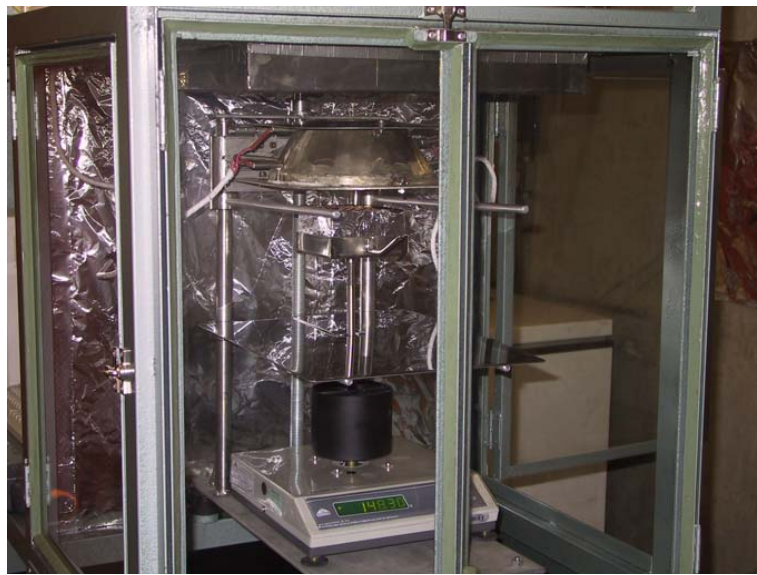


Figure 1 - Cone calorimeter.



Figure 2 - Experimental workbench.

## 5. Results

Figures 4 and 5 present the mass evolution, Figs. 6 and 7 present the normalized masses, Figs. 8 and 9 present the consumption rates, and Figs. 10 and 11 present the percent consumption rates of oven dry pinus slabs for heated surfaces parallel or perpendicular to the wood fibers. In these figures  $m$  is the instantaneous mass,  $m_o$  is the initial mass,  $m/m_o$  is the normalized mass,  $dm/dt$  is the consumption rate, and  $(-100/m)dm/dt$  is the percent consumption rate of a slab.  $t$  is the heating time of the slab in the calorimeter. Data were selected at 10 s intervals, reducing scale stabilization effects.

It can be seen in Figs. 4-7 that the curves of mass evolution and normalized masses present points with a significant curvature change. In these tests all slabs self-ignited. If ignition occurs, the points with a change of curvature indicate the self-ignition and the flame extinction moments. In case of no ignition, they indicate the pyrolysis start, the end of pyrolysis and the change of the pyrolysis regime, with modification of the pyrolysis rate. After flame extinction or, in case of no flaming, after the end of pyrolysis, the smoldering process begins.

The points of start, end of pyrolysis and change of the pyrolysis regime change are identified more clearly observing the spikes and curvature changes in the curves of consumption rates and in the curves of percent mass consumption rates. Even when there is no self-ignition these curves present spikes, and the start of the pyrolysis process can be

identified by the end of the initial increase in the consumption rates. The end of the pyrolysis process can be identified by the beginning of the region with a low and approximately constant consumption rate, indicating the existence of a smoldering process. In the region between ignition and flame extinction, the curves of consumption rates have, approximately, a parabolic profile for samples with heated surfaces perpendicular to the wood fibers and approximately semi-parabolic for the samples with heated surfaces parallel to the wood fibers.

The curves of mass evolution present low dispersion for slabs with heated surfaces parallel to the wood fibers, differently from the slabs with exposed surfaces perpendicular to the fibers. The normalized mass curves also follow this tendency. The consumption rate curves and the percent consumption rate curves present a larger dispersion, due to the presence or not of flaming and the different self-ignition times. It is verified that the wood fiber orientation affects the release rate of volatiles, which is larger, during pyrolysis, for samples with parallel fibers. Such observation can be associated to the different thermal conductivities of wood with respect to fiber's orientation. Thermal conductivity in the fiber direction can be two times larger than the thermal conductivity in a direction perpendicular to the fibers. In samples with fibers oriented parallel to the heating surface the thermal conductivity is lower, and the release rate of volatiles is larger due to the higher temperature, caused by the lower heat diffusion towards the cold bottom of the slab.

The curves of percent mass consumption rate present oscillations during smoldering, due to the lower masses at that phase and scale stabilization and delay time. Moving averages could be taken from the mass evolution data in order to determine an average profile without oscillations in the smoldering phase.

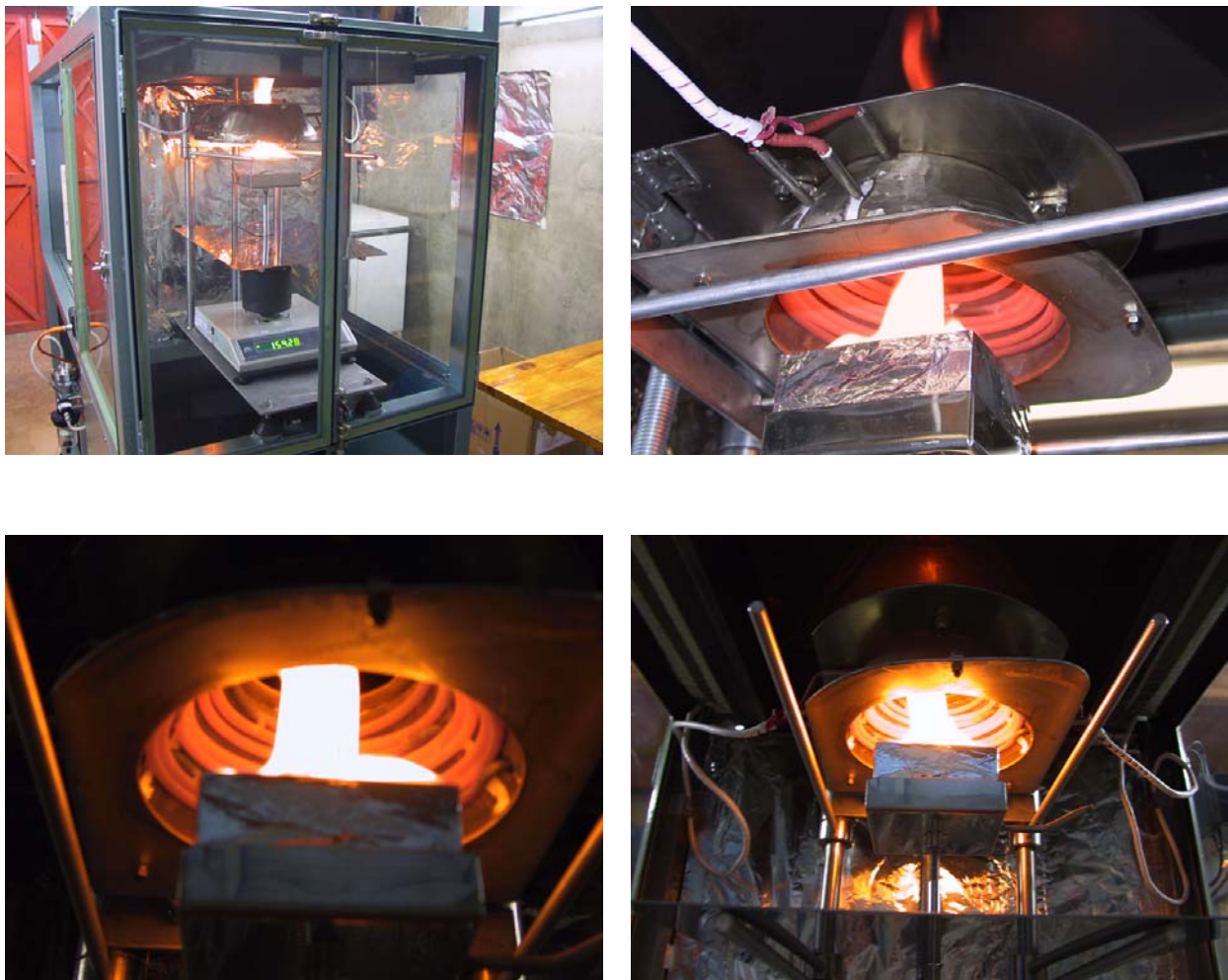


Figure 2 – Burning of pinus slabs in the cone calorimeter.

It is verified on Table 1 that the char fraction at end of pyrolysis and smoldering rates are not significantly affected by the orientation of the fibers. Pyrolysis rates were about 10 % larger for slabs with fibers parallel to the exposed surface than for fibers perpendicular to the exposed surface. Slabs C and F had ignition times much larger than the other slabs with the same fiber directions, probably due to physical and chemical heterogeneities inside the log from where the slabs were obtained. The average time of end of pyrolysis (flame extinction) for parallel orientation is about 2550 s,

while for perpendicular orientation is about 2900 s, approximately 350 s larger, however the pyrolysis time is about the same for slabs parallel or perpendicular 2 and 3.

Additional data concerning CO, CO<sub>2</sub>, UHC and NO emissions, oxygen consumption and exhaustion temperatures for the samples presented in this paper are given by Costa and Castro (2006).

Table 1 presents comparative data of the slabs with heating surfaces parallel and perpendicular to the wood fibers.

Table 1 – Slab data with different fiber orientations.

Fiber orientation	m <sub>o</sub> (g)	t <sub>ig</sub> (s)	t <sub>ep</sub> (s)	Δt <sub>p</sub> (s)	m <sub>ig</sub> (g)	m <sub>ep</sub> (g)	Δm <sub>p</sub> (g)	dm <sub>p</sub> /dt (g/s)	m <sub>ep</sub> /m <sub>o</sub> (%)	m <sub>c</sub> (g)	dm <sub>c</sub> /dt (g/s)
Parallel 1	173,57	700	2550	1850	128,52	41,40	87,12	0,0471	23,85	26,51	0,0090
Parallel 2	180,58	55	2560	2505	177,40	39,80	137,60	0,0549	22,04	19,62	0,0110
Parallel 3	184,45	22	2540	2518	183,30	40,90	142,40	0,0566	22,17	23,75	0,0090
Perpendicular 1	182,35	2061	3155	1094	85,94	41,33	44,61	0,0408	22,67	30,33	0,0100
Perpendicular 2	178,60	57	2650	2593	176,00	36,76	139,24	0,0537	20,58	20,45	0,0100
Perpendicular 3	180,37	390	2850	2460	156,00	44,83	111,17	0,0452	24,85	31,83	0,0090

m<sub>o</sub> = initial mass, t<sub>ig</sub> = ignition time, t<sub>ep</sub> = end of pyrolysis time, Δt<sub>p</sub> = pyrolysis time,  
 m<sub>ep</sub> = mass at end of pyrolysis, Δm<sub>p</sub> = pyrolysed mass, dm<sub>p</sub>/dt = pyrolysis rate, m<sub>ep</sub>/m<sub>o</sub> = char fraction,  
 m<sub>c</sub> = char mass at t = 4000 s, dm<sub>c</sub>/dt = smoldering rate at t = 4000 s.

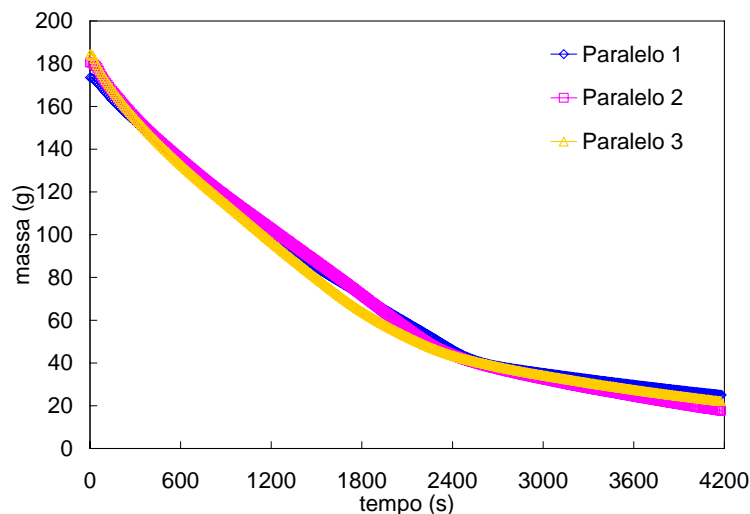


Figure 4 – Mass evolution of pinus wood slabs with heated surface parallel to the wood fibers.

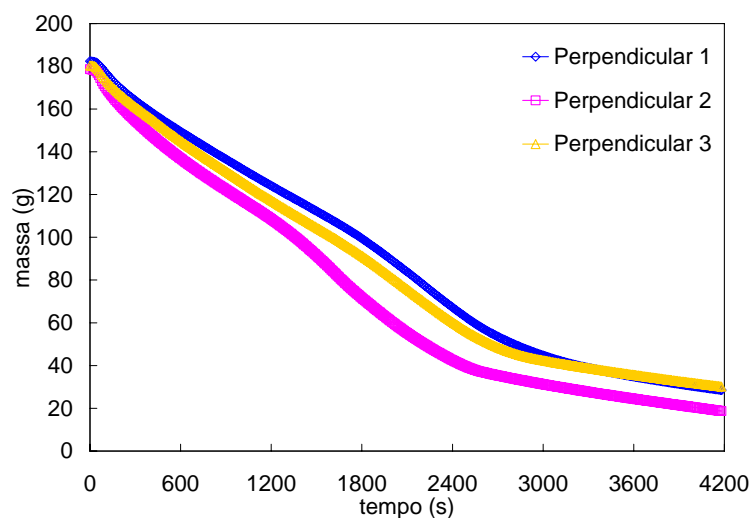


Figure 5 – Mass evolution of pinus wood slabs with heated surface perpendicular to the wood fibers.

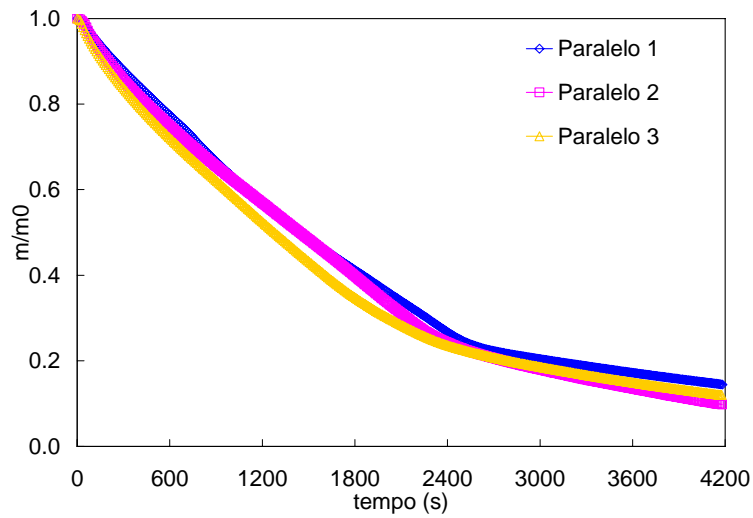


Figure 6 – Normalized mass evolution of pinus wood slabs with heated surface parallel to the wood fibers.

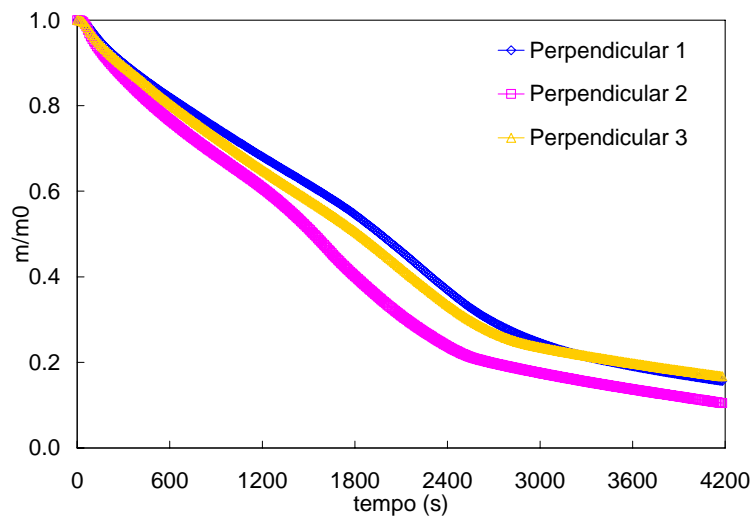


Figure 7 – Normalized mass evolution of pinus wood slabs with the heated surface parallel to the wood fibers.

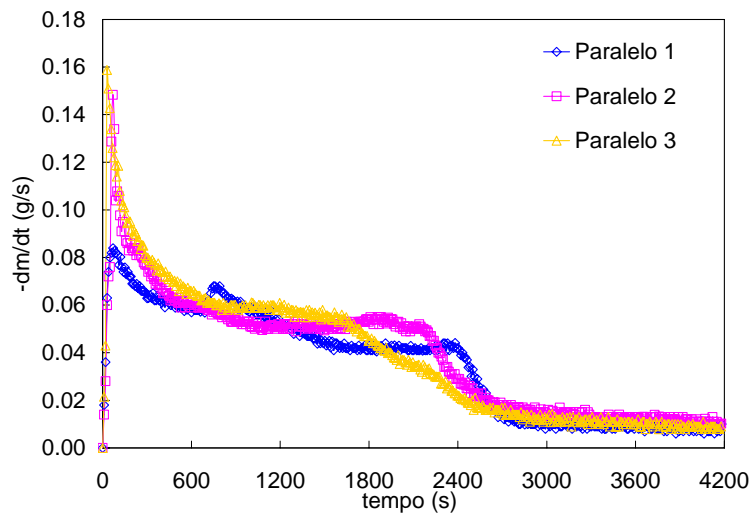


Figure 8 – Mass consumption rates of pinus wood slabs with the heated surface parallel to the wood fibers.

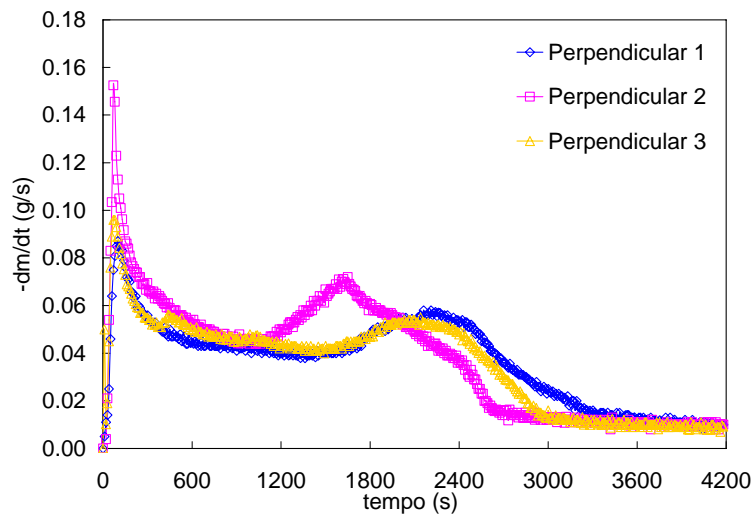


Figure 9 – Mass consumption rates of pinus wood slabs with the heated surface perpendicular to the wood fibers.

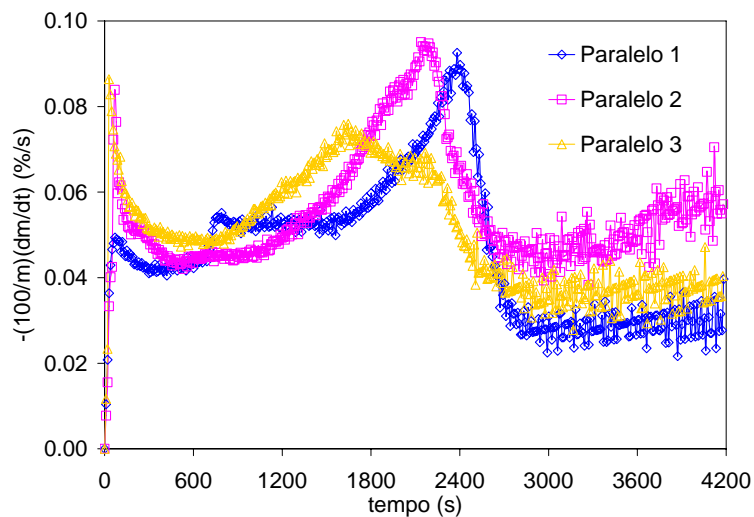


Figure 10 – Percent mass consumption rates of pinus wood slabs with the heated surface parallel to the wood fibers.

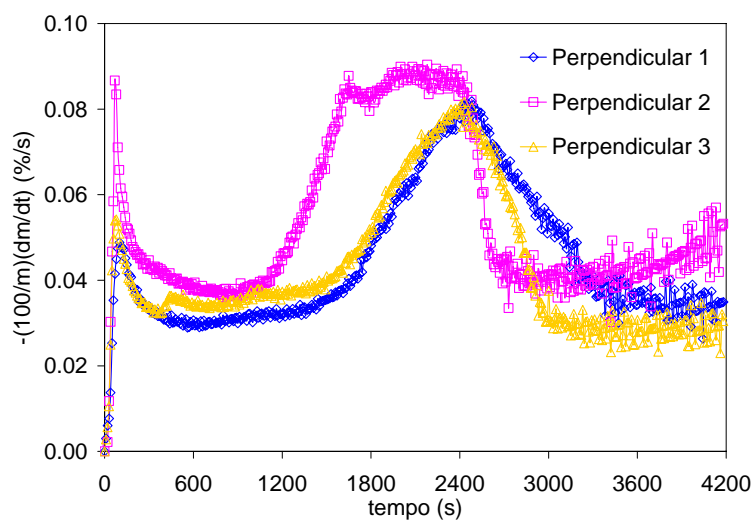


Figure 11 – Percent mass consumption rates of pinus wood slabs with heated surface perpendicular to the wood fibers.

## 7. Conclusions

Combustion characteristics of pinus wood (*Pinus elliot*) slabs (10x10x5 cm<sup>3</sup>) were studied in a conical calorimeter with a heater output of 2000 W. The effects of fiber orientation on drying, self-ignition, pyrolysis, flaming and smoldering were analysed. All samples presented self-ignition and significant flaming. Slabs with fibers perpendicular to the heated surface showed two well-defined pyrolysis regions and presented larger self-ignition times, larger end of pyrolysis times, lower pyrolysis rates (about 10 %) than slabs with fibers parallel to the heated surface. Smoldering rates and char fractions at the end of pyrolysis (flame extinction) were not significantly affected by fiber orientation.

## 8. Acknowledgement

The authors acknowledge FAPESP for supporting this research.

## 9. References

- Abu-Said, M.; Atreya, A, Effect of water on piloted ignition of cellulosic materials, *Report NIST GCR-89-561*, 189 p., Gaithersburg, MD, 1989.
- Castro, A, Uma Investigação Teórico-Experimental da Combustão de Madeira, *Master Thesis*, INPE, SP, Brazil, 2005.
- Costa, F.S., Castro, A., Burning of Wood Slabs in a Conical Calorimeter. Part II: Emissions, Oxygen Consumption and Exhaust Temperatures, *11th Brazilian Congress of Thermal Engineering and Sciences*, Curitiba, PR, Brazil, 2006.
- Castro, A., Costa, F.S., Effects of Diameter and Heat Flux on Burning Characteristics of Wood Cylinders, *18th International Congress of Mechanical Engineering*, Ouro Preto, MG, Brazil, 2005.
- Costa, F.S., Castro, A., Numerical Simulation of the Burning of Wood Cylinders, *18th International Congress of Mechanical Engineering*, Ouro Preto, MG, Brazil, 2005.
- Costa, F.S., Castro, A., Carvalho-Jr. J.A., Burning Characteristics of Wood Cylinders, *17th International Congress of Mechanical Engineering*, São Paulo, SP, Brazil, 2003.
- Crutzen, P.J., Andreae, M.O., Biomass Burning in the Tropics: Impact on Atmospheric Chemistry and Biogeochemical Cycles, *Science*, 250, 1669, 1990.
- Di Blasi, C., Branca, C., Sparano, S., La Mantia, B., Drying characteristics of wood cylinders for conditions pertinent to fixed-bed countercurrent gasification, *Biomass and Bioenergy*, v. 25, n. 1, p. 45-58, 2003.
- Kanury, A.M., Ignition of Cellulosic Solids: Minimum Pyrolysate Mass Flux Criterion, *Combustion Science and Technology*, Vol. 16, p.89, 1977.
- Galgano, A., Di Blasi, C., Modeling the Propagation of Drying and Decomposition Fronts in Wood, *Combustion and Flame*, Vol. 139: 16-27, 2004.
- Saastamoinen, J., Richard, J.R., Simultaneous Drying and Pyrolysis of Solid Fuel Particles, *Combustion and Flame*, Vol. 106: 288-300, 1996.
- Spearpoint, M.J., Predicting the Ignition and Burning Rate of Wood in the Cone Calorimeter using an Integral Model, Building and Fire Research Laboratory, *Report NIST GCR 99-775*, Maryland, USA, 1999.
- Spearpoint, M.J., Quintiere, J.G., Predicting the Burning of Wood using an Integral Model, *Combustion and Flame*, 123:308-324, 2001.
- Suuberg, E.M., Milosavljevic, I., Lilly, W. D., Behavior of charring materials in simulated fire environments, *Report NIST-GCR-94-645*, 651p., Gaithersburg, MD, 1994.

## **BURNING OF WOOD SLABS IN A CONICAL CALORIMETER. PART II: EMISSIONS, OXYGEN CONSUMED AND EXHAUST TEMPERATURES**

**Fernando de Souza Costa**

Laboratório Associado de Combustão e Propulsão, INPE  
Rodovia Presidente Dutra KM 40, Cachoeira Paulista, SP, 12630-000  
e-mail: fernando@lcp.inpe.br

**André de Castro**

Laboratório Associado de Combustão e Propulsão, INPE  
Rodovia Presidente Dutra KM 40, Cachoeira Paulista, SP, 12630-000  
e-mail: andre@lcp.inpe.br

**Abstract.** *This work presents experimental data concerning the combustion characteristics of wood slabs of pinus (Pinus elliot) burned in a conical calorimeter. Emissions of CO, CO<sub>2</sub>, NO and UHC, oxygen molar fractions and temperatures of exhaust gases from burning slabs (10×10×5 cm<sup>3</sup>) were measured. The combustion behaviour during pre-heating, drying, self-ignition, pyrolysis, flaming and smoldering, for a constant cone calorimeter output of 2000 W, is compared and analysed for slabs with heated surfaces parallel and perpendicular to the wood fibers.*

*Keywords.* Combustion, self-ignition, pyrolysis, smoldering, conical calorimeter, slab

### **1. Introduction**

Ever since prehistoric times humans have known that wood burns and the ability of wood to burn has been both a benefit and a problem. The capability to predict the burning rate of wood in modern times has become increasingly important as fire safety engineering moves toward a performance-based approach to building design (Spearpoint, 1999, 2001).

Combustion of biomass, mainly wood, releases pollutants in the atmosphere, increasing global warming, acid rain formation, production of smoke and particulates. It causes direct problems to the health of populations, worsen visibility conditions, produces ecological unbalance with reduction in biodiversity, damage the biogeochemical cycles and other adverse effects (Crutzen and Andreae, 1990).

Combustion of biomass presents several phases: pre-heating, drying, ignition, pyrolysis, flaming, flame extinction, smoldering and smoldering extinction. The flaming phase occurs when the volatiles from wood pyrolysis mix with air above the lean flammability limit in the boundary layer adjacent to the wood sample, and the gas temperature is above the ignition point (Kanury, 1977). Smoldering is a slow flameless heterogeneous burning process in which the residual char from pyrolysis is oxidized by air. Smoldering can last several days after fires, especially in the case of large logs or ground vegetation.

The burning phases can occur simultaneously in several conditions, for example, drying and pyrolysis in the high temperature zones of fixed-bed concurrent and fluid-bed gasifiers/combustors.

Many studies of different aspects of the burning of wood have been made. Abu-Zaid and Atreya (1989) took into account the effect of moisture on the ignition of cellulosic materials in their studies. Suuberg, Milosavljevic and Lilly (1994) made a detailed analysis of pyrolysis kinetics of cellulose, the main component of wood. Saastamoinen and Richard (1996) made a numerical study of the simultaneous drying and pyrolysis of solid fuel particles. Di Blasi et al. (2003) investigated numerically and experimentally the drying of pinus cylinders in fixed bed under a heated counterflow air, to analyze drying conditions of wood in gasifiers/combustors. Galgano and Di Blasi (2004) modeled the propagation of drying and decomposition fronts in wood. Di Blasi et al. (2003) simulated the propagation of an evaporation front during the entire duration of the process together with significant gas phase convective transport. In general, the presence of moisture introduces a delay in the heating time, with consequent variations in reaction temperatures, product distribution and ignition times.

Pyrolysis is the chemical decomposition of organic materials by heating in the absence of oxygen. Pyrolysis is also a common technique to produce liquids from solid biomass. The most common technique uses very low residence times (< 2 s) and high heating rates using a temperature between 350-500 °C and is called either fast or flash pyrolysis. The production of charcoal through the pyrolysis of wood has been widely used. In many industrial applications the process is done under pressure and at operating temperatures above 430°C.

The effects of moisture, diameter and heat input on burning characteristics of wood cylinders of several Brazilian species have been studied experimentally by Castro (2005) and Castro and Costa (2005a,b) using a cylindrical calorimeter. A theoretical model of burning of wood cylinders was presented by Costa et al. (2003) and a simplified numerical model to describe the combustion process of wood cylinders was developed by Costa and Castro (2005).

Nevertheless, there is still a limited amount of data in literature related to the drying, pyrolysis and burning processes of tropical woods under controlled conditions. The previous studies made by Costa and Castro focused on combustion characteristics of wood cylinders with the same wood fiber orientation, along the vertical/axial direction.

The objective of this work is to analyse the effects of fiber orientation on combustion characteristics of *Pinus elliot*, a common softwood in Brazil, using slabs burned inside a conical calorimeter. Data are presented concerning CO, CO<sub>2</sub>, UHC (unburned hydrocarbons) and NO emissions, oxygen fraction and exhaust temperatures from gas products of oven-dry square wood slabs (10×10×5 cm<sup>3</sup>), burned inside a cone calorimeter with a heat output of 2000 W.

Results of this work can be employed in the validation of numerical codes, assessment of fire risk, related studies of fire prevention and simulation of forest fires and fires, in general.

## 2. Experimental Setup

The tests and the methodology of testing in a cone calorimeter are established by the ASTM E1354–03 “Standard Test Method for Heat and Visible Smoke Release Rates for Materials and Products Using an Oxygen Consumption Calorimeter”.

The objective of ASTM E1354–03 standard is to measure the response of materials exposed to controlled levels of radiating heat, with or without an external igniter. The test is used to determine the ignitability, heat release rates, mass consumption rates, effective heat of combustion and the release of visible smoke of materials and products. A cone calorimeter, with a maximum heater output of 5000 W, and a test workbench were built based on the ASTM E1354–03 standard.

The workbench includes a support structure, hood, radial fan, gas analyzer (Eurotron Greenline 8000), a data acquisition system, gas sampling ring, an ice bath, gas filters, a power control unit, electrical wiring, thermocouples and digital displays of temperature. Figure (1) depicts the cone calorimeter inside the test workbench.

The heater is turned on by a temperature PID controller connected to a thermocouple positioned below the heater, outside the flame zone. The data acquisition system and the continuous gas analyzer are used to register the instantaneous masses, consumption rates and the emissions of CO, CO<sub>2</sub>, UHC and NO, the O<sub>2</sub> concentrations in the exhaust gases, slab temperatures, and exhaust gas temperatures. The measurement errors were 5 ppm for CO and UHC, 500 ppm for CO<sub>2</sub> and 1 ppm for NO and O<sub>2</sub>.

The gases generated by the combustions process are removed by a radial fan to avoid smoke accumulation inside the hood above the calorimeter. The sampling of gases is made by a collection ring with twenty holes symmetrically distributed. A K-thermocouple registers the exhaustion temperatures of the gas samples. A detailed description of the cone calorimeter is given by Castro (2005).

Figure (2) shows a photo of a pinus slab burning in the cone calorimeter.

## 3. Sample Preparation

Wood samples were obtained from pinus (*Pinus elliot*) trees, recently cut. The logs were cut in 30 cm dowells, which were packed and frozen until machining. Freezing reduced moisture losses and wood deterioration, thus yielding good machining conditions. The samples were machined as slabs (10×10×5 cm<sup>3</sup>) and, after machining, the slabs were packed and frozen again.

Due to density variations in the samples, 24 dry slabs were selected with standard deviation less than 5 %. Dry slabs were used in order to reduce the mass dispersion and to assure more similar physical properties among the samples.

Before test, the slabs were oven dried during 24 h, at 103 °C, since tests were made at a 600 m altitude. At the sea level the standard temperature is usually 105 °C. It was assumed that only moisture is released from wood at this temperature.

Six oven-dry square slabs with total dry mass similar were chosen for measuring mass evolution, consumption rates, emissions and exhaust temperatures: 3 slabs with exposed surface parallel to the wood fibers and 3 slabs with exposed surface perpendicular to the wood fibers. It should be noted that the presence of heterogeneities, inclusions and resins in the wood can affect significantly the burning characteristics.

## 4. Test procedure

Initially the heater system and the sample support were aligned vertically on the scale and the computer was connected to the scale serial output and turned on. The heat output was set at 2000 W by a PID controller. The heater was turned on until the air flow to reach a steady temperature, measured by a thermocouple below the heater. This temperature remained approximately constant until the flaming period, when it raised to 700-850 °C, depending on the sample characteristics. During the smoldering phase the measured air flow temperatures were about 550 °C.

The samples were unfrozen 24 hr before the test and then oven-dried. After their masses were verified, they were placed on the sample support, below the cone heater. Thus, the scale registered the instantaneous mass of the sample at intervals of 1s during about 25 min, with a constant heat output from the cone heater.



The data acquisition system was started just after the sample was placed on the sample support.  
Radiation heating and burning convected the hot air upward and brought cold air from the ambient into the heater.

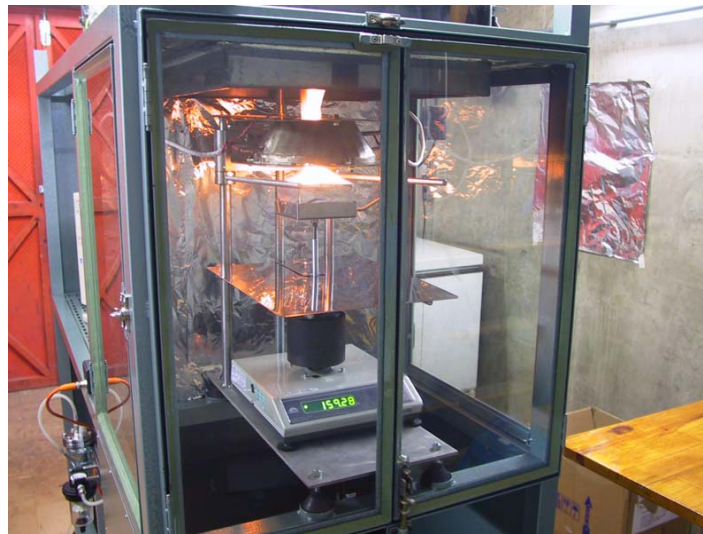


Figure 1 – Burning of pinus slabs in the cone calorimeter.

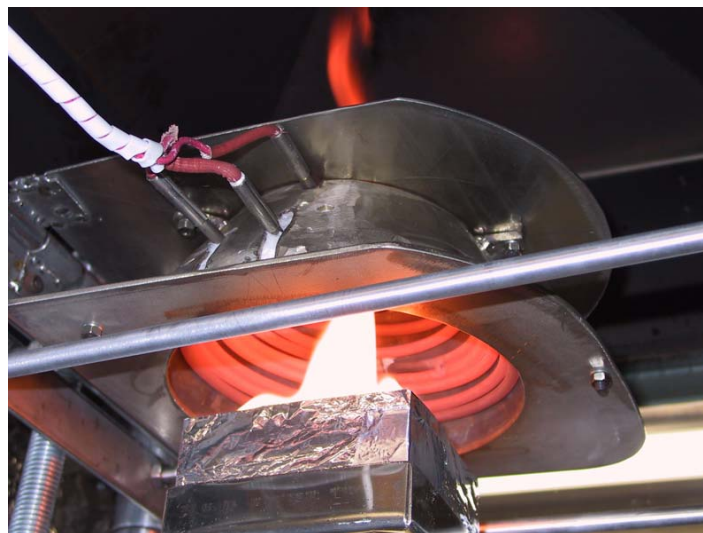


Figure 2 – Burning of a pinus slab in the cone calorimeter.

## 5. Results

Figures 3 and 4 present CO<sub>2</sub> emissions, Figs. 5 and 6 present CO emissions, Figs. 7 and 8 present NO emissions, Figs. 9 and 10 present UHC emissions, Figs. 11 and 12 present O<sub>2</sub> molar fractions in the exhaust gases and Figs. 13 and 14 present temperatures in the exhaust gases of oven dry pinus slabs for heated surfaces parallel or perpendicular to the wood fibers.

Samples Parallel 1 and Perpendicular 1 did not present early ignition and showed only short periods of flaming at the end of pyrolysis. It can be observed that CO<sub>2</sub> and CO are produced during flaming. The samples which did not ignite early (Parallel 1 and Perpendicular 1) did not present significant formation de CO<sub>2</sub>, but showed peaks of CO<sub>2</sub> during the residual flaming. Probably, the presence of resins and inclusions in samples 2 and 3, both with parallel or perpendicular fibers, caused their early ignition. The accuracy of CO<sub>2</sub> emissions were relatively large, 500 ppm, but the periods of significant CO<sub>2</sub> emission could be clearly identified.

The CO emissions are small during flaming and are significant (about 100 ppm) during smoldering, after the flaming period. Samples Parallel 1 and Perpendicular 1 showed large emissions of CO during pyrolysis (mass loss without flaming), probably due to the simultaneous smoldering, and also presented the larger UHC emissions.

It was observed an increase on flame heights just before flame extinction, because the entire slab attained a high temperature with an easier volatile exhaustion caused by surface cracking and enlarging of pores.

The exhaust temperatures of slabs that ignited early followed the mass consumption rate curves, as expected, because the heat release is proportional to the consumed mass. Exhaust temperatures were higher at ignition and at flame extinction and presented constant values during smoldering.

Maximum oxygen consumption occurred during ignition decreased continuously during flaming and was almost insignificant during smoldering.

Additional data concerning mass evolution, consumption rates, percent consumption rates and characteristic times for the samples presented in this paper are given by Costa and Castro (2006).

Table 1 shows the maximum emissions, minimum O<sub>2</sub> molar fractions and maximum exhaust temperatures of all slabs, with fibers parallel or perpendicular to the heating surface. Table 2 shows some data on mass and characteristic times of the slabs, to help to explain the burning behavior.

It should be noted that wood combustion is a complex interplay of physical and chemical processes and non-uniform samples can show different burning characteristics. In the samples studied the peak emissions of gases did not show significant differences, but the exhaust temperatures of samples with perpendicular fibers to the heating surface were higher than the exhaust temperatures of samples with parallel fibers, probably due to the easier release of volatiles.

**Table 1 – Maximum emissions, minimum O<sub>2</sub> molar fractions and maximum exhaust temperatures, for slabs with fibers parallel or perpendicular to the heating surface.**

Fiber orientation / slab #	Max. CO <sub>2</sub> (ppm)	Max. CO (ppm)	Max. NO (ppm)	Máx. UHC (ppm)	Min. O <sub>2</sub> (molar %)	Max. exhaust temperature (°C)
Parallel 1	1000	480	6	420	20.8	92
Parallel 2	2000	150	5	110	20.5	95
Parallel 3	3000	130	8	290	20.5	103
Perpendicular 1	1000	550	6	370	20.8	101
Perpendicular 2	3000	150	6	270	20.5	106
Perpendicular 3	1000	520	6	190	20.9	99

**Table 2 – Slab mass and time data with different fiber orientations.**

Fiber orientation / slab #	$m_o$ (g)	$t_{ig}$ (s)	$t_{ep}$ (s)	$dm_p/dt$ (g/s)	$m_{ep}/m_o$ (%)	$m_c$ (g)	$dm_c/dt$ (g/s)
Parallel 1	173.57	700	2550	0.0471	23.85	26.51	0.009
Parallel 2	180.58	55	2560	0.0549	22.04	19.62	0.011
Parallel 3	184.45	22	2540	0.0566	22.17	23.75	0.009
Perpendicular 1	182.35	2061	3155	0.0408	22.67	30.33	0.010
Perpendicular 2	178.60	57	2650	0.0537	20.58	20.45	0.010
Perpendicular 3	180.37	390	2850	0.0452	24.85	31.83	0.009

$m_o$  = initial mass,  $t_{ig}$  = ignition time,  $t_{ep}$  = end of pyrolysis time,  $m_{ep}$  = mass at end of pyrolysis,  $dm_p/dt$  = pyrolysis rate,  $m_{ep}/m_o$  = char fraction,  $m_c$  = char mass at  $t = 4000$  s,  $dm_c/dt$  = smoldering rate at  $t = 4000$  s.

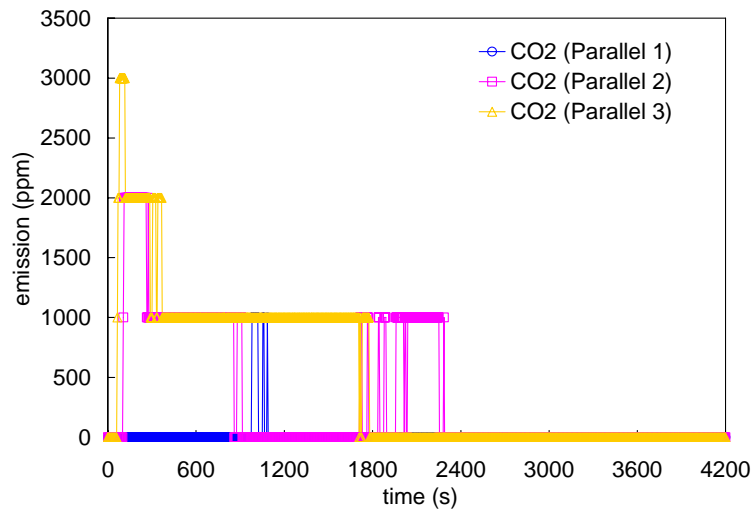


Figure 3 – CO<sub>2</sub> emissions from a burning pinus slabs with fibers parallel to the heating surface.

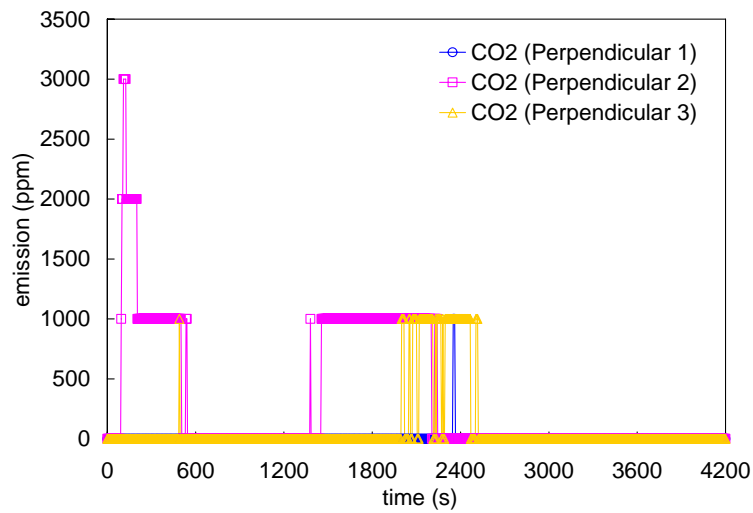


Figure 4 – CO<sub>2</sub> emissions from burning pinus slabs with fibers perpendicular to the heating surface.

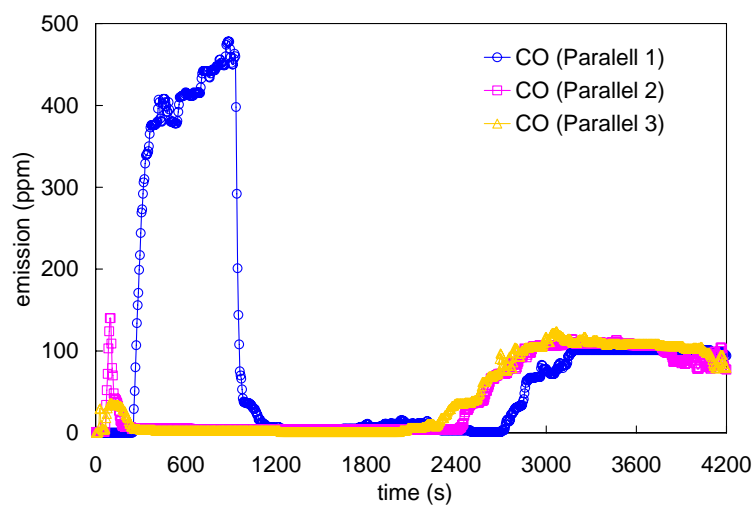


Figure 5 – CO emissions from burning pinus slabs with fibers parallel to the heating surface.

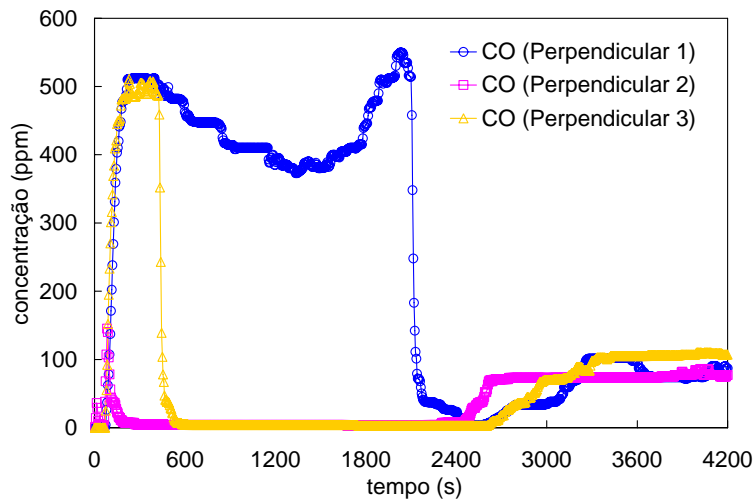


Figure 6 – CO emissions from burning pinus slabs with fibers perpendicular to the heating surface.

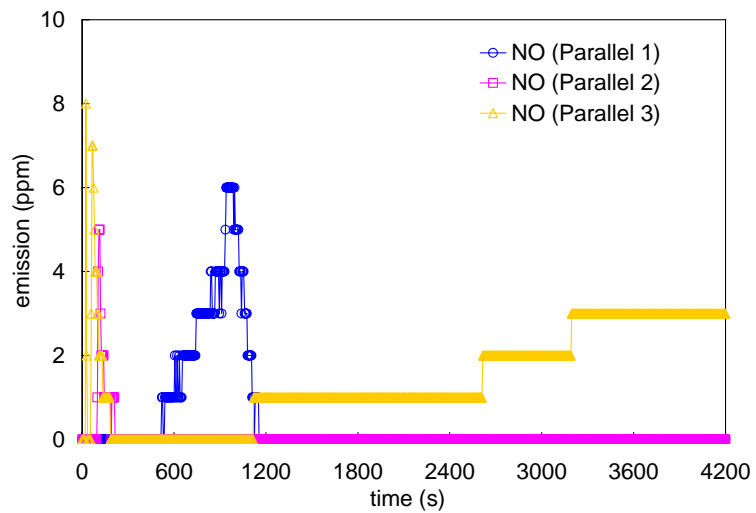


Figure 7 – NO emissions from burning pinus slabs with fibers parallel to the heating surface.

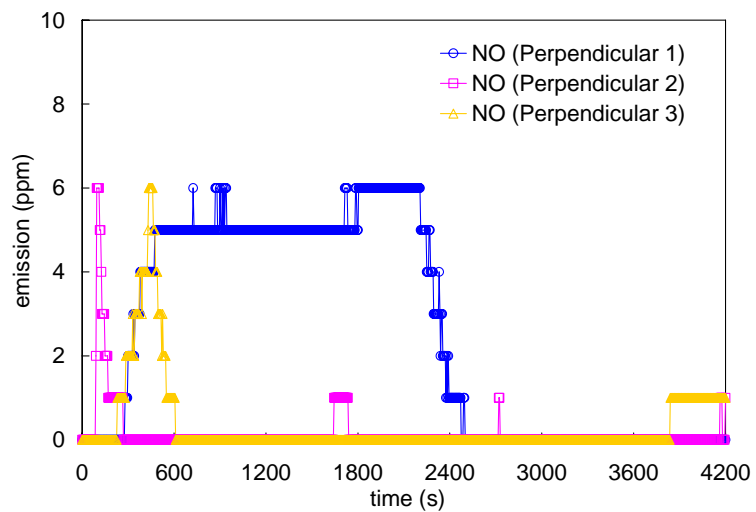


Figure 8 – NO emissions from burning pinus slabs with fibers perpendicular to the heating surface.

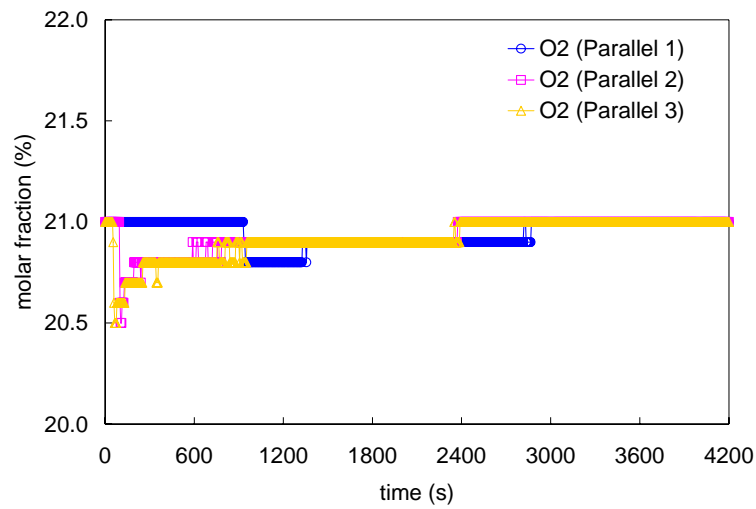


Figure 9 – Molar fractions of O<sub>2</sub> in gases from burning pinus slabs with fibers parallel to the heating surface.

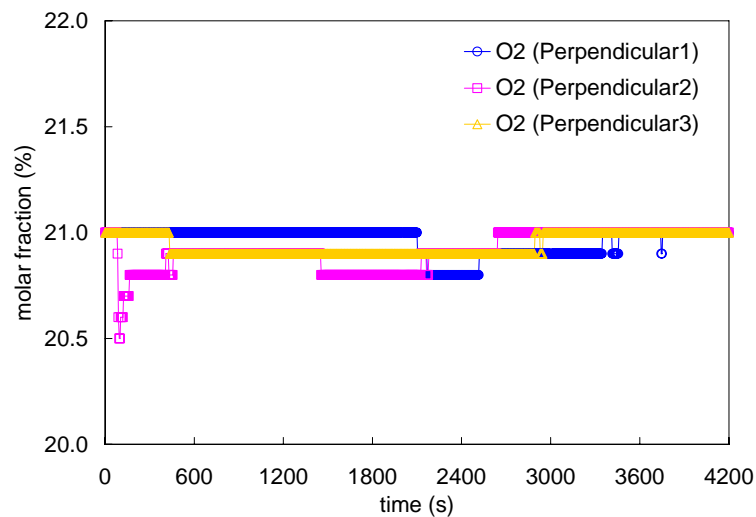


Figure 10 – Molar fractions of O<sub>2</sub> in gases from burning pinus slabs with fibers perpendicular to heating surface.

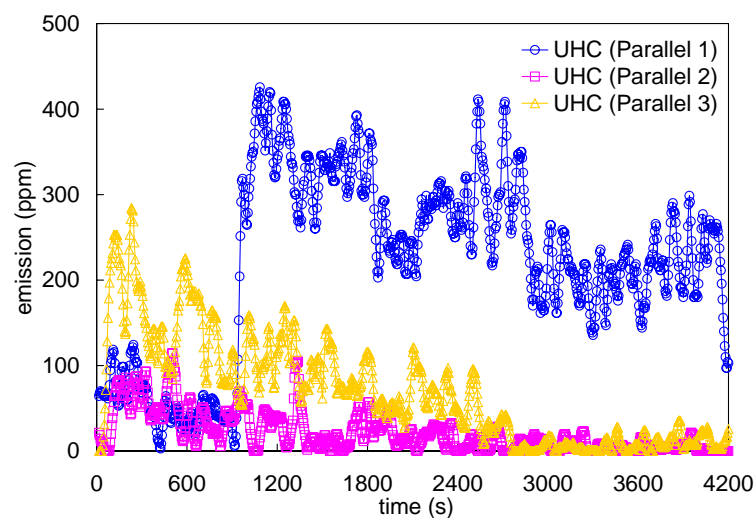


Figure 11 – UHC emissions from burning pinus slabs with fibers parallel to the heating surface.

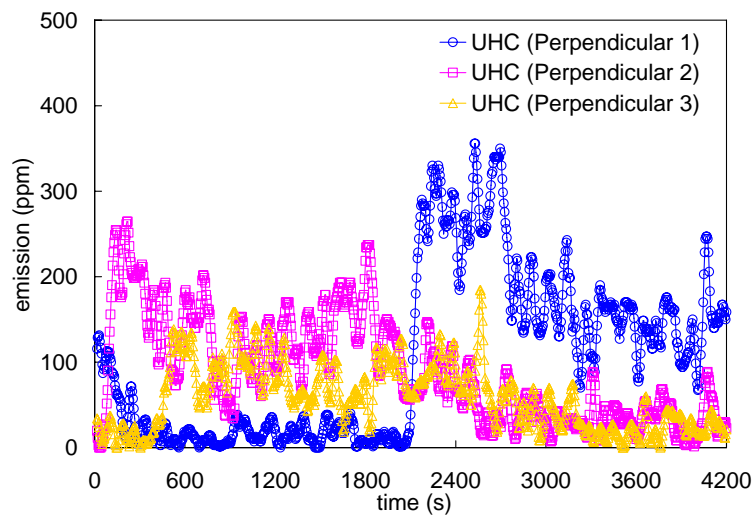


Figure 12 – UHC emissions from burning pinus slabs with fibers perpendicular to the heating surface.

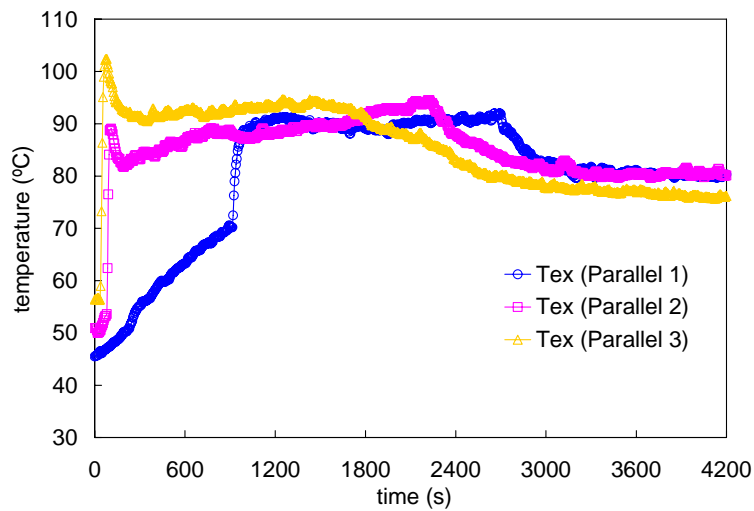


Figure 13 – Exhaust temperatures of gases from burning pinus slabs with fibers parallel to the heating surface.

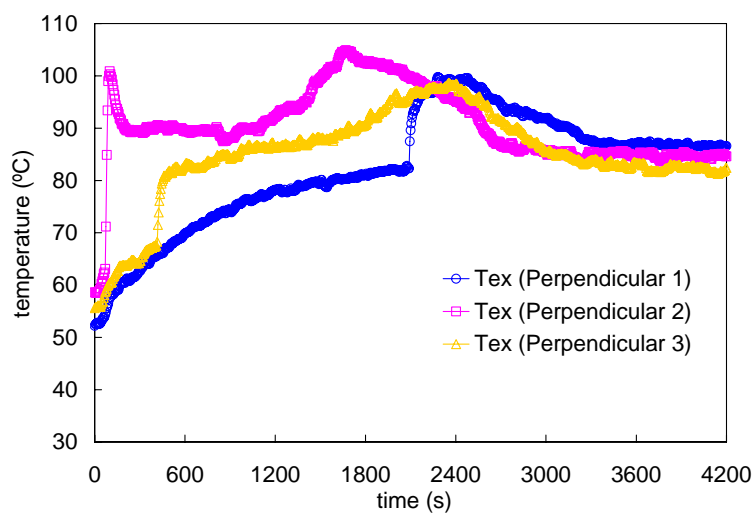


Figure 14 – Exhaust temperatures of gases from burning pinus slabs with fibers perpendicular to the heating surface.

## 7. Conclusions

The combustion characteristics of slabs of pinus wood (*Pinus elliot*) were studied in a conical calorimeter. Square pinus slabs, 10×10×5 cm<sup>3</sup>, were burned with a heater output of 2000 W. The emissions of CO, CO<sub>2</sub>, NO and UHC, the oxygen molar fractions and the temperatures of the exhaust gases were measured. The combustion behavior during pre-heating, drying, self-ignition, pyrolysis, flaming and smoldering was compared and analysed for slabs with heated surfaces parallel and perpendicular to the wood fibers. One of the three samples for each fiber orientation did not present early ignition, but presented residual flaming. Flaming characteristics were more uniform and the exhaust temperatures were higher for samples with parallel fibers than for samples with fibers perpendicular to the heating surface. Smoldering characteristics of all samples were similar.

## 8. Acknowledgement

The authors acknowledge FAPESP for supporting this research.

## 9. References

- Abu-Said, M.; Atreya, A, Effect of water on piloted ignition of cellulosic materials, *Report NIST GCR-89-561*, 189 p., Gaithersburg, MD, 1989.
- Castro, A, Uma Investigação Teórico-Experimental da Combustão de Madeira, *Master Thesis*, INPE, SP, Brazil, 2005.
- Costa, F.S., Castro, A., Burning of Wood Slabs in a Conical Calorimeter. Part II: Emissions, Oxygen Consumption and Exhaust Temperatures, *11th Brazilian Congress of Thermal Engineering and Sciences*, Curitiba, PR, Brazil, 2006.
- Castro, A., Costa, F.S., Effects of Diameter and Heat Flux on Burning Characteristics of Wood Cylinders, *18th International Congress of Mechanical Engineering*, Ouro Preto, MG, Brazil, 2005.
- Costa, F.S., Castro, A., Numerical Simulation of the Burning of Wood Cylinders, *18th International Congress of Mechanical Engineering*, Ouro Preto, MG, Brazil, 2005.
- Costa, F.S., Castro, A., Carvalho-Jr. J.A., Burning Characteristics of Wood Cylinders, *17th International Congress of Mechanical Engineering*, São Paulo, SP, Brazil, 2003.
- Crutzen, P.J., Andreae, M.O., Biomass Burning in the Tropics: Impact on Atmospheric Chemistry and Biogeochemical Cycles, *Science*, 250, 1669, 1990.
- Di Blasi, C., Branca, C., Sparano, S., La Mantia, B., Drying characteristics of wood cylinders for conditions pertinent to fixed-bed countercurrent gasification, *Biomass and Bioenergy*, v. 25, n. 1, p. 45-58, 2003.
- Kanury, A.M., Ignition of Cellulosic Solids: Minimum Pyrolysate Mass Flux Criterion, *Combustion Science and Technology*, Vol. 16, p.89, 1977.
- Galgano, A., Di Blasi, C., Modeling the Propagation of Drying and Decomposition Fronts in Wood, Combustion and Flame, Vol. 139: 16-27, 2004.
- Saastamoinen, J., Richard, J.R., Simultaneous Drying and Pyrolysis of Solid Fuel Particles, *Combustion and Flame*, Vol. 106: 288-300, 1996.
- Spearpoint, M.J., Predicting the Ignition and Burning Rate of Wood in the Cone Calorimeter using an Integral Model, Building and Fire Research Laboratory, *Report NIST GCR 99-775*, Maryland, USA, 1999.
- Spearpoint, M.J., Quintiere, J.G., Predicting the Burning of Wood using an Integral Model, *Combustion and Flame*, 123:308-324, 2001.
- Suuberg, E.M., Milosavljevic, I., Lilly, W. D., Behavior of charring materials in simulated fire environments, *Report NIST-GCR-94-645*, 651p., Gaithersburg, MD, 1994.

## OVERALL STUDY OF AIR/PROPANE COMBUSTION IN FLUIDIZED BEDS

### Leonardo Ribeiro

Departamento de Eng. Mecânica. Instituto Superior de Engenharia do Porto. Rua Dr. António Bernardino de Almeida, 431  
4200-072, Porto, Portugal  
lsr@isep.ipp.pt

### Carlos Pinho

CEFT-DEMEGI, Faculdade de Engenharia, Universidade do Porto, Rua Dr. Roberto Frias, s/n, 4200-465 Porto, Portugal  
ctp@fe.up.pt

**Abstract.** Commercial propane was used to study the combustion of volatiles released from coal particles burning in fluidized beds. A set of experiments was made with four different sizes of sand particles. In these experiments mixtures of air and propane were blown into the fluidized bed through the distributor. The fluidized bed was heated with an electrical resistance placed around the reactor. The following measurements were made: the dry molar fractions of CO<sub>2</sub>, CO and O<sub>2</sub> in the flue gases, the bed temperature and the intensity of the combustion noise. The objective was to determine the way fluidization disturbs the combustion mechanism of propane. For some experiments hematite, was introduced in the bed. A mathematical model concerning the tests performed without hematite, was developed to evaluate the concentrations of chemical species and temperature in bubbles, clouds and particulate phase, and also the mass and energy transfer between bubbles and particulate phase. The comparison between numerical and experimental results allowed a better understanding of the combustion of volatiles inside fluidized beds.

**Keywords.** combustion, fluidized bed, propane, volatiles.

### 1. Introduction

When a batch of particles of coal is thrown into a hot fluidized bed, the particles release their volatile material and the remaining coke particles begin to burn. The volatiles released by coal particles consist mainly of H<sub>2</sub>, CO, CH<sub>4</sub> and other higher hydrocarbons, Hesketh and Davidson (1991a and 1991b). The combustion of these higher hydrocarbons begins with their fragmentation into smaller hydrocarbons like propane, Westbrook and Dryer (1981), and because of this propane can represent well the volatiles released from coal. Consequently, the fuel used in this work was commercial propane with 91 % (w/w) of propane.

The explosions of propane and air mixtures in a fluidized bed can occur either inside the bed, at an unknown distance above the distributor, or above the free surface of the bed, Dennis et al. (1982), depending on the temperature. The temperature of the fluidized bed at which combustion takes place when the bubbles reach the free surface of the bed is known as critical temperature. For a bed hotter than the critical temperature, the bubbles burn inside the bed, while below the critical temperature the bubbles burn above the bed, (Dennis et al., 1982; Hayhurst, 1991; Ribeiro and Pinho, 1998; Hayhurst and Tucker, 1990).

Aoyagi and Kunii (1974) observed that the combustion of the volatiles released from coal particles burning inside fluidized beds takes place when these coal particles are inside the gas bubbles rising in the interior of the bed. In such situation and according to these authors, there is a flame around the burning coal particles and, as soon as the particles move into the clouds surrounding the bubbles, the flame extinguishes. Pillai (1981) studied the combustion of propane air mixtures in shallow beds and realized that the combustion reaction had to take place inside the bubble phase. Stubington et al. (1990) refer that the volatiles released from the coal particles either burn inside the bed or above its free surface. Hayhurst and Tucker (1990) and Hayhurst (1991) have shown that particles of coal burning in fluidized beds yield CO inside their own pores and that such CO burns in the bed, either inside the rising bubbles or above the free surface. Hayhurst (1991) has also shown that if the bed is composed by particles covered with platinum (catalyst), the CO formed at the surface of the coal particles by heterogeneous reactions burns in the particulate phase. Hesketh and Davidson (1991a) studied the combustion of coke in beds fluidized with mixtures of air and propane and concluded that the propane burns only inside the bubbles and never in the particulate phase. Hesketh and Davidson (1991b) studied also the combustion of stoichiometric mixtures of methane-air and propane-air in a bed working under incipient fluidizing conditions to find out if there were inhibition effects on the particulate phase for the gaseous phase combustion reactions.

Bulewicz et al. (1997), determined the composition of the off gases from shallow fluidized beds, with maximum depth of 15 mm, burning natural gas. They concluded that there is no connection between the composition of the flue gases and the sand size; that the CO concentration varied strongly with bed temperature at 900 °C; and that the NO concentration varied with temperature, bed depth and excess air.



Hayhurst and Parmar (1998) have shown that the formed CO in a bed working in the temperature range of 1000 up to 1400 K, burns to CO<sub>2</sub> either inside the bubbles or above the bed. Above 1400 K the combustion of CO takes place near the particles from where it was formed. They have also shown that the combustion of CO takes place close to the particles of coal when the size of particles of sand is small.

Ribeiro and Pinho (1998) also studied the burning of stoichiometric mixtures of methane and propane with air and defined an incubation parameter to link the pre-ignition delay with an average bubble rising time. Such parameter can broadly be defined as a Damkohler number (Kanury, 1977; Williams, 1985; Borman and Ragland, 1998) for combustion inside the bubbles of a fluidized bed. Ribeiro and Pinho (2004) measured the concentrations of CO<sub>2</sub>, CO and O<sub>2</sub> in the off gases and the noise level at the free board of deep fluidized beds, resulting from the combustion of pre-mixtures of propane and air. An overview of the curves of CO<sub>2</sub>, CO and O<sub>2</sub> mole fractions, with the fluidized bed operating conditions, allowed the definition of four categories of operational conditions by taking into account common trends.

Hayhurst and Lawrence (1996) studied the combustion of C<sub>5</sub>H<sub>5</sub>N in fluidized beds. In their experiments the particulate phase was composed either by sand or a mixture of sand and CaO and the fluidizing gas used was a mixture of O<sub>2</sub> and N<sub>2</sub>. The authors noticed that the presence of CaO in the particulate phase lowers the content of CO in the flue gases, but the kinetic mechanism that accelerates the burning of CO in the presence of CaO was not explained. Hayhurst and Lawrence (1997) studied, in a fluidized bed with particles of sand, the chemical reactions between iron and either iron oxides or the nitrogen oxides NO and N<sub>2</sub>O. The fluidizing gas used was nitrogen; NO and N<sub>2</sub>O were also blown into the fluidized bed.

Gokulakrishnan and Lawrence (1999) studied the combustion of C<sub>5</sub>H<sub>5</sub>N, mixed with traces of the catalyst HCl, in a fluidized bed of sand. The gas C<sub>5</sub>H<sub>5</sub>N was pre-mixed with HCl, and then this mixture was blown into the fluidized bed. The aim of the study was to determine the effect of HCl on the concentration of CO, NO<sub>x</sub> and N<sub>2</sub>O on the off gases. The authors concluded that HCl inhibits the creation of CO<sub>2</sub>, but increases the yielding of CO. On the other hand, the authors also found that an increase of the temperature of the fluidized bed entails a lower yielding of CO.

## 2. Experimental installation

The fluidized bed was contained in a refractory steel tube of internal diameter of 80 mm with a stainless steel plate distributor with 101 holes (0.3 mm diameter), drilled according to a 7 mm square pitch, Ribeiro and Pinho (1998). For some experiments the fluidized material was silica sand of group B, Geldart (1986), with four different sizes: 400-500 μm, 315-400 μm, 250-315 μm and 200-250 μm. In the remaining experiments hematite, with a grain size of 420-500 μm, was mixed in the particulate phase with the sand 400-500 μm, in such a way to get 5% (w/w) of hematite in the particulate phase. The bed was heated up by a 4.2 kW electrical resistance, placed around the reactor tube and inserted in refractory clay pieces. Two K-thermocouples were used to measure the temperature at two different locations in the fluidized bed, and were connected to a data acquisition system. Another identical K-thermocouple was connected to the controller of temperature of the fluidized bed. The uncertainty associated with these thermocouples is the maximum of 2.2 °C or 0.75 % of the reading. To measure the composition of the combustion gases, CO<sub>2</sub>, CO and O<sub>2</sub> analyzers were used. The CO<sub>2</sub> and CO analyzers were of non-dispersive infrared type; their precision was 0.5 % of the maximum scale reading; the maximum of scale for the CO<sub>2</sub> analyzer was 25 % and for the CO analyzer was 5 %. The O<sub>2</sub> paramagnetic analyzer had a linearity better than 0.1 %; its precision was under 0.1 %; and the reading was affected at most 0.05 % by the battery charge. To measure the sound level yielded by the combustion it was used a sonometer from TES model 1351, with a range from 35 to 130 dB, precision of ±1.5 dB, resolution of 0.1 and a delay of 125 ms; the curve of ponderation used was suitable for sounds of low intensity.

The gas sampling and suction probe was made of stainless steel, 4 mm inner diameter and 5 m in length. The collected gases were cooled to 50 °C before reaching the analyzers. The gas sampling and suction probe and the sonometer probe were placed about 10 cm above the bed at the fixed state. During each experiment the fluidized bed was heated from 400 to 900 °C, and at every four seconds, the readings of the three analyzers of the flue gas, the sonometer and the arithmetic mean of the readings of the two thermocouples immersed in the bed, were recorded. More details on the experimental procedure can be seen at Ribeiro and Pinho (2004).

## 2. Experimental results

### 2.1. Combustion of pre-mixtures of propane and air

Experiments were performed with four different sizes (400-500, 315-400, 250-315 and 200-250 μm), five static bed heights (10, 15, 20, 25 and 30 cm) and three different mass flow rates of reactants, Tab. (1), with 0, 10, 20 and 30 % excess air, giving a total of 240 experiments.

The fluidized beds were hydrodynamically characterized, for a given temperature  $T$ , and each sand size used, through velocities  $u(T)$ ,  $u_{mf}(T)$ , the ratio  $u/u_{mf}(T)$  and also by the definition of the threshold temperature for the appearance of slugs. Table (1) gives, for all sand sizes, the mass flow-rates, the mole fractions of air and propane in all

mixtures injected into the fluidized bed, and equations for  $u(T)$ . Table (2) presents the ratio  $u/u_{mf}(T)$ , for all experimentally studied situations.

Table 1. Mass flow-rates, mole fractions and  $u(T)$ . All sand sizes.

Excess Air	C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	Air	C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	Air	$u/T$
%	kg/min	kg/min	-	-	m/s/ K
0	$1.073 \times 10^{-3}$	$1.628 \times 10^{-2}$	0.040	0.960	$1.596 \times 10^{-4}$
0	$1.190 \times 10^{-3}$	$1.778 \times 10^{-2}$	0.040	0.960	$1.745 \times 10^{-4}$
0	$1.305 \times 10^{-3}$	$1.981 \times 10^{-2}$	0.040	0.960	$1.943 \times 10^{-4}$
10	$9.770 \times 10^{-4}$	$1.628 \times 10^{-2}$	0.037	0.963	$1.590 \times 10^{-4}$
10	$1.073 \times 10^{-3}$	$1.778 \times 10^{-2}$	0.037	0.963	$1.738 \times 10^{-4}$
10	$1.190 \times 10^{-3}$	$1.981 \times 10^{-2}$	0.037	0.963	$1.935 \times 10^{-4}$
20	$9.040 \times 10^{-4}$	$1.628 \times 10^{-2}$	0.034	0.966	$1.586 \times 10^{-4}$
20	$9.770 \times 10^{-4}$	$1.778 \times 10^{-2}$	0.034	0.966	$1.731 \times 10^{-4}$
20	$1.097 \times 10^{-3}$	$1.981 \times 10^{-2}$	0.034	0.966	$1.930 \times 10^{-4}$
30	$8.299 \times 10^{-4}$	$1.628 \times 10^{-2}$	0.031	0.969	$1.581 \times 10^{-4}$
30	$9.040 \times 10^{-4}$	$1.778 \times 10^{-2}$	0.031	0.969	$1.727 \times 10^{-4}$
30	$1.001 \times 10^{-3}$	$1.981 \times 10^{-2}$	0.031	0.969	$1.923 \times 10^{-4}$

Table 2. The ratio  $u/u_{mf}(T)$  for all situations experimentally studied.

Sand size	Air flow rate $1.628 \times 10^{-2}$ (kg/min)	Air flow rate $1.778 \times 10^{-2}$ (kg/min)	Air flow rate $1.981 \times 10^{-2}$ (kg/min)
200-250 $\mu\text{m}$	$u/u_{mf}=2.644 \times 10^{-5} \times T^{1.666}$	$u/u_{mf}=2.890 \times 10^{-5} \times T^{1.666}$	$u/u_{mf}=3.217 \times 10^{-5} \times T^{1.666}$
250-315 $\mu\text{m}$	$u/u_{mf}=1.810 \times 10^{-5} \times T^{1.666}$	$u/u_{mf}=1.976 \times 10^{-5} \times T^{1.666}$	$u/u_{mf}=2.200 \times 10^{-5} \times T^{1.666}$
315-400 $\mu\text{m}$	$u/u_{mf}=1.719 \times 10^{-5} \times T^{1.666}$	$u/u_{mf}=1.879 \times 10^{-5} \times T^{1.666}$	$u/u_{mf}=2.091 \times 10^{-5} \times T^{1.666}$
400-500 $\mu\text{m}$	$u/u_{mf}=1.636 \times 10^{-5} \times T^{1.666}$	$u/u_{mf}=1.789 \times 10^{-5} \times T^{1.666}$	$u/u_{mf}=1.991 \times 10^{-5} \times T^{1.666}$

It was noticed after analysing the dry mole fractions of CO<sub>2</sub>, CO and O<sub>2</sub> that the combustion of propane usually accelerates for temperatures of reactant mixture above 500 or 600 °C. Above this range, it is possible to detect four simultaneous phenomena: the generation velocities of CO<sub>2</sub> and CO accelerate sharply; the consumption of O<sub>2</sub> rises sharply; the noise level yielded by the combustion also increases sharply. These four phenomena occur owing to auto-ignition of reactant mixture in the fluidized bed.

In a closed vessel where there is a homogeneous mixture of air and propane at one atmosphere, the auto-ignition temperature is 480 °C, Monnot (1978). However, in all 240 tests, the auto-ignition temperature was found to be higher. This happens because the free radicals in a fluidized bed are more likely to collide with a solid surface than inside a closed vessel. These wall collision reactions entail heterogeneous chain termination reactions, (De Soete, 1976; Turns, 2000), disrupting the kinetic mechanism of combustion inside the bed, Dennis et al. (1982).

The mole fractions of CO<sub>2</sub>, CO and O<sub>2</sub> in the dried flue gases were measured and plotted towards the fluidized bed temperatures. The graphs were organized into four different types, according to the evolution of the CO<sub>2</sub>, CO and O<sub>2</sub>. Fig. (1) represents schematically these four types of graphs, with the corresponding CO<sub>2</sub>, CO and O<sub>2</sub> evolutions. In some cases, the values shown in y-axis indicate the peak value that can be attained by the mole fraction considered. For curves type III and IV, there is a disturbance around 750 °C, which will be explained later.

Table (3) presents the types of curves obtained for all performed tests. The types of graphs of Fig. (1) are mostly a function of the sand size and the depth of the fluidized bed. In the table there are cells with more than one type of graph assigned. In such cases the frequency of appearance of the type of graph diminishes from the left to the right, in the sequence contained in those cells.

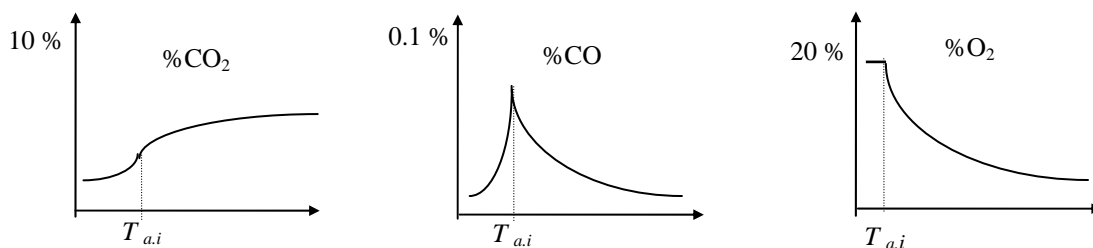
Graphs of type I are typical of situations when propane burns with the smaller sand sizes and for  $H_{mf} < 20$  cm, Tab. (3). The dry mole fraction of CO<sub>2</sub> increases with the temperature of fluidized bed after the auto-ignition; the dry mole fraction of CO drops to zero beyond 750-800 °C; the dry mole fraction of O<sub>2</sub> decreases as the temperature increases, which is in line with the increase of production of CO<sub>2</sub> as the temperature of the fluidized bed increases, see Fig. (1).

Graphs of type II are associated with the higher sand sizes and  $10 \text{ cm} < H_{mf} < 20$  cm. The dry mole fraction of CO<sub>2</sub>, at the moment of auto-ignition, rises sharply from 0 to around 5-6 %, and remains constant thereafter. The dry mole fraction of CO attains a peak at the temperature of auto-ignition and becomes almost zero for higher temperatures. The dry mole fraction of O<sub>2</sub> is 20.8 % up to the auto-ignition, drops abruptly to 8-11 % and stays around this value after the auto-ignition. As the sand size increases, the gas-solid contact surface in the particulate phase drops and the probability of free radicals generated inside the bubbles of avoiding wall collision reactions, after being transferred to the particulate phase, increases too. Since the number of radicals in the particulate phase increases, the acceleration effect of these radicals is enhanced when they re-enter the bubbles.

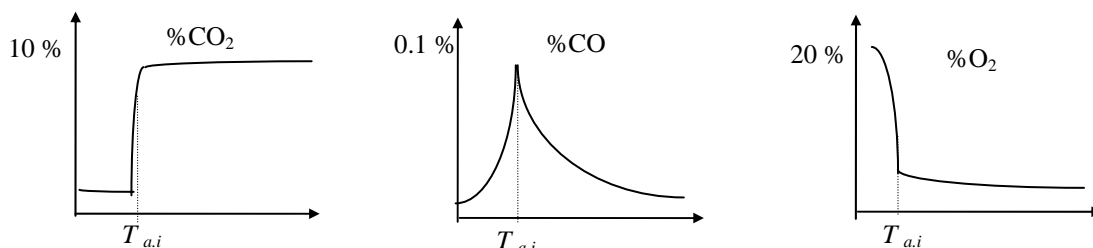
Table 3. The ratio  $u/u_{mf}(T)$  for all situations experimentally studied.

$H_{mf}$ (cm)	Curve types			
30	III	III/IV	III/IV	III/IV
25	III	I/III	I/II/IV	I/III/II/IV
20	I	I/II	I/II	I/II/IV
15	I	I/II	I/II	II/I/III
10	I	I/II	I/II	II/I
Sand size ( $\mu\text{m}$ )	-250+200	-315+250	-400+315	-500+400

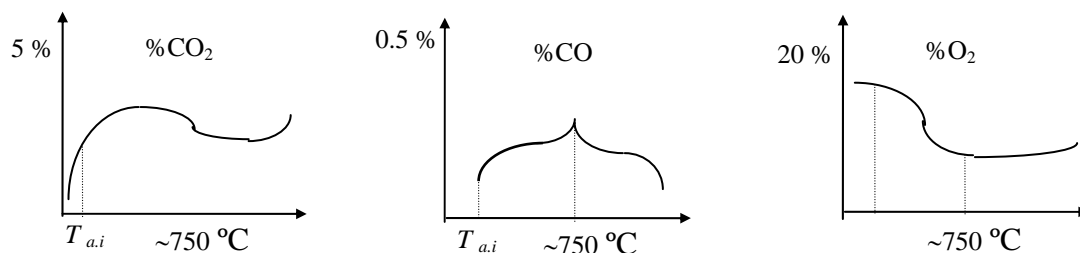
**Curves Type I**



**Curves Type II**



**Curves Type III**



**Curves Type IV**

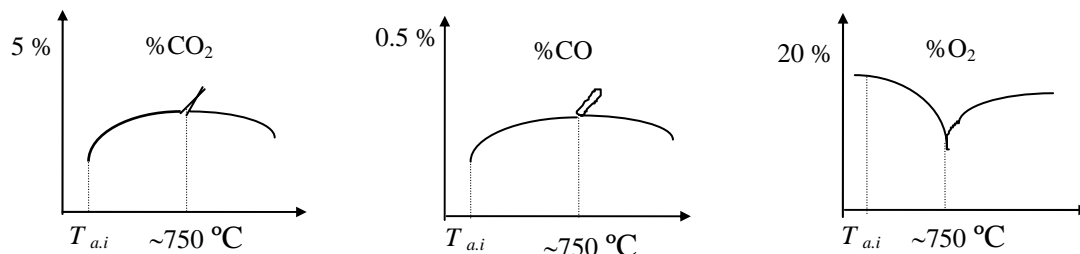


Figure 1. Curve types of dry mole fractions against the fluidized bed temperature.

Type III graphs are related with  $H_{mf} > 20$  cm. The dry mole fraction of  $CO_2$  rises slightly after the auto-ignition of the mixture, around 600-650 °C, up to 5-7 % attained at about 700-750 °C. The dry mole fraction of CO increases with temperature from the auto-ignition up to 700 °C; at this temperature, the dry mole fraction of CO drops slightly, and resumes rising at 700 °C up to 750 °C, where it attains a peak; beyond 700-750 °C the dry mole fraction of CO decreases slightly with temperature until it becomes almost zero, above 850 °C.

As seen in graphs of either type I or type II, the peak of dry mole fraction of CO in the off gases coincides with the auto-ignition of the mixture. The most interesting feature of the graphs of type III consists in that the peak of dry mole fraction of CO in the off gases occurs about 100 °C above the auto-ignition temperature. This is likely a consequence of the appearance of slugs inside the fluidized bed, which entails a mixing of packs of sand among bed regions at different temperatures. The result is a sharp drop of the temperature of the fluidized bed in the formerly hotter zones and the partial quenching of the combustion. This explains the peak of dry mole fraction of CO about 100 °C beyond the auto-ignition temperature.

Type IV graphs only appear for beds with  $H_{mf} \geq 25$  cm, Tab. (3). Typical curves of  $CO_2$ , CO and  $O_2$  mole fraction against the temperature of the fluidized bed are shown in Fig. (2). In this graph there is a feature not found in the previous situations, the disturbance that appears in the curves around 750 °C. For a deep bed, when the temperature reaches 750 °C its value drops steeply to 730 °C, and thereafter it resumes increasing. This disturbance is due to the appearance of slugs whose ascensions induce transfer of portions of sand between hotter and colder zones of the fluidized bed. In the shallow fluidized beds there are no slugs, so the curve of temperature against heating time has a shape without disturbances, Ribeiro and Pinho (2004).

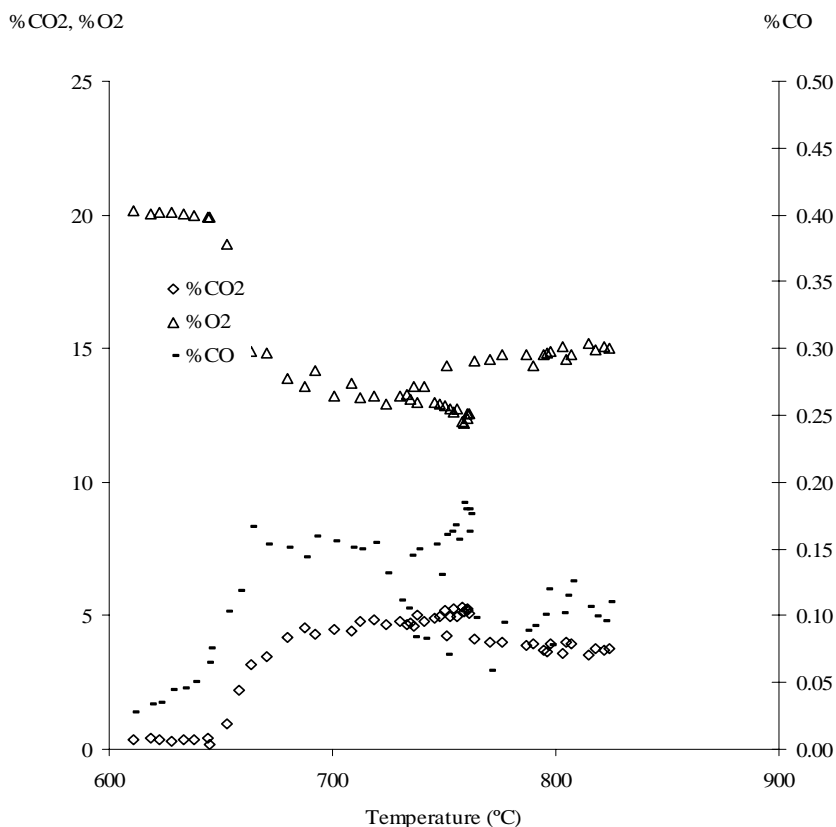


Figure 2. Mole percentage of  $CO_2$ , CO and  $O_2$  against temperature of the fluidized bed.  $H_{mf} = 30$  cm; sand size: 315-400  $\mu\text{m}$ ; air and propane with 30 % of excess air; air:  $1.628 \times 10^{-2}$  kg/min; propane:  $8.299 \times 10^{-4}$  kg/min.  $u/u_{mf} = 1.719 \times 10^{-5} \times T^{1.666}$ , with  $T$  in Kelvin.

It was noticed that, for a given temperature, a fluidized bed yields more CO as its depth increases. All CO in flue gases is generated inside the bubbles, and is partially transferred by diffusion and advection from the bubbles to the particulate phase. If inside the bubbles the hydrocarbons disappear, then the existing CO will be converted in  $CO_2$ , while the CO existing in the particulate phase must remain unchanged owing to the quenching of reactions. Therefore, for a given temperature and provided the bubbles only explode above the free surface of the fluidized bed, the bed yields more CO as its height increases, because bubbles have more time to generate CO and to transfer it to the particulate phase. If a bubble explodes inside the fluidized bed, its yielding of CO will increase as the time elapsed after its formation at the distributor up to its explosion, increases.

## 2.2. Combustion of pre-mixtures of propane and air in a silica sand fluidized bed with hematite

It was also studied the combustion of air propane mixtures in fluidized beds, but with the catalyst hematite. The composition of the flue gases and the sound level at the freeboard were measured and recorded. The results obtained with the reactor containing just sand were compared with homologous results obtained in the same reactor containing the mixture of hematite and sand. The bed material was silica sand of 400-500  $\mu\text{m}$  and the hematite grain size was of 420-500  $\mu\text{m}$ . The mass fraction of hematite in the particulate phase was 5%. Five static bed heights were considered: 10, 15, 20, 25 and 30 cm. The value of  $H_{mf}$  was considered equal to the static height of the fluidized bed. Only one flow rate of reactant mixture was used in all experiments, corresponding to a stoichiometric mixture:  $1.073 \times 10^{-6}$  kg/min of propane and  $1.628 \times 10^{-2}$  kg/min of air.

From the experiments no clear influence was found of the use of hematite upon the auto-ignition temperature of the gaseous reactant mixture, Table (4). However when there is hematite in the bed, combustion always started inside the bed whereas without hematite combustion always started above the bed free surface and only after the bed temperature reached the critical value, the reaction moved inside the particulate phase.

Table 4. Characteristic bed temperatures. Without (nh) and with (wh) hematite.

Bed depth [cm]	Auto-ignition temperature (nh) [°C]	Critical temperature (nh) [°C]	Auto-ignition temperature (wh) [°C]
10	623 to 632	940	601 to 602
15	546 to 550	930	547 to 550
20	546 to 554	770	560
25	564	740	428
30	619	730	not measured

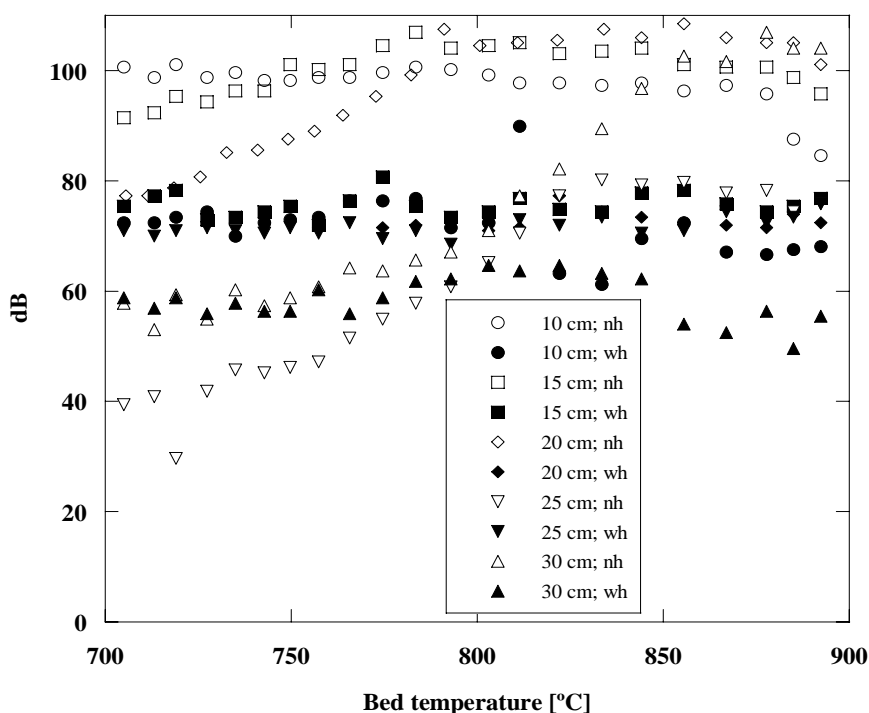


Figure 3. Noise level in function of the temperature of the fluidized bed for all tested bed depths, without (nh) and with (wh) hematite.

It was observed visually that without hematite and between the auto-ignition temperature and the critical temperature, violet flames stood above the bed, and disappeared when the bed critical temperature was reached. On the other hand, with hematite in the bed, no clear distinction between auto-ignition and critical temperature could be detected. In such circumstances the combustion always took place inside the bed, and the noise level was always around 70 dB.

As far as combustion noise and exhaust gases composition during normal combustion are concerned, in the present work only data obtained in the temperature range of 700 to 900  $^{\circ}\text{C}$ , where the combustion is already well developed, are analysed and discussed. It was noticed that the sound level yielded by the combustion is louder for all experiments without hematite for beds of 10, 15 and 20 cm depth. For the 25 cm depth bed the sound level is almost equal for both situations whereas for the deeper bed, 30 cm, the combustion with hematite is noisier, Fig. (3). It can be said that when

there is hematite in the solid phase the combustion noise is around 70 dB for all bed temperatures in the 700 to 900 °C range. During all the experiments with hematite the characteristic crackling of the combustion of gaseous mixtures in fluidized beds was not heard. At the free board it was not seen either explosions of bubbles or a continuous violet flame. In fact, the colour of the free surface was always bright orange.

The dry mole fractions of CO<sub>2</sub> and CO in the exhaust gases at the free board are higher when in the particulate phase there is hematite compared with the case when the particulate phase only contains sand, Figs. (4) and (5). The presence of hematite in the particulate phase tends to accelerate the chemical reactions of combustion. Indeed, the hematite tends to speed up the auto-ignition of the mixture; on the other hand, with hematite it is likely that bubbles will explode near the distributor on account of the low level of noise yielded by the combustion. Besides, as the particles of hematite stay outside the bubbles, then if the concentrations of CO<sub>2</sub> and CO in the off gases at the free board increase when in the particulate phase there is hematite, such increase is owing to the fact that the kinetic mechanism is not completely quenched in the particulate phase.

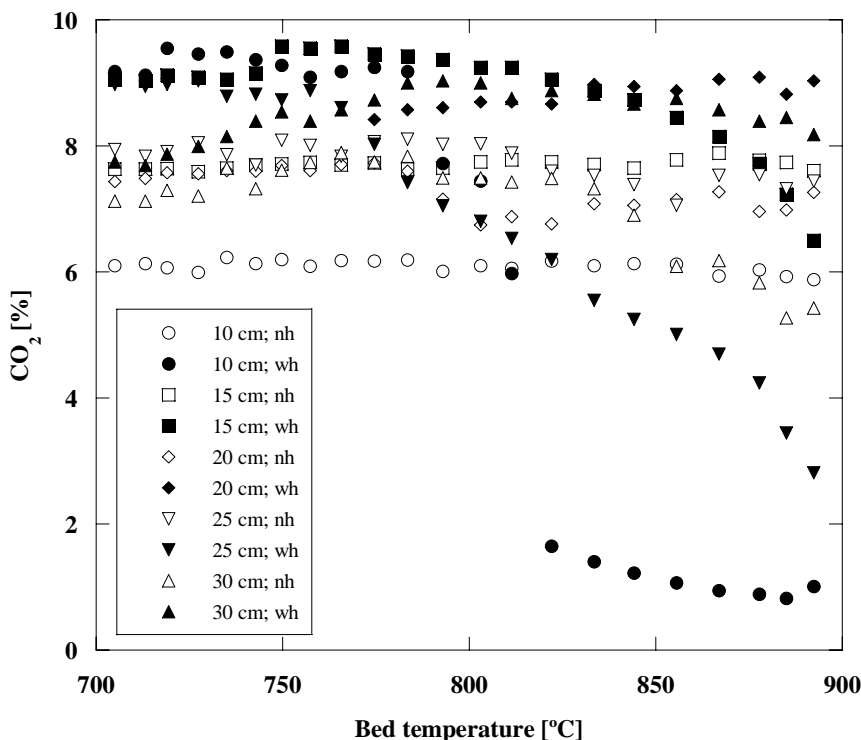


Figure 4. %CO<sub>2</sub> function of the fluidized bed temperature for all tested depths, without (nh) and with (wh) hematite.

### 3. Mathematical model

A mathematical model is proposed to show the evolution of temperature, chemical composition and energy release or transfer in bubbles, clouds and particulate phase, in a fluidized bed where there are bubbles, of a mixture of air and propane, moving up through the particulate phase. The analysis begins as the bubbles are formed at the orifices of the distributor, until they explode inside the bed or emerge at the free surface. The model also analyses of what happens in the gaseous mixture that leaves the free surface of the fluidized bed until the propane is thoroughly burnt. It is essentially built upon a simple quasi-global mechanism for the combustion reaction and the mass and heat transfer equations from the two-phase model of fluidization. The aim was not to propose a new modelling approach, but to combine classical models, one concerning the reaction kinetics and the other the bed hydrodynamic aspects, to obtain a better insight on the events occurring inside a fluidized bed reactor. Experimental data to validate the numerical model were obtained through tests on the combustion of commercial propane, in a laboratory scale fluidized bed, using four sand particle sizes: 400-500, 315-400, 250-315 and 200-250 μm. The mole fractions of CO<sub>2</sub>, CO and O<sub>2</sub> in the flue gases and the temperature of the fluidized bed were measured and compared with the numerical results.

The philosophy adopted consisted in the coupling of classic and well established models for the overall kinetics of combustion and for the hydrodynamics of the bed. The global kinetic mechanism for the combustion of hydrocarbons proposed by Hautman *et al.* (1981) was chosen; besides, as the backbone for the bed hydrodynamics, it was chosen the classic two phase theory of fluidization of Davidson and Harrison (1963), although it was followed the approach of Kunii and Levenspiel (1990). Although more recent global kinetic mechanisms for the combustion of hydrocarbons could be applied, they all follow the same basic assumptions, as can be seen in the review of Westbrook and Dryer (1981), and the final result is not at all different from what can be obtained through the adopted mechanism.

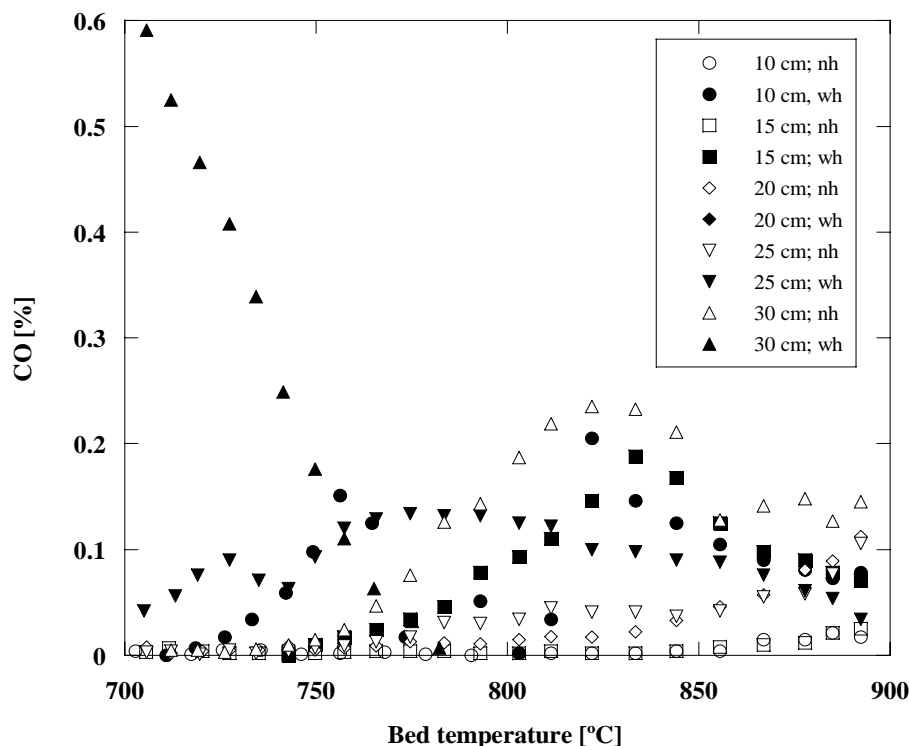


Figure 5. %CO function of the fluidized bed temperature for all tested depths, without (nh) and with (wh) hematite.

The kinetic mechanisms do not proceed in the particulate phase owing to quenching by heterogeneous reactions, Aoyagi and Kunii (1974), Ribeiro and Pinho (2004). So, it will be assumed that the kinetic mechanisms only proceed within the bubbles, and are quenched outside them. Besides, the rising of the bubbles along the fluidized bed entail intense advection of sand in the particulate phase, and therefore the particulate phase will be considered as well stirred.

As a result of the turbulence created inside the bubbles by cross flow, it will be assumed in this model that the gaseous mixture inside the bubbles is well stirred. The chemical composition of the bubbles will then be a function of the time elapsed since they were generated at the distributor.

The adopted global kinetic mechanism for the combustion of mixtures of air and propane is composed by the following four reactions, Hautman et al. (1981),



The authors also proposed equations to evaluate the rate of each of the previous four chemical reactions. These rate equations were integrated using a fourth order Runge-Kutta numerical scheme.

Bubbles in a fluidized bed are surrounded by clouds and outside these clouds there is the particulate phase. The chemical species generated inside a bubble are transferred to the cloud by two processes: diffusion and advection of gas between the cloud and the bubble. The overall mass transfer coefficient of species  $i$  between a bubble and the respective cloud,  $(K_{bn})_b(i)$ , based on the volume of the bubble, is given by, Kunii and Levenspiel (1990),

$$(K_{bn})_b(i) = 4.5 \frac{u_{mf}}{D_e} + 5.85 \frac{D_{Ei-N_2}^{0.5} g^{0.25}}{D_e^{1.25}} \quad (5)$$

where  $u_{mf}$  is the incipient fluidization velocity,  $D_e$  is the equivalent diameter of the bubble and  $D_{Ei-N_2}$  is the diffusivity of species  $i$  on  $N_2$ . The equivalent diameter  $D_e$  of the bubbles existing in the fluidized bed at the level  $z$ , measured from the distributor, can be evaluated through, Darton et al. (1977),

$$D_e = 0.54(u - u_{mf})^{2/5} (z + 4.0\sqrt{A_0})^{4/5} g^{-1/5}. \quad (6)$$

where  $A_0$  is the distributor area per each orifice and  $u$  is the superficial velocity of the gas crossing the reactor.

The bubbles contain many chemical species that are represented by a set of eight species, C<sub>3</sub>H<sub>8</sub>, C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>, CO<sub>2</sub>, CO, H<sub>2</sub>, O<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O and N<sub>2</sub>, Hautman et al. (1981). It was assumed that the diffusivity of species  $E_i$  from a bubble to its cloud is nearly the diffusivity of species  $E_i$  to N<sub>2</sub>,  $D_{E_i-N_2}$ , Kanury (1977) and Borman and Ragland (1998). Therefore, the concentrations of chemical species existing inside bubbles at the instant  $t$ , evaluated through the rate equations of the kinetic mechanism, must be corrected in order to account for the mass transfer between bubbles and their clouds during the time interval  $\Delta t$ . It means that two physically simultaneous phenomena were mathematically uncoupled: one of these phenomena consists on the generation of species owing to the kinetic mechanism; the other consists on the species transfer from bubbles to their surrounding clouds. That separation will be more accurate as  $\Delta t$  diminishes.

There is also mass transfer between the clouds and the particulate phase. The mass transfer occurs only by diffusion, and the overall mass transfer coefficient between a cloud and the particulate phase for species  $i$ , based on the volume of the bubble,  $(K_{ne})_b(i)$ , is given by, Kunii and Levenspiel (1990),

$$(K_{ne})_b(i) \approx 6.78 \left( \frac{\varepsilon_{mf} D_{E_i-N_2} u_b}{D_e^3} \right)^{0.5} \quad (7)$$

The rate of temporal variation of the concentrations of chemical species in the particulate phase was obtained through a balance for a generic species  $E_i$ : the temporal variation of the number of moles of  $E_i$  in the particulate phase equals the difference between the mole flow-rate of  $E_i$  that enters the particulate phase through the distributor, and the mole flow-rate of  $E_i$  that leaves the particulate phase through the free surface of the fluidized bed, plus the mole flow-rate of  $E_i$  that issues from the clouds into the particulate phase.

The temperature of a bubble changes because: (i) among the set of reactions, Eqs. (1) to (4), the first is endothermic while the other three are exothermic; (ii) there is heat transfer by conduction between bubbles and clouds and particulate phase; (iii) there is mass transfer between bubbles and clouds. The overall heat transfer coefficient between a bubble and its surrounding cloud, based on the volume of the bubble, is given by, Kunii and Levenspiel (1990),

$$(U_{bn})_b = 4.5 \left( \frac{u_{mf} \rho_b c_{pb}}{D_e} \right) + 5.85 \frac{(\lambda_b \rho_b c_{pb})^{1/2} g^{1/4}}{D_e^{5/4}} \quad (8)$$

The thermal conductivity of the gas of a bubble  $\lambda_b$ , was considered equal to the thermal conductivity of the air. This was done because the gas of the bubbles is not very much different from air.

The temperature of the bubbles was evaluated by

$$\rho_b c_{pb} \frac{dT_b}{dt} = Q \quad (9)$$

where  $\rho_b c_{pb}$  is the calorific capacity of the bubble and  $Q$  encompasses the net calorific power per volume of bubble generated by all chemical reactions occurring inside the bubble and the net calorific power entering into the bubble owing to heat conduction and cross-flow. The mathematical model evaluated the temperature of the bubble at the instant  $t+\Delta t$  with the temperature of the bubble at  $t$  and the value of  $Q$  corresponding to the net calorific power of the bubble during  $\Delta t$ .

As stated before the bubbles can explode inside the fluidized bed. From the model of Hautman *et al.* (1981) it can be concluded that these explosions are triggered by the disappearance of propane in the bubbles, which in turn entails the disappearance of intermediate hydrocarbons in the bubbles at, theoretically, infinite velocity. If inside the bubbles there is enough amount of oxygen, the intermediate hydrocarbons will be converted suddenly and thoroughly into carbon monoxide and hydrogen, Eq. (2). If inside the bubbles there is not enough oxygen for the complete oxidation of intermediate hydrocarbons according the reaction (2), the proposed model will assume that intermediate hydrocarbons will be converted into carbon monoxide and hydrogen until the extinction of oxygen, which means that in this case there will be intermediate hydrocarbons unburned inside the bubbles after the explosions. The model of Hautman *et al.* (1981) predicts that the extinction of intermediate hydrocarbons triggers the extinction of hydrogen at very high velocity. If inside the bubbles after the complete oxidation of intermediate hydrocarbons there is enough amount of oxygen to burn hydrogen, then the hydrogen will be converted suddenly and totally into water, Eq. (4). If inside the bubbles there is not enough oxygen for the complete oxidation of hydrogen according to Eq. (4), then the model will assume that hydrogen will be converted into water until the extinction of oxygen, which entails that in this case there will be unburned hydrogen inside the bubbles after the explosions.

When bubbles explode inside the fluidized bed, the matter that constitutes them will be thrown away in all directions and at high speed. Hayhurst (1991) noticed that from that matter thrown away results new bubbles. Since the chemical composition of these new bubbles is equal to the chemical composition of the original ones, then the equivalence ratio of the mixture of the new bubbles should be very high. So, the velocity of combustion of CO will be



very slow inside the new bubbles and it is plausible to assume that the kinetic mechanism is frozen inside these new bubbles. In the particulate phase, it was already said that this mechanism is frozen. Therefore, the proposed model neglects everything that eventually happens since the bubbles explode inside the fluidized bed until they surface. When the bubbles surface, the model assumes that the gas from bubbles mixes adiabatically and at constant pressure with the gas leaving the fluidized bed from the particulate phase

The number of moles of chemical species existing in bubbles when these bubbles surface, was obtained multiplying the species concentration  $[E_i b(t_{expl.})]$ , by the total volume of bubbles with age  $t$ ,  $V_{b-total}$ , evaluated according Mori and Wen (1975), by

$$V_{b-total} = 2.300 \left[ A (u - u_{mf}) \right]^{6/5} \quad (10)$$

If the bubbles do not explode inside the fluidized bed the model assumes that gases from bubbles mix adiabatically and at constant pressure with gases coming from the particulate phase at the free surface of the fluidized bed. The rising time of bubbles across the fluidized bed  $t_{sub}$ , was evaluated by the following equation, Ribeiro and Pinho (1998),

$$t_{sub} = \frac{H}{\bar{U}_b} = \frac{H^2}{(u - u_{mf})H + 0,93(u - u_{mf})^{1/5} \left[ (H + 4\sqrt{A_0})^{7/5} - (4\sqrt{A_0})^{7/5} \right]} \quad (11)$$

Above the free surface of the fluidized bed the model applies the kinetic mechanism of Hautman et al. (1981) to the mixture of gas from bubbles and of gas from the particulate phase.

The initial concentrations of propane, oxygen and nitrogen in the bubbles were calculated with the flow-rates of propane and air, assuming that the bubbles were at atmospheric pressure and initially at the environment temperature. For the intermediate hydrocarbons,  $C_2H_4$  in the model, and for  $CO$ ,  $H_2$  and  $H_2O$ , initial concentrations different of zero were considered. It was adopted as the initial concentrations for all these species one thousandth of the initial concentration of propane. The rising of the bubbles along the fluidized bed entails intense advection of sand in the particulate phase, and therefore the particulate phase will be considered as well stirred. For this phase, the initial concentrations for  $C_3H_8$ ,  $C_2H_4$ ,  $CO_2$ ,  $CO$ ,  $H_2$  and  $H_2O$  were taken as zero; the initial concentrations for  $N_2$  and  $O_2$  were the same as in the environment.

The computer program can perform calculations until the complete combustion of fuel, but it was assumed that the chemical reactions are quenched at the instant when the calculated dry mole fractions of  $CO_2$ ,  $CO$  and  $O_2$ , on the flue gases leaving the fluidized bed, are the closest to the homologous measured values.

#### 4. Numerical results

For each of the four sand particle sizes used in this study were done twelve simulations covering three different bed temperatures (973, 1073 and 1173 K), four bed heights (0.1, 0.15, 0.2 and 0.25 m), for the same reactant volumetric flow rate ( $2.3518 \times 10^{-4} \text{ m}^3/\text{s}$ ), under stoichiometric conditions. The discussion herein concerns only the temperatures inside the bubbles obtained for just three of those simulations, for the sand size of 400-500  $\mu\text{m}$ . Data corresponding to these three simulations are given in Tab. (5). These three cases are paradigmatic of the situations that can occur during the combustion of a gaseous mixture of air and propane in a fluidized bed: explosion of bubbles above the free surface of the fluidized bed, near the free surface of the fluidizing bed, and inside the fluidized bed.

Table 5. Conditions for the numerical simulations.

		Simulation 1	Simulation 2	Simulation 3
$u_{mf}$ (20 °C, 101325 Pa)	m/s	$3.01 \times 10^{-4}$	$3.01 \times 10^{-4}$	$2.20 \times 10^{-4}$
$u/u_{mf}$	-	1.56	1.56	2.12
$H_{mf}$	m	0.10	0.25	0.10
$T$	K	973	973	1173
$V_{mist}$ (20 °C, 101325 Pa)	$\text{m}^3/\text{s}$	$2.3518 \times 10^{-4}$	$2.3518 \times 10^{-4}$	$2.3518 \times 10^{-4}$

Figure (6) shows the evolution of temperature of the bubbles, as they rise inside the bed, for the three simulations under analysis. In simulation 1 the temperature of the bubbles diminishes as the bubbles rise along the fluidized bed. This temperature drop can be understood with the balance of the energy generated per volume of bubble through the exothermic chemical reactions (2), (3) and (4) and the endothermic reaction (1), as well as the energy per volume of bubble transferred by the bubbles to clouds and to the particulate phase. The sum of all these energetic components is negative. It can be seen through the curve for simulation 2 that the temperature inside the bubbles drops as these bubbles rise until about 0.15 m; above this level the temperature of bubbles increases slightly. The initial drop of the temperature of bubbles occurs because the cooling effect of endothermic reaction (1) outweighs the heating effect of

reactions (2), (3) and (4), which are exothermic. Above the level 0.15 m the exothermic reactions accelerate the release of heat. For simulation 3 the bubbles of reactant mixture explode approximately at the level 0.0025 m, inside the fluidized bed, near the distributor. When bubbles explode, the energy absorbed by reaction (1) increases swiftly up to a peak, and after this peak it drops to zero almost instantaneously. That increase of energy release occurs because the propane existing inside the bubbles breaks at high speed during explosion and generates intermediate hydrocarbons; the ensuing drop of energy release is owing to the disappearance of propane during explosion of bubbles. The explosion is induced by the large production of thermal energy through reactions (2), (3) and (4).

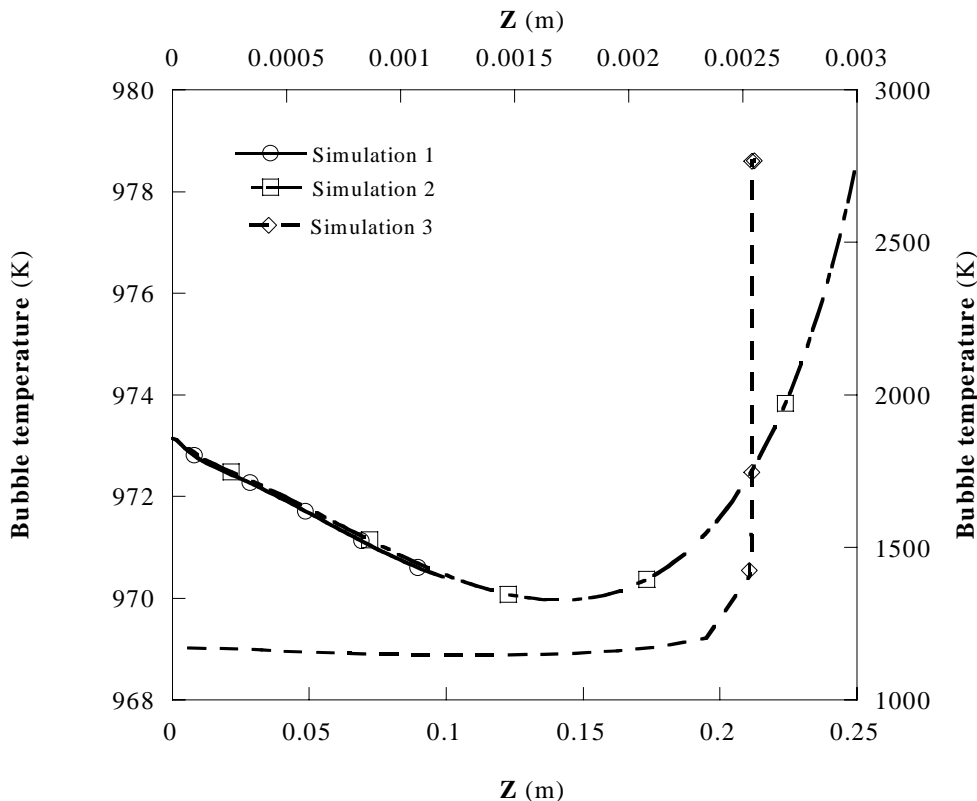


Figure 6. Temperature of the bubbles. Simulations 1 and 2 refer to the lower abscissa and the left ordinate axis. Simulation 3 refers to the upper abscissa and the right ordinate.

Table 6. Comparison among measured and calculated values for dry mole fractions of gaseous species.

Simulation	Calculated values				Measured values		
	Temperature	CO <sub>2</sub>	CO	O <sub>2</sub>	CO <sub>2</sub>	CO	O <sub>2</sub>
-	K	%	%	%	%	%	%
1	2199	6.39	0.01	10.34	5.9	0.008	12.0
2	2210	6.55	0.04	10.08	7.0	0.04	10.0
3	2226	6.06	0.003	10.84	6.5	0.003	11.5

#### 4.4 Comparison between measured and calculated values

In Tab. (6) are presented the calculated and the measured values for the situations of simulations 1, 2 and 3. The computer program can perform calculations until the complete combustion of fuel, but it was assumed that the chemical reactions are quenched at the instant when the calculated dry mole fractions of CO<sub>2</sub>, CO and O<sub>2</sub>, on the flue gases leaving the fluidized bed, are the closest of the homologous measured values.

The departure between calculated and measured dry mole fractions of CO<sub>2</sub>, CO and O<sub>2</sub> in the flue gas seldom exceeds 10 % of the measured value, for all studied situations.

#### 4.4 Conclusions

Results of experimental and numerical experiments concerning the overall behaviour of commercial propane combustion in a laboratory scale bubbling fluidized bed reactor were presented. The importance of using a low cost catalyst on pollutants emission and noise reduction was shown.

The simple numerical model allowed a better understanding of the combustion reactions taking place inside the bubble phase. A close approach was obtained among measured and calculated gas dry mole fractions at bed exit.

## 6. References

- Aoyagi, M. and Kunii, D., 1974, "Importance of dispersed solids in bubbles for exothermic reactions in fluidized beds", *Chem. Eng. Commun.*, pp. 191-197.
- Borman, G.L. and Ragland, K.W., 1998, "Combustion Engineering", McGraw-Hill International Editions.
- Bulewicz, Elzbieta M., Kadenfer S. and Pilawska M. (1997), "Natural gas combustion in a bed of sand", *Fluidized Bed Combustion*, Vol. 2, ASME 1997.
- Darton, R. C., LaNauze, R.D., Davidson, J.F. and Harrison, D., 1977, "Bubble Growth Due to Coalescence in Fluidized Beds", *Trans. I. Chem. E.*, Vol. 55, p. 274-279.
- Davidson, J. F., and Harrison, D., 1963, "Fluidised particles", Cambridge University Press of Cambridge.
- De Soete, G., 1970, "Aspects fondamentaux de la Combustion en phase gazeuse", Editions Technip, Paris.
- Dennis, J. S., Hayhurst A.N. and Mackley, I.G., 1982, "The Ignition and Combustion of Propane/Air Mixtures in a Fluidized Bed", Nineteenth Symposium (International) on Combustion, The Combustion Institute, p. 1205-1212.
- Geldart, D., 1986, "Gas Fluidization Technology", John Wiley and Sons Ltd.
- Gokulakrishnan, P., Lawrence, A. D., 1999, "An experimental study of the inhibiting effect of chlorine in a fluidized bed combustor", *Combustion and Flame*, Vol. 116, p. 640-652.
- Hautman, D. J., Dryer, F. L., Schug, K. P. and Glassman, I., 1981, "A multiple-step overall kinetic mechanism for the oxidation of hydrocarbons", *Combustion Science and Technology*, Vol. 25, p. 219-235.
- Hayhurst, A. N., 1991, "Does Carbon Monoxide Burn Inside a Fluidized Bed? A New Model for the Combustion of Coal Char Particles in Fluidized Beds", *Combustion and Flame*, Vol. 85, p. 155-168.
- Hayhurst, A. N., Lawrence, A. D., 1996, "The effect of solid CaO on the production of NO<sub>x</sub> and N<sub>2</sub>O in fluidized bed combustors: studies using pyridine as a prototypical nitrogenous fuel", *Combustion and Flame*, Vol. 105, p. 511-527.
- Hayhurst, A. N. and Lawrence, A. D., 1997, "The reduction of nitrogen oxides NO and N<sub>2</sub>O to molecular nitrogen in the presence of iron, its oxides, and carbon monoxide in a hot fluidized bed". *Combustion and Flame*, Vol. 110, p. 351-365.
- Hayhurst, A. N. and Parmar, M. S., 1998, "Does solid carbon burn in oxygen to give the gaseous intermediate CO or produce CO<sub>2</sub> directly? Some experiments in a hot bed of sand fluidized by air", *Chemical Engineering Science*, Vol. 53, N 3, pp. 427-438.
- Hayhurst, A. N. and Tucker, R. F., 1990, "The combustion of carbon monoxide in a two-zone fluidized bed", *Combustion and Flame*, Vol. 79, pp. 175-189.
- Hesketh, R. P. and Davidson, J. F., 1991a, "The effect of volatiles on the combustion of char in a fluidised bed", *Chemical Engineering Science*, Vol. 46, N 12, pp. 3101-3113.
- Hesketh, R. P. and Davidson, J. F., 1991b, "Combustion of methane and propane in an incipiently fluidized bed", *Combustion and Flame*, Vol. 85, pp. 449-467.
- Kanury, A. M., 1977, "Introduction to Combustion Phenomena", Gordon and Breach Science Publishers.
- Kunii, D. and Levenspiel, O., 1990, "Fluidization Engineering", Butterworth-Heinemann.
- Monnot, G., 1978, "La Combustion dans les fours et les chaudières", Editions Technip.
- Mori, S., and Wen, C. Y., 1975, "Estimation of bubble diameter in gaseous fluidized beds", *A.I.Ch.E. Journal*, Vol 21, N 1, p. 109-115.
- Pillai, K. K., 1981, "The influence of coal type on devolatilization and combustion in fluidized beds", *Journal of the Institute of Energy*, Vol. 142, pp. 142-150.
- Ribeiro, L. and Pinho, C. M. C. T., 1998, "Combustion of propane and methane in the bubbles of a fluidized bed", *Symposium on Thermal and Fluids Engineering, CSME Forum '98*, Vol. 1, pp.33-40, Toronto, Ontario, Canada.
- Ribeiro, L. and Pinho, C., 2004, "Generic Behaviour of Propane Combustion in Fluidized Bed", *Chemical Engineering Research and Design*, Vol. 82 (A12), p. 1597-1603.
- Stubington, J. F., Chan, S. W. and Clough, S. J., 1990, "A model for volatiles release into a bubbling fluidised bed combustor", *A.I.Ch.E. Journal*, Vol. 36, pp. 75-85.
- Turns, S. R., 2000, "An Introduction to Combustion", McGraw-Hill International Editions.
- Westbrook, C. K., Dryer, F. L., 1981, "Simplified reaction mechanisms for the oxidation of hydrocarbon fuels in flames", *Combustion Science and Technology*, Vol. 27, p. 31-43.
- Williams, F.A., 1985, "Combustion Theory", 2<sup>nd</sup> edition, Perseus Books Publishing, Cambridge, Massachusetts.

## INFLUENCE OF THE TYPE OF OXIDANT IN THE COMBUSTION OF LIQUID FUEL INSIDE AN ALUMINUM MELTING FURNACE

### Angela O. Nieckele

Department of Mechanical Engineering, PUC/Rio; R. Marquês de São Vicente 225 - 22453-900, RJ, RJ, BRAZIL  
nieckele@mec.puc-rio.br

### Monica F. Naccache

Department of Mechanical Engineering, PUC/Rio; R. Marquês de São Vicente 225 - 22453-900, RJ, RJ, BRAZIL  
naccache@mec.puc-rio.br

### Marcos Sebastião de Paula Gomes

Department of Mechanical Engineering, PUC/Rio; R. Marquês de São Vicente 225 - 22453-900, RJ, RJ, BRAZIL  
mospgomes@mec.puc-rio.br

### Rafael Cezar Menezes

Department of Mechanical Engineering, PUC/Rio; R. Marquês de São Vicente 225 - 22453-900, RJ, RJ, BRAZIL  
rcezar@mec.puc-rio.br

**Abstract.** *The fuel used as energy source for an aluminum melting is of extreme importance for a better performance, however, the type of oxidant can also lead to better performance, leading to a greater preservation of the equipments. Air is more abundant and cheaper, however due to the presence of nitrogen, there is undesirable NOx formation. An alternative is to employ pure oxygen. Although, it is the more expensive, it can lead to a cleaner and much more efficient combustion process, by significantly altering the combustion aspects inside the furnace, such as the shape of the flame and the distribution of temperature and heat flux. In the present work, numerical simulations were carried out using the commercial package FLUENT, analyzing different cases with pure oxygen and air as the oxidant for the combustion of liquid fuel. The results showed the possible damages caused by the process if long or too intense and concentrated flames are present, increasing very much the wall temperatures and compromising the heat flux on the aluminum surface.*

**Keywords.** *combustion, industrial furnaces, oxidant, liquid fuel*

### 1. Introduction

There are several industrial combustion applications which may benefit from the use of oxygen-enriched air or pure oxygen as the oxidizer during the combustion process. The effects are many. Oxygen enrichment increases the flame temperature, promotes soot formation and oxidation, and can decrease pollutant emissions compared with hydrocarbon-air systems.

The formation of nitrogen oxides (NOx) in air-feed combustion systems represents a significant source for this pollutant within the industrial sector. With the increase in the world-wide utilization of fossil fuels, the control of NOx emissions has become an issue of global concern. Additionally, with increasing oil prices, the use of lower quality fuels will worsen the problem. Advances in computational modeling tools and the increased performance of computers have made comprehensive modeling of NOx formation and destruction a valuable tool to provide insights and understanding of the NOx reaction processes in combustion systems. This technology has the potential to enhance the application of various combustion techniques used to reduce NOx emissions from practical combustion systems (Hill and Smoot, 2000).

Hill and Smoot (2000) presented a review on the modeling of NOx reactions in combustion systems, with an emphasis on coal-fired systems, including NOx control technologies, NOx reaction processes, and techniques to calculate chemical kinetics in turbulent flames. Models of NOx formation in combustion systems were reviewed. Comparisons of measured and predicted values of NOx concentrations were presented for several full-scale and laboratory-scale systems.

Numerical modeling has become an important tool in the design and optimization of industrial equipments and also in the prediction of the emission of pollutants such as CO (carbon monoxide), SOx (sulfur oxides), and NOx. Recently, several numerical studies were developed to analyze the combustion process with different fuels, using pure air, oxygen or a mixture of both as the oxidizer. These studies provided detailed descriptions for the temperature, velocity and species concentration fields within various geometries of industrial combustion equipment.

The work of Yang and Blasiak (2005) described the CFD modeling of the combustion of liquified propane gas (LPG) with highly preheated air in a regenerative burner system. Results for various parameters, including the furnace-wall temperature and the concentration of gaseous species, were obtained for a semi-industrial furnace. The results indicated that the flame spread could be well predicted by using the numerical model. It was also found that the regenerative burner could provide high energy savings and lower emissions of NO.

In Frassoldati et al. (2005), the attention was focused on a new procedure, based on CFD, for the determination of NO<sub>x</sub> emissions from combustion processes, which allowed the use of very detailed reaction schemes. The procedure was validated for the case of high swirled confined natural gas diffusion flames, with available experimental data of German TECFLAM (2006) for a 150 kW thermal load swirl burner. The predictions of NO<sub>x</sub> were obtained by post-processing the flow and temperature fields, as predicted by the CFD model, and lumping together computational cells similar in terms of NO<sub>x</sub> formation. The resulting macro-cells were assumed to be a network of ideal reactors, which were simulated adopting detailed kinetic mechanisms.

Wang et al. (2005) developed a comprehensive CFD model by integrating procedures for detailed chemistry, soot formation and oxidation, and thermal radiation, into a three-dimensional unstructured CFD code. The detailed chemistry kinetics was modeled by using 122 chemical species and 677 elementary reactions. The model was applied to an oxygen-enriched, turbulent, non-premixed propane flame. The results showed that soot radiation decreased flame temperature and NO<sub>x</sub> emissions, substantially, especially in the flame-tip region. They also investigated the importance of modeling the radiation effects accurately for predicting the soot and NO<sub>x</sub> formation adequately.

Nieckele et al. (2004) described a numerical simulation of the 100% oxy-firing combustion process inside an industrial aluminum re-melting reverberatory furnace. Three different configurations were analyzed including the comparison between the staged versus non-staged combustion processes. The numerical procedure was based on the finite volume formulation and the kappa-epsilon model of turbulence. The combustion was modeled based on the finite rate models of Arrhenius and Magnussen, and the Discrete Transfer Radiation model was employed for predicting the radiation heat transfer. The numerical predictions allowed for the determination of the flame patterns, species concentration distribution, temperature and velocity fields.

The flow field inside aluminum furnaces with different types of burners and operating conditions was analyzed in (Nieckele et al, 2004, 2005). Also, numerical and experimental investigation in an industrial aluminum melting furnace with oxygen enriched combustion was carried out in Brewster et al. (2001). The temperature distribution on the refractory walls was verified. The model over estimated the turbulent mixture and, on the other hand, the CO (carbon monoxide) concentrations were under estimated near the burner region, probably because the kinetic effects were neglected. Numerical simulations inside an industrial burner in an aluminum melting furnace were also carried out in Mukhopadhyay et al. 2001. It was shown that the flame height grows with the fuel velocity for a given air-fuel ratio, and with the reduction of the air velocity, for a given fuel velocity. In Nieckele et al. (2002) a turbulent natural gas flame in a cylindrical furnace was simulated, using finite rate models and modeling chemical reactions in two different ways: in a simple manner, where the fuel combustion was predicted in one single global reaction; and with a two-step process, where the carbon monoxide could be predicted in an intermediate reaction. The results for both models showed a good agreement with the experimental data found in the literature, although it was observed that the physical phenomena was better described by the two step reaction.

With respect to the numerical modeling of the spray flow of liquid fuels, a single model that predicted the source terms for the mean mixture fraction and its variance is proposed in Reveillon and Vervisch, (2000). The source term for the mean mixture fraction due to the droplet vaporization is normally provided by an Eulerian-Lagrangian formulation which, according to the authors, is not satisfactory when applied to the calculation of the source terms that are associated to the fluctuations of the mixture fraction. In Demoulin and Borghi (2002) turbulent combustion of a diesel spray was investigated, utilizing probability density functions for each fluctuating variable in the liquid and gas phases, showed that a proper description of the temperature fluctuations caused by the presence of the droplets is crucial for a better estimation of the reaction rates.

In the present work, numerical simulations were carried out using the commercial package FLUENT, version 6.2 (2006) to determine the flow field, species and temperature distribution inside an aluminum industrial furnace, employing air and pure oxygen for the combustion of liquid fuel. The advantages and disadvantages of each type of oxidant are addressed.

## **2. Problem Set-up**

The furnace geometry was represented as a rectangular prism of 4.0 m length, 1.5 m wide and 2.0 m height, presented in Fig. 1a. Fig. 1b illustrates details of the frontal plane, and different view of the inlet configuration. Due to symmetry, only half furnace was solved.

The lower limit of the furnace was considered to be the liquid aluminum surface with a small aluminum oxide layer of 0.5 mm above it. The aluminum oxide layer was considered to describe the oxidization of the aluminum surface by the water that results from the combustion, which can act as an isolator and can compromise the quality of the product.

The vertical symmetry plane passes through the center of the chimney between the two pairs of oxidant and fuel injectors. The inlets of oxidant and fuel as well as the outlet of the combustion products are located at the same wall (Fig. 1b). The center of the burner is located 0.65m above the aluminum oxide layer and 0.80m away from the symmetry plane. Fuel is injected in the center and the oxidant surrounds it. The oxidant injector is located 0.20m above the burner. Both burner and oxidant lance are formed by a central opening and a set of small orifices surrounding the central opening, which are here represented by an annular opening. Two cases were analyzed, both with liquid fuel C<sub>19</sub>H<sub>30</sub>, one with oxygen as oxidant and the other with air as oxidant. The inlet geometry of oxidant depends on the

oxidant. The liquid fuel burner has a central opening area equal to  $2.89 \times 10^{-4} \text{ m}^2$  for both cases. For the case with oxygen as oxidant, the oxidant and burner lances have the same geometry, and the annular opening area is equal to  $1.38 \times 10^{-3} \text{ m}^2$ . For the case with air as oxidant, a larger mass flow rate is necessary. Therefore, the inlet areas are larger to maintain the same order of magnitude of the velocity at the entrance. In this case, in the oxidant lance the central opening area is equal to  $2.13 \times 10^{-3} \text{ m}^2$ . The annular opening areas for both lances are equal to  $3.53 \times 10^{-3} \text{ m}^2$ . The jets are directed away from the refractory walls, angles of  $15^\circ$  in the vertical plane and  $10^\circ$  in the horizontal plane were set. The height of the center of the rectangular chimney coincides with that for center of the burner, its half width measures 0.50m and its height measures 0.60m.

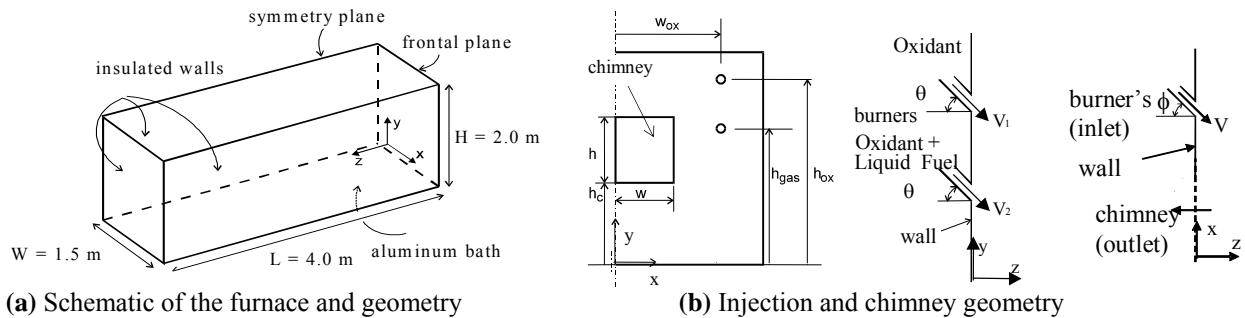


Figure 1. Problem configuration

Considering a typical aluminum load of 16 tons (which corresponds to a volume of  $6 \text{ m}^3$ ), assuming an approximate process time of 1 hour, and knowing that the aluminum latent heat is  $397.4 \text{ kJ/kg}$ , a heat transfer rate of  $880 \text{ kW}$  must be extracted from the aluminum surface, in order to represent the energy necessary to melt the entire load of aluminum.

The inlet temperatures of oxygen and air were set as  $298 \text{ K}$ , while all refractory walls were considered as insulated. The inferior surface of the furnace represented the aluminum bath; and the aluminum melting temperature of  $1013 \text{ K}$  was imposed.

### 3. Mathematical Modeling

The turbulent flow and heat transfer inside the furnace were solved numerically using the finite volume technique and the commercial code FLUENT, version 6.2. The average forms of the conservation equations of mass and momentum are given by:

$$\mathbf{div}(\rho \mathbf{v}) = 0 \quad ; \quad \mathbf{div}(\rho \mathbf{v} \mathbf{v}) = \mathbf{div}[\mu_{ef} (\mathbf{grad} \mathbf{v} + (\mathbf{grad} \mathbf{v})^T)] - \mathbf{grad} P \quad (1)$$

where  $\rho$  is the density,  $\mathbf{v}$  is the velocity vector, and  $\mu_{ef} = \mu + \mu_t$  is the effective viscosity, obtained by the Boussinesq's hypothesis. The modified total pressure  $P = p - (2/3) [\mu_{ef} \mathbf{div} \mathbf{v} + \rho \kappa]$ , takes into account the contributions due to the turbulent fluctuations. The turbulence  $\kappa$ - $\epsilon$  model was used for calculating the turbulent viscosity, which is defined as  $\mu_t = c_\mu \rho \kappa^2 / \epsilon$ , where  $\kappa$  is the turbulent kinetic energy and  $\epsilon$  the dissipation for the turbulence kinetic energy. The conservation equations of  $\kappa$  and  $\epsilon$  are given by:

$$\mathbf{div}(\rho \mathbf{v} \kappa) = \mathbf{div}[(\mu + \mu_t / Pr_\kappa) \mathbf{grad} \kappa] + (G - \rho \epsilon) \quad ; \quad \mathbf{div}(\rho \mathbf{v} \epsilon) = \mathbf{div} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{Pr_\epsilon} \right) \mathbf{grad} \epsilon \right] + (c_1 G - c_2 \rho \epsilon) \frac{\epsilon}{\kappa} \quad (2)$$

In the above equations,  $Pr_\kappa$  and  $Pr_\epsilon$  are the turbulent Prandtl numbers for  $\kappa$  and  $\epsilon$ , and were set equal to 0.7. The constants were set as  $c_1=1.4$ ,  $c_2=1.9$ , and  $c_\mu=0.09$ . The term  $G = \mu_t [\mathbf{grad} \mathbf{v} + (\mathbf{grad} \mathbf{v})^T] \cdot \mathbf{grad} \mathbf{v}$  stands for the generation of turbulence kinetic energy. The above equations were solved simultaneously with the conservation equations of mass and momentum, providing the solution for the turbulent flow problem.

The density of the gaseous mixture was calculated using the ideal gas law,  $\rho = p_{op} / [RT \sum_i (m_i/M_i)]$ , where  $p_{op}$  is the average operation pressure inside the furnace, that was to be equal to one atmosphere.

For all dependent variables wall functions were employed for setting up the conditions close to the solid boundaries, following the procedure described in Launder and Spalding (1974) and Patankar and Spalding, 1967.

The temperature field within the furnace was obtained solving the energy equation, where the total enthalpy  $h$  is defined by the sum of the enthalpies for each species  $h_i$  weighted by its mass fraction  $m_i$ ,

$$\mathbf{div}(\rho \mathbf{v} h) = \mathbf{div} \left[ \left( \frac{\mu}{Pr} + \frac{\mu_t}{Pr_t} \right) \mathbf{grad} h \right] + S_h \quad ; \quad h = \sum_i m_i h_i \quad ; \quad h_i = \int_{T_{ref,j}}^T c_{p,j} dT + h_j^0(T_{ref,j}) \quad (3)$$

and  $h_i^\circ$  is the formation enthalpy at the reference temperature  $T_{refj}$  and  $cp_j$  is the specific heat at constant pressure of specie  $j$ . The term  $S_h = S_{reac} + S_{rad}$ , represents the enthalpy source due to the chemical reactions (combustion) and the radiation heat transfer. The turbulent Prandtl number,  $Pr_t$ , was set at 0.5.

### 3.1. Auxiliary Models

The source term in the energy equation due to radiation was calculated using the Discrete Transfer Radiation Model (DTRM). In this model, the change in the radiant intensity  $I$ , integrated over all wavelengths, along a path  $S$  is calculated according to  $dI/dS = -\alpha I + \alpha \sigma T^4/\pi$ , if scattering is neglected. The terms on the left side represent the loss by absorption and the gain by emission due to the participating medium, respectively.

The model integrates the above expression along several directions starting from each control volume on the domain surfaces. The source term  $S_{rad}$  is calculated locally by summing the changes in intensity for all the rays crossing the control volume. The Weighted Sum of Gray Gases Model (WSGGM) was used for the calculation of the absorption coefficient (Smith et al, 1982).

The generalized finite rate model, combined with the Arrhenius-Magnussen model (Fluent, 2006; Kuo, 1986), was selected to obtain the source term due to chemical reactions in the energy equation. The chemical species distributions are obtained through the solution of  $n-1$  transport conservation equations, where  $n$  represents the number of species. The general form of the conservation equation for each chemical species is given by

$$\mathbf{div}(\rho \mathbf{v} m_i) = \mathbf{div}[(\mu/Sc + \mu_t/Sc_t)\mathbf{grad} m_i] + R_i + S_i \quad (4)$$

In the above equation, the terms  $R_i$  and  $S_i$  represent the sources for each species. The former is associated with the transformations due to chemical reactions, and the later may represent addition from the dispersed phase. The term  $R_i$ , may be expressed by the sum of the reaction rates (generation or consumption) for species  $i$  in every reaction  $k$ , as denoted by  $R_{i,k}$ , according to  $R_i = \sum_k R_{i,k}$ . The turbulent effect is taken in consideration by the turbulent diffusion coefficient,  $\mu_t/Sc_t$ , where the turbulent Schmidt number  $Sc_t$  was set equal to 0.5.

With the combined Arrhenius-Magnussen model, the combustion reactions rates are determined by the smallest value between the Arrhenius and the Magnussen models, which are respectively given by

$$R_{i,k} = \eta_{i,k} M_i T^{\beta_k} A_k \exp(-E_k/RT) \prod_j C_j^{\gamma_{j,k}} \quad ; \quad R_{i,k} = \eta_{i,k} M_i K_1 \rho \frac{\epsilon}{k} \min \left[ \frac{m_{j^*}}{\eta_{j^*,k} M_{j^*}} ; K_2 \frac{\sum_p m_p}{\sum_p \eta_{p,k} M_p} \right] \quad (5)$$

In these expressions  $j^*$  represents the reactant which gives the smallest value for  $R_{i,k}$ , and  $K_1$  and  $K_2$  are empirical constants, set as 4.0 and 0.5, respectively.

Two cases were considered, in the first one, pure oxygen was employed as oxidant while for the second case, air was used as oxidant. For both cases, liquid fuel,  $C_{19}H_{30}$ , was employed as fuel. The stoichiometric coefficients for the reaction must be specified in accordance to



The Magnussen reaction rate expression does not require any additional information. The parameters for Arrhenius and Arrhenius-Magnussen models are:  $A_k = 3.60 \times 10^9$  ( $m^3/s$ )/kmol;  $E_k = 126$  MJ/kmol;  $\gamma_{O_2} = 1.5$ ,  $\gamma_{CO_2} = \gamma_{H_2O} = \beta_k = 0$ .

The prediction of the trajectory of a discrete phase droplet is performed by integrating the force balance on the droplet, which is written in a Lagrangian reference frame as follows:

$$\frac{d u_p}{d t} = F_d (u - u_p) \quad ; \quad F_d = \frac{18 \mu}{(\rho_p d_p^2)} C_D \frac{Re_d}{24} \quad ; \quad Re_d = \rho d_p |u_p - u| / \mu \quad (7)$$

where  $F_d$  is the drag force per unit particle mass and  $Re_d$  is the relative Reynolds number,  $u$  and  $u_p$  are the fluid phase and particle velocities, and  $d_p$  is the particle diameter.  $C_D$  is the drag coefficient, which depends on  $Re_d$

As the trajectory of a particle is computed, the droplet stream variation of heat, momentum and mass are incorporated in the subsequent continuous phase calculations. By doing so, the interphase exchange is alternately computed, considering the droplets trajectories and the conservation equation for the gaseous mixture, until the solutions in both phases stop to change.

There are basically two mechanisms that control the droplets evaporation, depending on its temperature level,  $T_p$ . If the temperature is higher than  $T_{bp}$  (boiling point) the boiling process is convective, and no longer controlled by the diffusion of molecules on the droplets surface to the continuous phase and the fuel vapor pressure. Therefore, for  $T_p < T_{bp}$ , the vapor molar flux is  $N_i = k_c (C_{i,s} - C_{i,\infty})$ , where  $N_i$  is,  $k_c$  is the mass transfer coefficient,  $C_{i,s}$  and  $C_{i,\infty}$  are the concentrations on the droplets surface and in the gaseous phase, respectively. For  $T_p \geq T_{bp}$ :

$$\frac{dd_p}{dt} = \frac{4k_\infty}{\rho_p c_{p,\infty} d_p} (1 + 0.23\sqrt{\mathbf{Re}_d}) \ln \left[ 1 + \frac{c_{p,\infty} (T_\infty - T_p)}{h_{f,g}} \right] \quad (8)$$

where  $c_{p,\infty}$ ,  $k_\infty$  and  $T_\infty$  are, respectively, the specific heat at constant pressure, thermal conductivity and gas temperature, and  $h_{f,g}$  is the latent heat of volatiles involved.

The coupling between the discrete and continuous phases appears as source terms in the momentum, energy and mass equations for the continuous phase. The drag force acting on the droplet in axial direction depends on the mass flow rate of the droplet,  $\dot{m}_p$ . It is integrated in time with a time step  $\Delta t$ .

$$F = \sum F_d (u_p - u) \dot{m}_p \Delta t \quad (9)$$

Neglecting the presence of superficial combustion, the energy exchange between phases is calculated by:

$$Q = \left[ \frac{\bar{m}_p}{m_{p,o}} c_p \Delta T_p + \frac{\Delta m_p}{m_{p,o}} \left( -h_{f,g} + h_{pyrol} + \int_{T_{ref}}^{T_p} c_{p,i} dt \right) \right] \dot{m}_{p,o} \quad (10)$$

where  $\bar{m}_p$  is the average mass of the droplet in the control volume,  $m_{p,o}$  and  $c_p$  are the initial mass and specific heat of the droplet,  $\Delta T_p$  and  $\Delta m_p$  are temperature and mass variation as the droplet passes through the control volume,  $h_{f,g}$  is the latent heat of the volatiles involved,  $h_{pyrol}$  and  $c_{o,i}$  are the heat of pyrolysis and specific heat of these volatiles,  $T_p$  is the droplet temperature on the control volume exit,  $T_{ref}$  is the enthalpy reference temperature.

The mass transfer to the continuous phase is calculated by examining the mass change of the droplet as it passes through each control volume:  $M = (\Delta m_p / m_{p,o}) \dot{m}_{p,o}$ .

The NOx concentration is predicted using FLUENT NOx postprocessor (Fluent, 2006). Since NOx reaction rates are slow, they are not treated using an equilibrium assumption, as it was performed with the others intermediate and product species. The NOx species can be excluded from the equilibrium calculation because they are present in low concentrations and have little impact on density, temperature and other species concentration.

Thermal NOx formation is calculated by using the extended Zeldovich mechanism, developed by Zeldovich in 1946 and described in Tomeczek and Gradon (1997). The reaction rates were obtained from the evaluation of Hanson and Salimian (1984). The presence of a second mechanism for creating NO during the combustion process was first identified by Fenimore (1971) and was denominated by "prompt NO". The prompt NO mechanism is more important in rich flames. In the present NOx prompt model, it was used a global kinetic parameter and a procedure developed by De Soete (1975).

The NOx emissions are predicted by solving a transport equation for nitric oxide (NO) concentration, using a given flow, temperature and species field. In this work only the thermal and prompt mechanisms for NOx formation were considered. Therefore, only the NO species transport equation has to be solved:

$$\mathbf{div}(\rho \mathbf{v} m_{NO}) = \mathbf{div}(\rho \mathbf{D} \mathbf{grad} m_{NO}) + S_{NO} \quad ; \quad S_{NO} = M_{w,NO} \frac{d[NO]}{dt} \quad (11)$$

where  $S_{NO}$  is the source term,  $M_{w,NO}$  is the molecular weight of NO (kg/gmol), and  $d[NO]/dt$  is the NO formation rate for each case (Fluent, 2006).

For thermal NOx mechanism, neglecting the OH concentration, the principal reactions are:



Assuming a quasi-steady state, the NO formation rate is given by:

$$\frac{d[NO]}{dt} = 2 k_{f,1} [O][N_2] \frac{\left( 1 - \frac{k_{r,1} k_{r,2} [NO]^2}{k_{f,1} [N_2] k_{f,2} [O_2]} \right)}{\left( 1 + \frac{k_{r,1} [NO]}{k_{f,2} [O_2]} \right)} \quad (13)$$

where [O], [NO], [O2], and [N2] are the concentration of [i] atoms, and  $k_{ij}$  are empirical constants (Hanson and Salimian, 1984), given by:

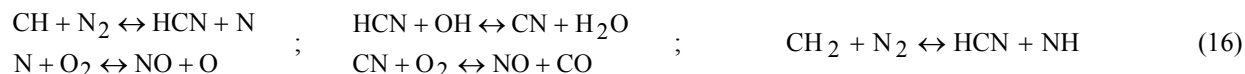


$$k_{f,1} = 1.8 \times 10^8 e^{-38370/T} ; \quad k_{f,2} = 1.8 \times 10^4 e^{-4680/T} ; \quad k_{r,1} = 3.8 \times 10^7 e^{-425/T} ; \quad k_{r,2} = 3.81 \times 10^3 e^{-20820/T} \quad (14)$$

The equilibrium approach was employed as suggested by Zeldovich (Tomeczek and Gradón, 1997). Therefore, the thermal NO<sub>x</sub> formation mechanism can be decoupled from the main combustion process, and the NO<sub>x</sub> formation rate is calculated by assuming equilibrium of the combustion reaction. The concentration of the oxygen-atom is given by:

$$[O] = 3.97 \times 10^5 T^{-1/2} [O_2]^{1/2} e^{-31090/T} \quad \text{gmol/m}^3 \quad (15)$$

For the prompt NO<sub>x</sub> mechanism, the reactions are:



For hydrocarbon fuels, the NO formation rate may be calculated by:

$$\frac{d[\text{NO}]}{dt} = f k'_{pr} [\text{O}_2]^a [\text{N}_2] [\text{FUEL}] e^{-E'_a/RT} \quad (17)$$

where  $f = 4.75 + 0.0819 n - 23.2 \varphi + 32 \varphi^2 - 12.2 \varphi^3$ ,  $k'_{pr} = 6.4 \times 10^6 (RT/p)^{a+1}$  and  $E'_a = 303474.125$  J/gmol.  $n$  is the number of carbon atoms per molecule for the hydrocarbon fuel,  $\varphi$  is the equivalence ratio,  $a$  is the oxygen reaction order, which depends on the flame conditions. For  $N_{O_2} \geq 4.1 \times 10^{-3}$ ,  $a$  is equal to one and above 0.03 it is zero, else

$$a = \begin{cases} -3.95 - 0.9 \ln N_{O_2} & ; \quad 4.1 \times 10^{-3} \leq N_{O_2} \leq 1.11 \times 10^{-2} \\ -0.35 - 0.1 \ln N_{O_2} & ; \quad 1.11 \times 10^{-2} \leq N_{O_2} \leq 0.03 \end{cases} \quad (18)$$

Since the flow under analysis is turbulent, temperature and composition fluctuations are taken into account by considering probability density functions. In FLUENT NO<sub>x</sub> model, a single- or joint-variable PDF in terms of a combination of a normalized temperature and species mass fraction, is used to predict the NO<sub>x</sub> emission. The mean turbulent rate of production of NO,  $\bar{S}_{NO}$ , is given by:

$$\bar{S}_{NO} = \int \dots \int S_{NO}(V_1, V_2, \dots) P(V_1, V_2, \dots) dV_1 dV_2 \dots \quad (19)$$

where  $V_1, V_2, \dots$  are temperature and species concentrations,  $P$  is the probability density function, and  $S_{NO}$  is the instantaneous rate of production, given by eq. (11). This equation must be integrated at every node and at every iteration.

#### 4. Results

The flow field inside the furnace was numerically obtained for the two types of oxidant. The solution was considered converged when the sum of the normalised residuals of all equations was less than  $10^{-4}$  and the normalised enthalpy residual was less than  $10^{-6}$ .

The mesh distribution was generated with the FLUENT auxiliary tool GAMBIT (Fluent, 2005). A grid test was performed, by doubling and by reducing in 50% the number of points in each direction. The overall agreement was very good, and the mesh was considered satisfactory for a maximum temperature difference smaller than 3%. After the grid test, an approximately uniform mesh of 134,400 control volumes, with  $60 \times 40 \times 56$  elements in the  $x, y$ , and  $z$  directions, respectively, was selected. The smallest grid size was equal to 2 mm.

The absolute viscosity of the liquid fuel was  $\mu = 1.72 \times 10^{-5}$  Pa s, while the thermal conductivity was  $k = 0.0454$  W/(m K) for  $C_{19}H_{30}$ . The diffusion coefficient of all species in all mixtures was equal to the  $N_2$  diffusion coefficient,  $2.88 \times 10^{-5}$  m<sup>2</sup>/s. The mixtures specific heats were obtained by a weighted mass fraction average. Table 1 presents the composition, the molecular weight  $M$ , formation enthalpy  $h^0$  and the specific heat at constant pressure  $c_p$  of fuel and oxidants (Kuo, 1986).

To model the liquid oil spray concerning the liquid fuel problem, 15 particle streams were defined into the fuel inlet region, defining a cone with angle of  $45^\circ$ . The droplets flow is defined from initial conditions related to the injection points of the discrete phase in the gaseous mixture. These conditions will be used as the starting point for the integration of the droplets equation of motion and calculation of their trajectories. Since the surface combustion of the particle is not being modeled, the droplets must vaporize to react with the gaseous phase. Therefore, the inlet temperature of the

droplets influences the point where the combustion reaction will start. The vaporization temperature was defined as 400K, lower than the temperature at which the droplets enter the domain (495 K), indicating that vaporization starts immediately after they enter the furnace, that is, no inert heating occurs. The vaporization temperature ( $T_{vap}$ ) is an arbitrary modeling constant used to define the onset of the droplet vaporization process. The boiling temperature ( $T_{bp}$ ) corresponds to the saturation temperature at atmospheric pressure for the fuel, which is the operation pressure of the furnace. In the case of  $C_{19}H_{30}$ , this temperature corresponds to  $T_{bp}=598$  K. Unless the particle temperature has reached the boiling point, the vaporization is controlled by the fuel vapor pressure (defined as 1329 Pa) and by the diffusion coefficient for the fuel in the surrounding gas ( $3.79 \times 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$ ). For simplicity, constant values were assumed for the vapor pressure and the fuel diffusion coefficients during the vaporization process of the droplet. When the droplet temperature reaches the boiling point, a boiling rate equation is applied (Fluent, 2006). The latent heat of the fuel is 124 k J/kg at the atmospheric pressure. The density, specific heat capacity and thermal conductivity of the liquid fuel were defined as 960 kg/m<sup>3</sup>,  $cp=1880 \text{ J}/(\text{kg K})$  and  $k= 0.12 \text{ W}/(\text{mK})$ , respectively, and the fuel was considered as 100% volatile.

Table 1: Species properties

	Species	% $m_i$	$M_i$	$h_i^o$ kJ/kg	$cp_i$ J/(kg K)
Liquid Fuel	$C_{19}H_{30}$	100	258	-640,000	1000
Oxygen	$O_2$	100	32	0.0	1140
Air	$O_2$	23	32	0.0	1140
	$N_2$	77	28	0.0	1242
water	$H_2O$	0	18	-241,837	2615
carbon dioxide	$CO_2$	0	44	-393,532	1324

Initially pure oxygen was selected as oxidant. To accomplish the fusion of 16 tons of aluminum in one hour, a nominal thermal power equal to 1.2 MW per burner was specified, in order to represent both the energy necessary to melt the entire load of aluminum, but also the possible heat losses inherent in the process. Since the liquid fuel superior heating power  $h_{ci}$  is 39.8 MJ/kg, the fuel mass flow rate was set as 108.5 kg/h. The diameter of the fuel droplets was defined as 0.1  $\mu\text{m}$ , and their velocity magnitude was set as 10.5 m/s. The oxidant-fuel ratio was stoichiometrically defined, leading to an  $O_2$  mass flow rate equal to 358 kg/h.

The  $O_2$  mass fraction in the air is equal to 23%, therefore, for the second case, which employed air, the mass flow rate of air was defined as 1608 kg/h. However, for this case the amount of energy available for the aluminum fusion was significantly smaller than for the  $O_2$  case, since it provided a heat transfer over the aluminum surface of 603 kW, and only 11 ton of melted aluminum could be obtained for the one hour period. To melt 16 tons, the duration of the process should be of least 1 hr and 28 minutes. This is probably due to the fact that an additional amount of energy is necessary to heat the nitrogen present in air, and also due to the large amount of nitrogen, a poor mixture of oxidant and fuel is obtained leading to a less efficient combustion.

To be able to compare the same process, a third case was analyzed, so that the same amount of melted aluminum in one hour could be obtained. The amount of fuel was increased so that a heat flux equal to 880 kW over the aluminum surface was obtained. The fuel mass flow rate was set as 180 kg/h (which corresponds to a 2.0 MW  $C_{19}H_{30}$  flame), and the air mass flow rate was set as 2743 kg/h.

Since the oxidant was injected through three openings, the total amount of oxidant mass flow rate was equally divided into each inlet.

Due to space limitations and since the qualitative behavior of both air cases are similar, only the comparison between this last case and the oxygen case will be presented.

#### 4.1. Temperature and heat flux distribution

Figures 2 to 7 present a comparison of the temperature and heat flux distribution inside the furnace, with the two types of oxidant. The purpose of the comparison is to identify the influence of the type of oxidant in the flame shape, temperature distribution and heat flux distribution over the load.

As already mentioned, the cases selected to be presented produced the same total heat transfer rate of 880 kW over the aluminum surface. Figure 2 shows an isosurface of 1600K, while Fig. 3 illustrates the temperature distribution through a y-z plane passing by the burners ( $x=0.8 \text{ m}$ ). The temperature distributions at the refractory wall are shown in Fig. 4. To better analyze the influence of the oxidants, Figs. 5 and 6 show temperature profiles along selected lines inside the furnace.

The flame shape for both oxidants can be appreciated by examining the 1600K isosurfaces (Fig. 2). Both flames follow the direction of the inlet jets, away from the refractory walls and downward into the load's surface. Figures 2a, 3a and 4a correspond to Case 1 ( $O_2$ ) where a shorter and wider flame region can be seen, as well as higher temperatures. The combustion starts near the entrance, where high values are obtained, and then the temperature level rapidly drops below 1600K. The maximum temperature inside the furnace is 3403 K. The air results are presented in Figs. 2b, 3b and

4b. Due to the presence of the nitrogen, a very large amount of cold oxidant is injected. As a result the liquid droplet evaporation is delayed; the oxygen-fuel mixture is less efficient, and as it can be seen in Fig. 2b, the flame is detached from the inlet. The 1600K iso-surface is longer and higher temperatures are found near the back wall. For this case the maximum temperature inside the furnace is 1842 K.

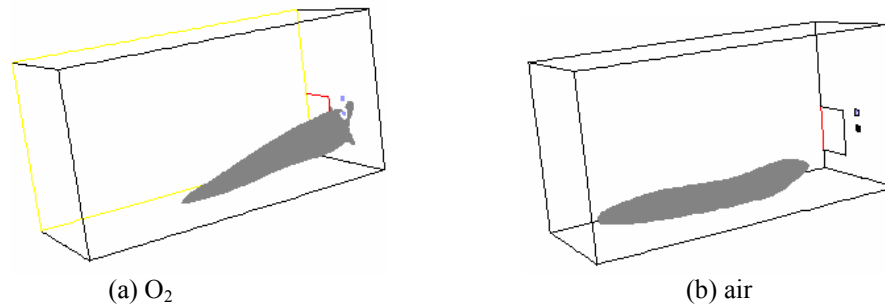


Figure 2. Isosurfaces of temperature,  $T=1600$  K.

The  $O_2$  flame is more intense and concentrated in the first half of the domain, leading to a less uniform temperature distribution on the lateral refractory walls (shown in Fig. 4) and could also compromise the uniformity of the heat flux on the aluminum surface (Fig. 7). At Figure 4, the influence of the flame at the refractory wall is clearly seen for the  $O_2$  case, by the warm spots at the side wall (1469K). These warm spots can damage the refractory wall, increasing the cost of the project. Although warm spots were observed for the  $O_2$  case, the average temperature at all the refractory walls are similar, around 1382K. Also, since the flame is shorter, the maximum wall temperature is observed at the frontal plane (1738K). Due to the longer flame, warm spots were also observed for the air case, (Fig 4b), but at the back wall and superior wall, reaching 1528 K and 1512 K, respectively. Although the flame temperature is smaller, the average wall temperature is equal to 1408 K, similar to the  $O_2$  case, but slightly higher due to the hot spots at the superior and back walls.

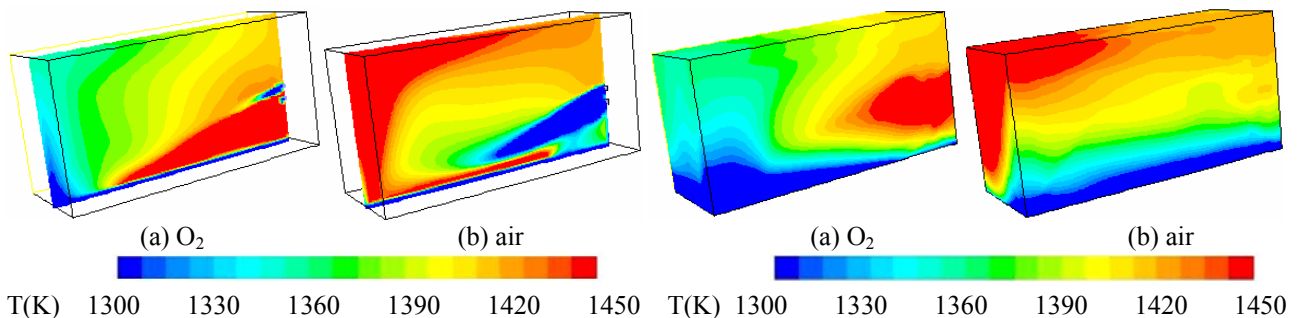


Figure 3 - Temperature distribution. Plane  $y-z$  ( $x=0.8$  m) Figure 4 - Temperature distribution on the refractory walls.

By examining the temperature distribution on a plane that passes through the injectors ( $x = 0.80$  m), it can be seen for the oxygen case (Fig 3a), the cold oxygen jet over the liquid fuel jet, close to the inlet region. Due to the combustion, a substantial temperature raise can be observed, under the cold jet. However, for the air case, due to high amount of nitrogen, the combustion is delayed, and the cold jet penetrates farther into the domain. The high temperatures due to the combustion can be seen close the aluminum surface, reaching the upper back part of the furnace. In spite of these differences, the temperature level inside the furnace is approximately the same for both oxidants (1410 K). However, it should be remembered that for the air case, a larger amount of liquid fuel was injected to reach the same level of heat flux at the load.

Figure 5 shows the temperature profile along the  $z$  coordinate for two lines inside the furnace. The first line (Fig. 5a) passes through the center of the burner ( $x = 0.80$ m and  $y = 0.65$ m), and the other one (Fig. 5b) passes through the center of the oxidant injector ( $x = 0.80$ m and  $y = 0.85$ m). It can be seen that, as already mentioned, the temperature levels inside the furnace is around 1410K for both oxidant. Figure 6 presents the temperature profile along the  $x$  direction, at the height of the burner, at two  $z$  positions near the entrance. There is a small depression on the temperature level at  $y=0.65$  m and  $z=0.90$  m (Fig. 6b), for both cases. This is due to the fact that the inlets fuel/oxygen are cold, and only after both species are brought to contact, the combustion process starts. Since there is only oxygen in the lower entrance, it reduces the temperature of the warmer mixture that arrives from the upper burner. Due to the high amount of nitrogen in the air stream, it is more difficult for the oxygen to mix with the  $C_{19}H_{30}$ , therefore, the reaction starts farther away from the entrance and lower temperatures can be seen at  $z = 0.25$  m. The peak of temperature for the  $O_2$  case indicates that the reaction had already started at that location.

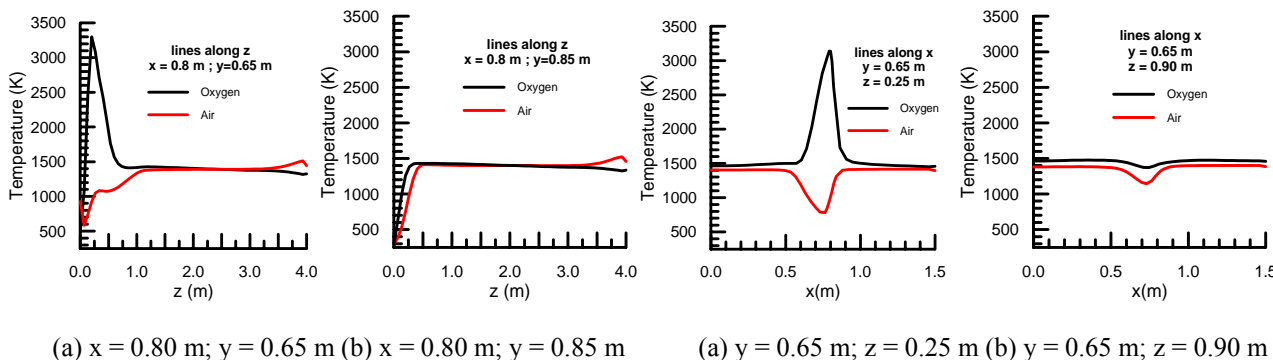


Figure 5. Temperature profiles along z inside the furnace. Figure 6. Temperature profiles along x inside the furnace.

The radiation heat flux on the aluminum surface is presented at Fig. 7. Due to the high temperature flame, the radiation heat flux is dominant. It can be seen large values of the radiation heat flux under the flame for both cases; however, since the O<sub>2</sub> flame was much more concentrated, a smaller high heat flux region can be seen near the entrance.

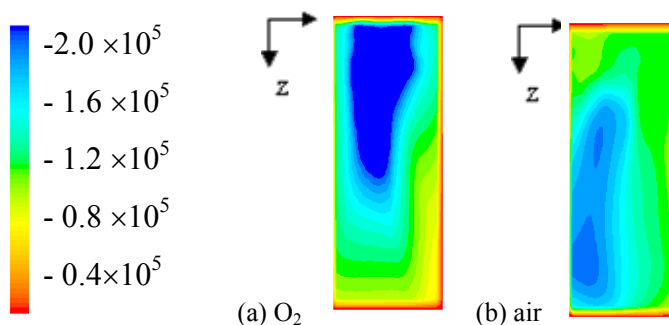


Figure 7. Distribution of radiation heat flux (W/m<sup>2</sup>)

To help understand the flame displacement from the entrance, Fig. 8 illustrates the droplets trajectories, colored by their diameter size. For the air case, the evaporation occurs very close to the entrance, inducing the beginning of the combustion. For the air case, it can be seen in Fig. 8b, that the full evaporation only occurs at 1/4 of the furnace length, where the combustion begins.

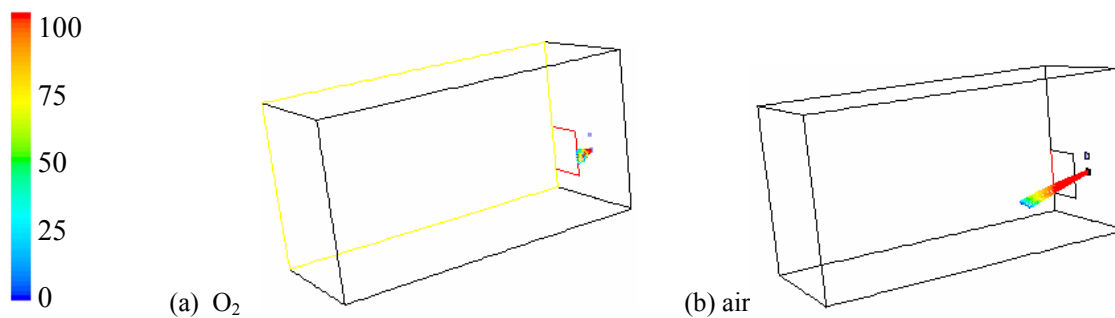


Figure 8. Particle tracking, colored by particle diameter (µm).

#### 4.2. Species distribution

The analysis of the distribution of C<sub>19</sub>H<sub>30</sub> gives a good idea of how the fuel is consumed inside the furnace. The fuel reacts with the oxygen to form the products. The reactants distributions also give a good idea of how the flame distributes itself along the furnace. The flame region is understood to be the region where the highest consumption of fuel occurs, followed by a great heat release and temperature raise. Comparison of the fuel and oxygen distributions for both cases are shown in Fig. 8, where iso-surfaces corresponding to 2% of mass fraction of C<sub>19</sub>H<sub>30</sub> and 5% mass fraction of O<sub>2</sub> are presented. The mass concentrations of both species are higher inside the respective isosurfaces. It can be seen the O<sub>2</sub> isosurface connected with the upper and lower burner. The C<sub>19</sub>H<sub>30</sub> is injected only at the lower burner; therefore the C<sub>19</sub>H<sub>30</sub> concentration is high, below the O<sub>2</sub> jet. It can be observed that the reaction occurs near the entrance, for the O<sub>2</sub> case leading to low values of the reacting species in this region. It can be clearly seen that due to

high amount of nitrogen present in the air, the  $O_2$  distribution for this case is less concentrated, leading to a smaller 5%  $O_2$  isosurface. Further, it can be noted a worse contact of the oxygen with the  $C_{19}H_{30}$  at the gas phase, due to the presence of the nitrogen. As already mentioned, the combustion starts closer to the entrance for the  $O_2$  case, leading to higher temperatures at that region, what can be seen by the red color. The blue indicates low temperatures, and it can be observed that while the droplets do not evaporate, there is no combustion and the inlet cold temperature is practically not altered.

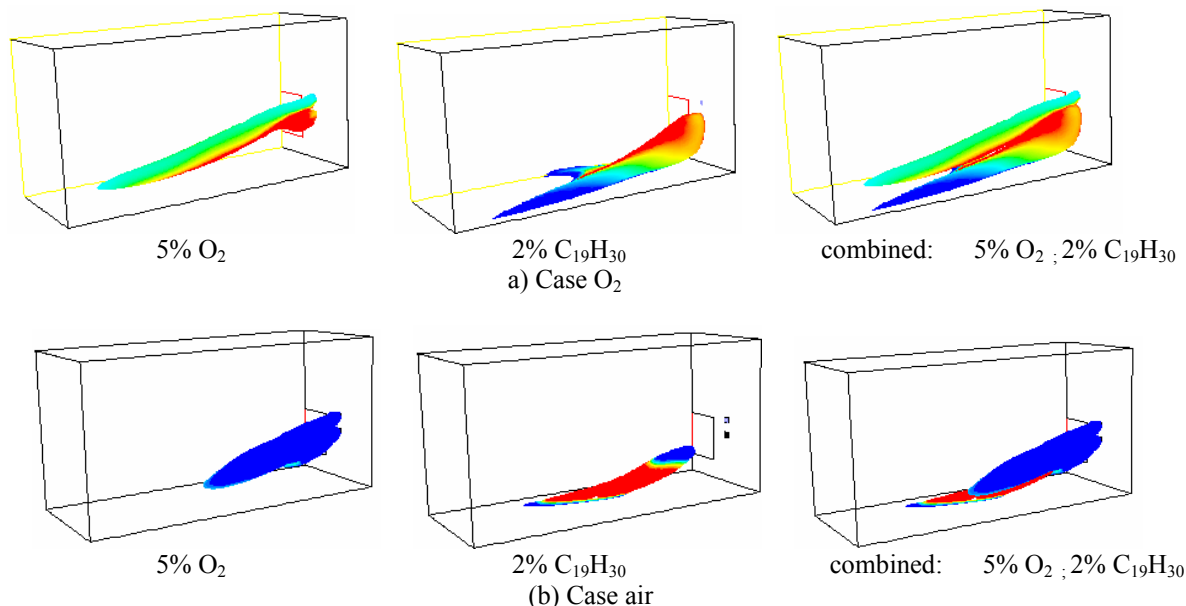


Figure 9. Isosurfaces of 2%  $C_{19}H_{30}$  and 5%  $O_2$ , colored by temperature.

The reaction of  $C_{19}H_{30}$  with oxygen forms water and carbon dioxide. Figure 10 shows the  $CO_2$  distribution at several  $x$ - $y$  planes along the  $z$  axial coordinate, for both oxidants. It can be seen lower values in the flame region, since the products are still being formed. It can also be seen a smaller amount of  $CO_2$  for the air case, which is a positive aspect related with the selection of this oxidant. For both cases, the concentration of  $CO_2$  at the chimney is approximately uniform. The air case has a mass fraction concentration equal to 25% of the  $O_2$  case concentration.

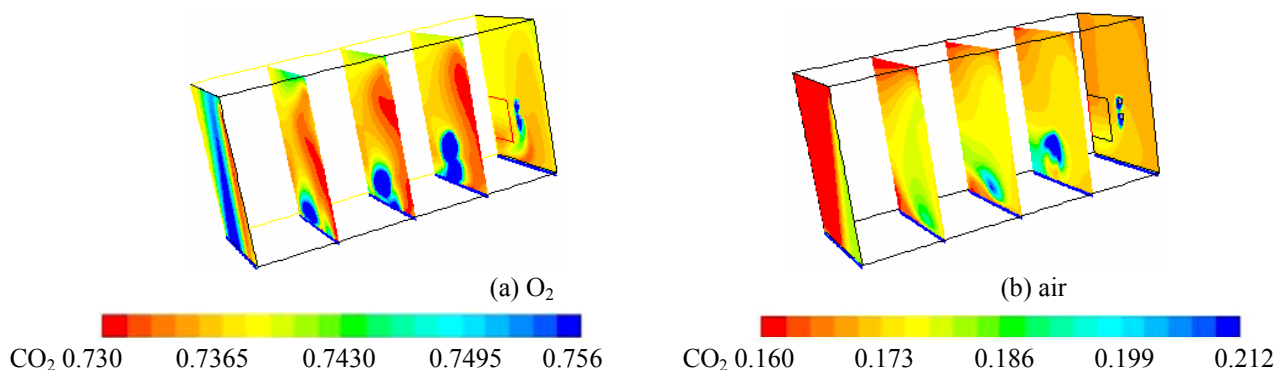


Figure 10. Carbon Dioxide mass fraction inside the furnace. Planes  $x$ - $y$ .  $z=0m, 1m, 2m, 3m$  and  $4m$ .

Although the amount of  $CO_2$  is smaller for the air case, a second type of pollutant is formed, which is the  $NO_x$ . Its mass fraction distribution is illustrated at Fig. 11 at the plane that passes through the injectors ( $x = 0.80 m$ ). It can be seen that, as expected, the  $NO_x$  distribution follows the same profile of all other species at the  $x=0.8 m$ . Further, its concentration is approximately uniform at the chimney, and its average value is equal to 4.25 ppm. The presence of  $NO_x$  is the worse inconvenient of employing air instead of pure oxygen.

Figure 12 shows the water distribution over the aluminum surface. High water concentration is not desirable because an aluminum oxide layer can be formed as water reacts with the surface of the load, which increases the thermal resistance and compromises the quality of the product. It is interesting to observe that the lowest water concentration is under the flame. Note however, that the water distribution is almost uniform in both cases. As with the  $CO_2$  distribution, the air case produced smaller amount the water, which is also a desirable aspect, to avoid the aluminum oxidation.

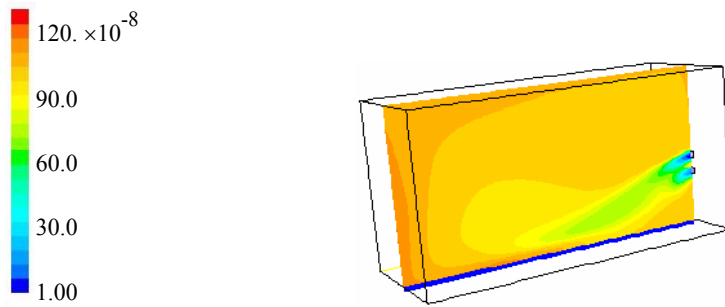


Figure 11. NOx mole mass fraction at plane y-z, x=0.8 m.

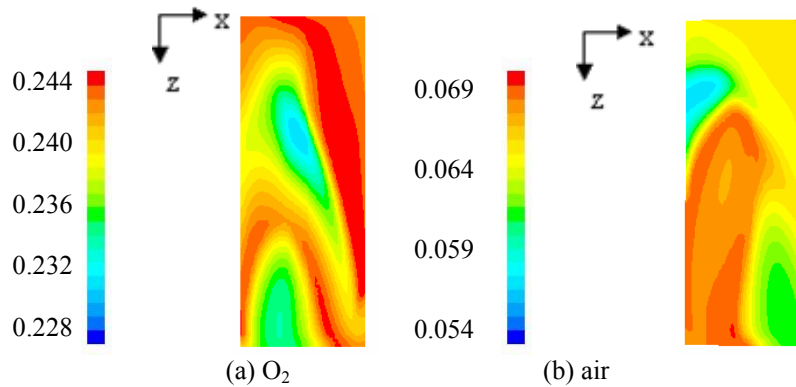


Figure 15. Water mass fraction distribution on the aluminum surface.

## 5. Conclusions

The numerical simulation of the process inside an aluminum melting furnace proved to be a helpful tool, which can contribute to improve several aspects of industrial interest, for example, reduction of material costs on maintenance of the refractory walls, increase of the efficiency of the fusion process, assurance of the quality of the product by the investigation of the deposition of water on the aluminum surface, better positioning of the burner and oxygen injectors, etc.

The numerical simulation also allows the easy investigation of the influence of several variables on the process; however, the mathematical models that will be used must be carefully chosen to maximize reliability on the results, not bringing unreal physical situations representing the phenomena.

The choice of the type of oxidant used as energy source for the aluminum fusion can be crucial to achieve better efficiency on the process. It was seen that the option for pure oxygen or air as oxidant can significantly alter the combustion aspects inside the furnace, such as the formation of too long or too intense flames, leading to hot spots on the refractory walls and a non uniform heat flux distribution on the aluminum load.

Although a direct numerical comparison with experimental results was not performed due to lack of experimental data, the turbulence and combustion models employed here were used to predict the flow characteristics in the industrial aluminum remelting reverb furnace (Nieckele et al., 2004) with reasonable results. Further, the flow field was obtained with the same model in a cylindrical furnace (Nieckele et al., 2001) and good agreement with experimental data was obtained.

The present analysis showed that the selection of air as oxidant has several advantages in relation to the use of pure oxygen. The temperature level inside the furnace is smaller, thus protecting the refractory walls, smaller products concentration were obtained at the chimney, and smaller water was found at the aluminum surface. However, in order to produce the same amount of melt aluminum, a larger amount of air had to be specified, reducing the advantage of employing a cheaper oxidant. Further, NOx was formed, in a non negligible amount.

## 6. Acknowledgement

The authors acknowledge the support awarded to this research by the Brazilian Research Council, CNPq.

## 7. References

- Brewster, B.S.; Webb, B.W.; McQuay, M.Q., D'Agostini, M. and Baukal, C.E., 2001, "Combustion measurements and modelling in an oxygen-enriched aluminium-recycling furnace," *Journal of the Institute of Energy*, **74**, pp. 11-17.
- Demoulin, F.X., Borghi, R., 2002, " Modeling of turbulent spray combustion with application to diesel like experiment", *Combustion and Flame* 129 (3), p. 281-293
- Fenimore, C.P., 1971, "Formation of nitric oxide in premixed hydrocarbon flames", in 13<sup>th</sup> Int. Symp. on Combustion, p. 373, The Combustion Institute.
- Frassoldati, A, Frigerio, S, Colombo, E, Inzoli, F, and Faravelli, T, 2005, "Determination of NO<sub>x</sub> emissions from strong swirling confined flames with an integrated CFD-based procedure", *Chemical Engineering Science*, v 60, pp 2851-2869.
- Fluent User's Guide, v. 6.2, 2006, Fluent Inc., New Hampshire.
- Hanson, R. K. and Salimian, S. 1984, "Survey of Rate Constants in H/N/O Systems". In W. C. Gardiner, editor, *Combustion Chemistry*, page 361.
- Hill, SC, and Smoot, LD, 2000, "Modeling of nitrogen oxides formation and destruction in combustion systems", *Progress in Energy and Combustion Science*, v 26, pp 417-558
- Kuo, K.K., 1986. *Principles of Combustion*, John Wiley & Sons, New York.
- Lauder, B.E. and Spalding, D.B., 1974. "The Numerical Computation of Turbulent Flows", *Computer Methods in App. Mech. and Engineering*, 3, p. 269-289.
- Mukhopadhyay, A.; Puri, I.K.; Zelepouga, S. and Rue, D.M., 2001, "Numerical simulation of methane-air nozzle burners for aluminum remelt furnaces," *Proceedings of 2001 ASME-IMECE*, USA, CD-ROM, HTD-24234.
- Nieckele, A.O., Naccache, M. F., Gomes, M. S. P., 2004, "Numerical Simulation of a Three Dimensional Aluminum Melting Furnace", *Journal of Energy Resources Technology*, ASME, vol. 126, pp.72-81.
- Nieckele, A.O.; Naccache, M. F.; Gomes, M. S. P. and Kobayashi, W., 1999, "The influence of oxygen injection configuration in the performance of an aluminum melting furnace," *Proceedings of 1999 ASME-IMECE*, USA, Heat Transfer Division, **2**, pp. 405-412..
- Nieckele, A.O.; Naccache, M.F.; Gomes, M. S. P.; Carneiro, J.N.E.; Serfaty, R., 2002, "Numerical simulation of natural gas combustion using a one step and a two step reaction", *Proceedings of 2002 ASME-IMECE*, November 11-16, New Orleans, LO, USA.
- Nieckele, A.O.; Naccache, M.F., Gomes, M.S.P.; Carneiro, J.N.E.; Serfaty, R., 2001, "Models evaluations of combustion processes in a cylindrical furnace", *Proceedings of 2001 ASME IMECE*, 2001, New York, NY, CD-ROM
- Patankar, S.V. and Spalding, D.B., 1967. *Heat and Mass transfer in Boundary Layers*, Morgan-Grampian, London.
- Reveillon, J.; Vervisch L.; 2000, "Spray vaporization in nonpremixed turbulent combustion modeling: a single droplet model", *Journals of Combustion and Flame*, April 2000, 121(1), pp. 75-90 (16).
- 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*, v. 104, p. 602-608.
- Soete, G.G., 1975, "Overall reaction rates of NO and N<sub>2</sub> formation from fuel nitrogen", 15<sup>th</sup> Symp. on Combustion, p. 1093-1102, The Combustion Institute.
- TECFLAM, 2006, German TECFLAM cooperation, page: [www.tu-darmstadt.de/fb/mb/ekt/tecflam](http://www.tu-darmstadt.de/fb/mb/ekt/tecflam).
- Tomeczek, J. and Gradón, B., 1997. "The Rate of Nitric Oxide Formation in Hydrocarbon Flames", Fourth International Conference on Technologies and Combustion for a Clean Environment, Lisbon, Portugal.
- Wang, L, Haworth, DC, Turns, SR, and Modest, MF, 2005, "Interactions among soot, thermal radiation, and NO<sub>x</sub> emissions in oxygen-enriched turbulent non-premixed flames: a computational fluid dynamics modeling study", *Combustion and Flame*, v 141, pp 170-179.
- Yang, WH, and Blasiak, W, 2005, "Numerical simulation of properties of a LPG flame with high-temperature air", *International Journal of Thermal Sciences*, v 44, pp 973-985.

## 8. Copyright Notice

The authors are the only responsible for the printed material included in his paper.

## Análise da Operação de Motores Diesel com Misturas Parciais de Biodiesel

### André Valente Bueno

Universidade Estadual de Campinas- Faculdade de Engenharia Mecânica- Departamento de Energia  
valente@fem.unicamp.br

### Jose A. Velásquez

Pontifícia Universidade Católica do Paraná- Departamento de Engenharia Mecânica  
jose.velasquez@pucpr.br

### Luiz Fernando Milanez

Universidade Estadual de Campinas- Faculdade de Engenharia Mecânica- Departamento de Energia  
milanez@fem.unicamp.br

**Resumo.** As conseqüências da adição de biodiesel ao óleo diesel foram investigadas estabelecendo-se relações de causa e efeito entre o desempenho do motor e os processos de combustão e formação de mistura. Foram incluídos nesta discussão aspectos como emissões poluentes, formação de mistura, dinâmica do processo de combustão, eficiência de conversão do combustível, desempenho do motor e consumo específico. Utilizaram-se, sob tal propósito, técnicas tradicionalmente associadas à pesquisa e ao desenvolvimento dos motores de ciclo diesel, tais como a análise de liberação de energia, a análise exergética e ensaios dinamométricos. Os resultados obtidos no presente trabalho demonstram a atratividade, sob o ponto de vista operacional, da adição do éster etílico de soja ao óleo diesel na forma de misturas parciais.

**Palavras chave:** Biodiesel, Biocombustíveis, Motores Diesel, Análise Exergética

## 1. Introdução

Os ésteres de óleos oriundos de fontes biológicas, que recebem a denominação genérica de biodiesel, constituem uma alternativa promissora para a obtenção de combustíveis renováveis capazes de substituir o óleo diesel (Grabosky e McCormick, 1998). Estas substâncias possuem alto valor energético, são livres de enxofre e queimam de maneira similar à do óleo diesel. A sua aplicação em larga escala apresenta um grande potencial no Brasil, pois o país conta com uma ampla variedade de culturas para o fornecimento de óleos vegetais e possui tradição na produção de etanol a partir da cana de açúcar.

Dentre tais culturas, a soja apresenta escala suficiente para a produção imediata de biodiesel, respondendo por cerca de 90% da produção brasileira de óleos vegetais. Deste modo, o estudo dos efeitos da adoção do éster etílico do óleo de soja como um substituto parcial para o óleo diesel se revela consideravelmente oportuno. Foram conduzidos, sob tal propósito, testes em bancada nos quais se empregaram as técnicas experimentais de análise de liberação de energia e análise exergética (Bueno, 2006). Conforme se verá adiante, os resultados provenientes destes ensaios refletem os efeitos da introdução do biodiesel sobre as propriedades da mistura combustível, devendo-se destacar a importância da introdução de oxigênio na composição química do combustível, da redução de seu conteúdo energético e do acréscimo de sua viscosidade. As misturas parciais estudadas compreendem a adição de até 20% de biodiesel em volume, que corresponde à mistura B20. As propriedades destes combustíveis foram reportadas na Tabela 1. Vale ressaltar que a viscosidade das misturas parciais consideradas se encontra dentro dos limites estabelecidos pela norma ASTM D-445, que prevê um valor máximo de  $4,1 \times 10^{-2}$  m<sup>2</sup>/s a 40°C para esta propriedade do combustível.

Tabela 1: Propriedades do óleo diesel, do éster etílico do óleo de soja (biodiesel) e das misturas parciais de interesse.

Combustível	%Biodiesel (Volume)	Fórmula Empírica	$f_{st}$ [ $m_i/m_{ar}$ ] <sub>st</sub>	Densidade [kg/m <sup>3</sup> ]	Viscosidade [m <sup>2</sup> /s @ 40°C]	Nº de Cetanas [ASTM D-613]	PCI [MJ/kg]	Exergia [MJ/kg]
Óleo Diesel	0%	C <sub>10,80</sub> H <sub>18,70</sub> O <sub>0,00</sub>	$6,85 \cdot 10^{-2}$	850,0	$2,60 \cdot 10^{-2}$	45,00	43,30	44,98
B05	5%	C <sub>11,03</sub> H <sub>19,16</sub> O <sub>0,05</sub>	$6,89 \cdot 10^{-2}$	851,3	$2,66 \cdot 10^{-2}$	45,33	43,00	44,65
B10	10%	C <sub>11,27</sub> H <sub>19,64</sub> O <sub>0,11</sub>	$6,94 \cdot 10^{-2}$	852,6	$2,72 \cdot 10^{-2}$	45,60	42,69	44,33
B15	15%	C <sub>11,53</sub> H <sub>20,15</sub> O <sub>0,16</sub>	$6,98 \cdot 10^{-2}$	853,9	$2,79 \cdot 10^{-2}$	45,80	42,38	44,00
B20	20%	C <sub>11,80</sub> H <sub>20,69</sub> O <sub>0,22</sub>	$7,03 \cdot 10^{-2}$	855,2	$2,86 \cdot 10^{-2}$	46,30	42,06	43,35
Biodiesel	100%	C <sub>19,75</sub> H <sub>36,59</sub> O <sub>2,00</sub>	$7,83 \cdot 10^{-2}$	876,0	$4,57 \cdot 10^{-2}$	48,20	37,20	38,48



## 2. Aparato Experimental

O levantamento de dados de pressão utilizados na análise de liberação de energia e na análise exergética foi efetuado utilizando-se um sistema AVL Indiset 619. A instrumentação de medição de pressão foi empregada em conjunto com uma bancada dinamométrica, responsável pelo controle do regime de operação do motor e pelo levantamento das variáveis de operação correspondentes ao regime selecionado. Utilizou-se, sob tal propósito, um dinamômetro ZÖLLNER ALFA-160 conectado a um motor diesel totalmente instrumentado. O controle do dinamômetro e do avanço da bomba injetora, bem como a aquisição de dados correspondentes às variáveis de operação do motor, foram realizados empregando-se o sistema AVL Puma 5. A parcela do aparato experimental correspondente à bancada dinamométrica foi representada na Figura 1, discriminando-se as variáveis de operação registradas durante os ensaios.

Utilizou-se um motor diesel rápido turbo-alimentado de injeção direta MWM 6.07T GMT-400 durante a condução dos experimentos. Este motor pertence à série MWM SPRINT e dispõem de fluxo cruzado dos gases na câmara de combustão, turbocompressor com válvula ‘waste gate’, bomba distribuidora do tipo Bosch VE, bicos injetores com 5 furos e conjuntos porta injetores de duplo estágio. Suas especificações foram apresentadas na Tabela 2.

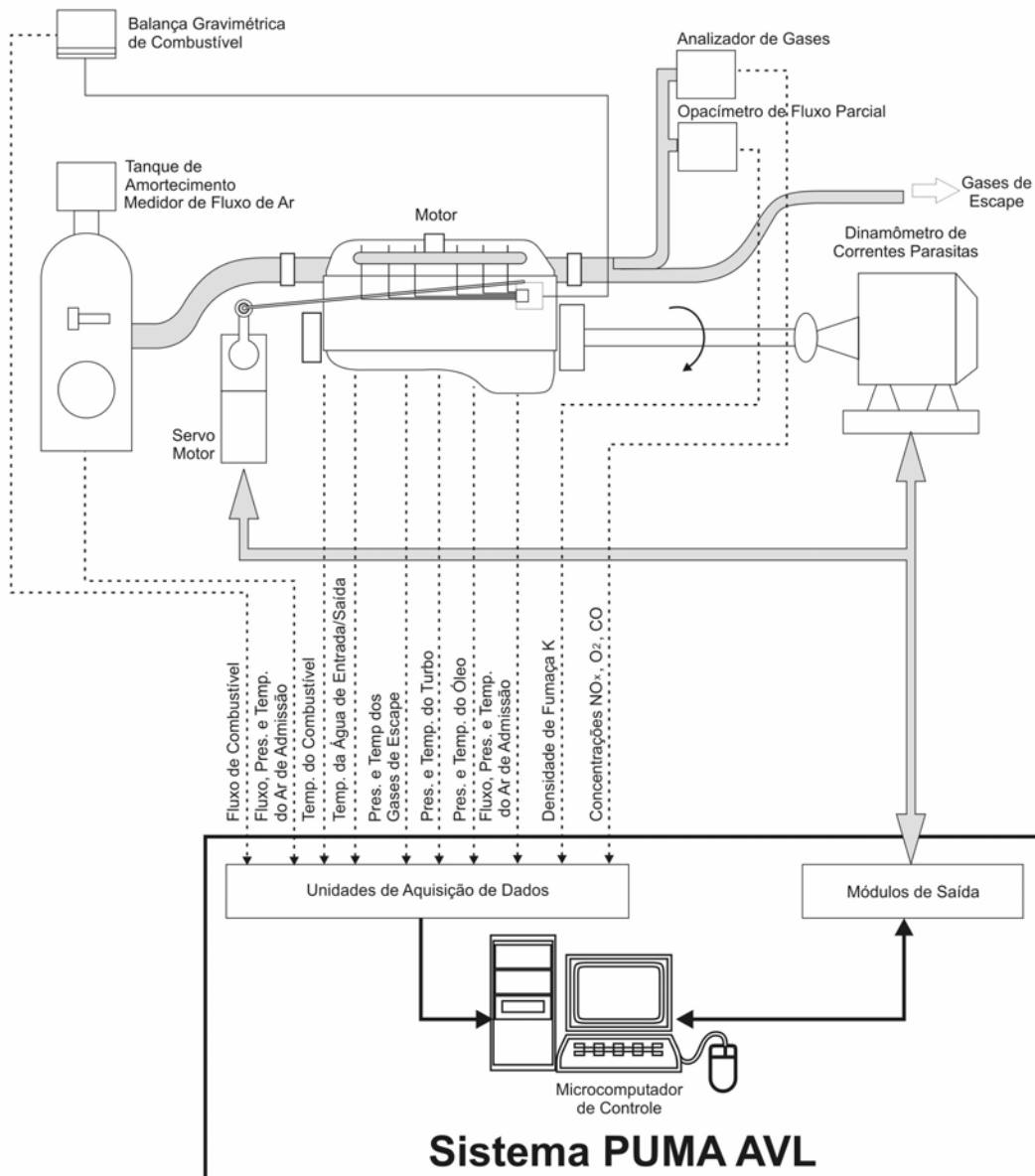


Figura 1: Representação esquemática da bancada de testes e das variáveis operacionais mensuradas.

Tabela 2: Especificações do motor utilizado nos experimentos.

Configuração	4 tempos de injeção direta turboalimentado
Volume Deslocado [dm <sup>3</sup> ]	4,2
Número de Cilindros	6
Válvulas por Cilindro (Admissão/Escape)	2/1
Pressão de Abertura dos Bicos Injetores (1° /2° Estágio) [bar]	220/300
Diâmetro do Pistão [m]	0,093
Curso [m]	0,103
Comprimento da Biela [m]	0,170
Relação de Compressão	17,8:1
Potência Máxima [kW]	123,0 a 3400rpm

### 3. Formação de Mistura

Os efeitos da adição do éster etílico de soja sobre a formação de mistura foram ilustrados a partir de dados coletados com o motor MWM 6.07 T operando a plena carga, tendo-se o óleo diesel e a mistura B20 como combustíveis. Devido à elevação de viscosidade promovida pelo biodiesel, verifica-se na Figura 2a uma redução na massa de combustível fornecida ao motor mediante a adoção da mistura B20, que se acentua em rotações superiores aos 3000 rpm. Outro aspecto relevante com respeito ao processo de queima das misturas estudadas é a presença de oxigênio na composição do biodiesel, que promove a elevação reportada na Tabela 1 para a relação mássica entre combustível e ar correspondente à combustão estequiométrica ( $f_{st}$ ). Obteve-se, por conta da combinação destes dois fatores, um empobrecimento na mistura para o caso de se agregar biodiesel ao combustível, conforme se observa na Figura 2b. Esta tendência é confirmada pelas composições de gases de escape apresentadas na Tabela 3, que apontam um acréscimo na fração molar de oxigênio e uma redução nas emissões de CO mediante a operação com a mistura B20. Para as concentrações estudadas, o impacto da elevação na densidade do combustível com a adição de biodiesel não se mostrou relevante quanto à formação de mistura, observando-se um incremento de apenas 0,6% na densidade entre B20 e o óleo diesel.

Tabela 3: Composição dos gases de escape para a operação do motor a 2000 rpm e plena carga.

	Diesel	B20
CO [ppm]	3117	2378
O <sub>2</sub> [fração molar]	0,069	0,074
$\phi_b$ (gases de escape)	0,66	0,63

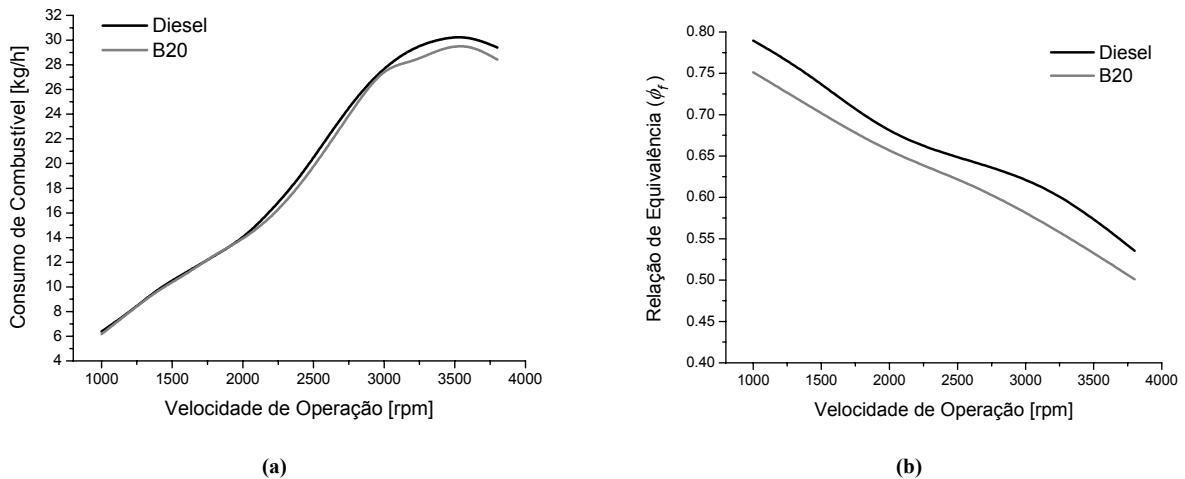


Figura 2: Consumo de combustível e relação de equivalência verificada no cilindro em condições de plena carga.

#### 4. Dinâmica do Processo de Combustão

A Figura 3 traz resultados obtidos para a liberação de energia com o motor operando em plena carga e com valores moderados (1400 rpm) e elevados (3200 rpm) de rotação. A contribuição de cada mecanismo de queima (pré-misturado e difusivo) para a liberação de energia foi mapeada aproximando-se as curvas de taxa aparente de queima representadas nesta ilustração por meio de duas funções de Wiebe. Os valores verificados para a eficiência de combustão e para a fração do combustível injetado queimada no modo pré-misturado ( $\chi_p$ ) foram apresentados nas Tabelas 4 e 5.

O ganho de viscosidade promovido pelo biodiesel tem um impacto importante na dinâmica do jato de combustível, elevando a sua velocidade e distância de penetração (Chang e Farrell, 1997 e Choi e Reitz, 1999). Obtém-se, desta forma, um acréscimo na quantidade de movimento turbulenta do jato e, por conseguinte, um incremento na taxa de preparação de mistura ao se agregar biodiesel ao óleo diesel. Por conta das elevadas relações de equivalência verificadas no jato de combustível, a presença de oxigênio na composição do biodiesel também contribui para a aceleração da preparação e queima da mistura. Deve-se mencionar, ainda, que introdução de biodiesel no combustível promove um decréscimo no período de atraso da ignição, correspondente ao aumento no número de cetano reportado na Tabela 1. Tem-se, deste modo, um intervalo de tempo inferior para a preparação de combustível até o instante da ignição, ou seja, para a preparação de combustível disponível para o mecanismo de queima pré-misturada. Para as misturas parciais analisadas, a sobreposição destes três fatores resulta em uma leve redução na combustão pré-misturada com a elevação da concentração de biodiesel.

Esta redução na queima pré-misturada é compensada rapidamente durante a fase inicial da combustão difusiva, devido à aceleração na liberação de energia desencadeada pela maior taxa de preparação de mistura. Ainda por conta do favorecimento à combustão difusiva, observa-se que a adição de biodiesel promoveu um pequeno acréscimo na fração de combustível queimada até o instante de abertura da válvula de escape, ou seja, na eficiência de combustão. Verifica-se, deste modo, que a utilização de biodiesel sob a forma das misturas parciais estudadas altera positivamente a dinâmica do processo de combustão.

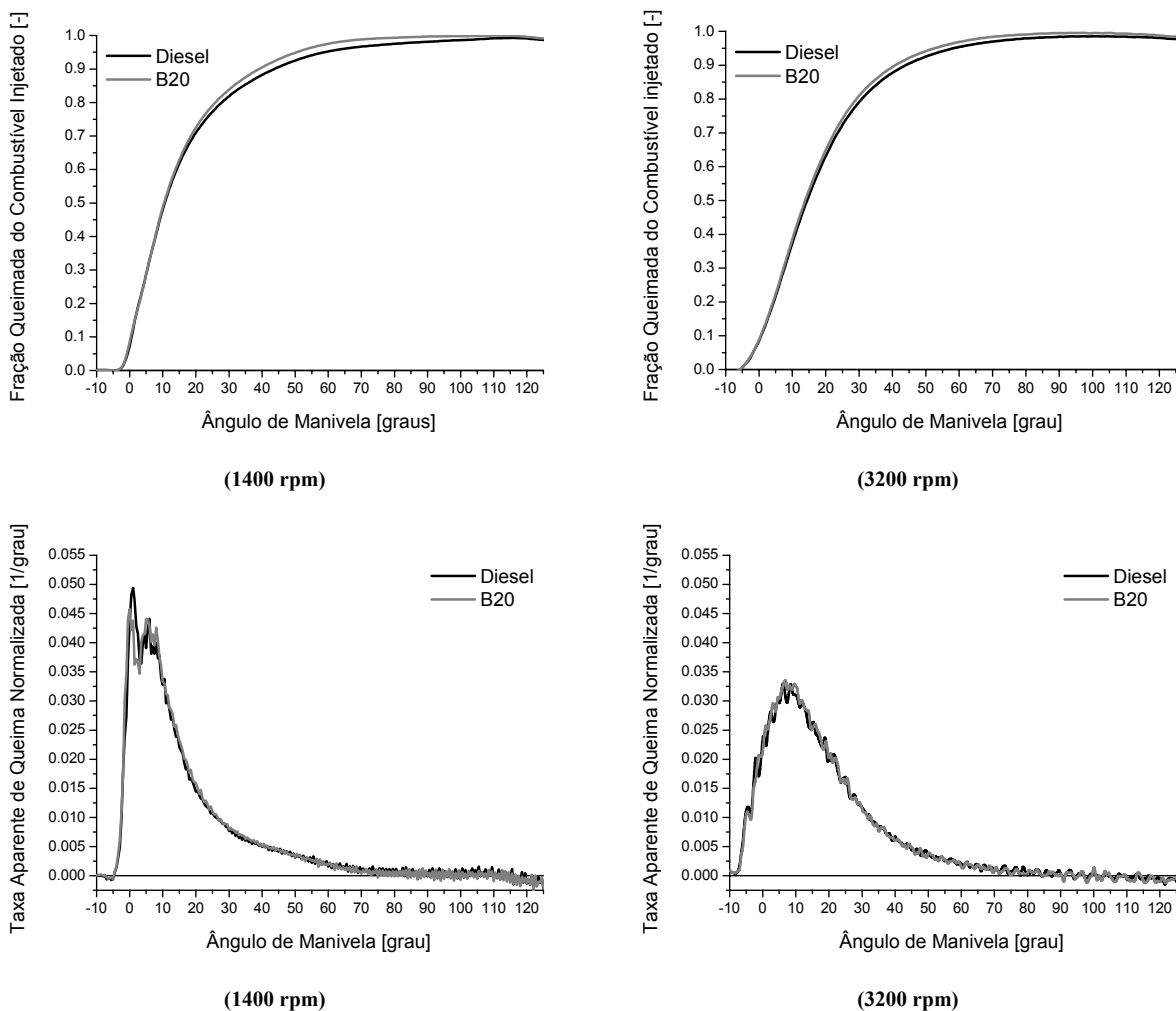


Figura 3: Resultados da análise de liberação de energia em plena carga.

Tabela 4: Parâmetros de liberação de energia para a operação do motor a 1400 rpm e plena carga.

	Diesel	B20
$\chi_p$	19,00%	17,00%
Eficiência de Combustão	98,98%	99,11%

Tabela 5: Parâmetros de liberação de energia para a operação do motor a 3200 rpm e plena carga.

	Diesel	B20
$\chi_p$	4,62%	3,86%
Eficiência de Combustão	97,73%	98,40%

## 5. Formação de Óxidos de Nitrogênio

Experimentos realizados em motores de ignição por centelha demonstram que a formação de óxidos de nitrogênio é favorecida em condições de mistura ligeiramente pobres nas quais se observem altas temperaturas (Benson e Whitehouse, 1983). Nos motores de ciclo diesel, o combustível preparado durante o atraso da ignição é queimado rapidamente através da passagem de uma chama pré-misturada. Este processo se dá em uma faixa de misturas e temperaturas propícias para a formação de óxidos de nitrogênio, contribuindo, portanto, para a formação desta substância poluente. Por este motivo, a proporção de queima pré-misturada foi reduzida de maneira considerável nos motores modernos. Após o estabelecimento da chama difusiva, a formação de óxidos de nitrogênio passa a ficar restrita à periferia do jato combustível (Dec, 1997).

Choi e Reitz (1999) examinaram as características de emissões das misturas entre o éster metílico do óleo de soja e o óleo diesel. Estes autores verificaram que devido às modificações impostas à trajetória do jato de combustível, a adição de biodiesel acresce a parcela da mistura exposta a altas temperaturas na periferia deste jato durante a combustão difusiva, levando a um leve favorecimento à formação de óxidos de nitrogênio com a operação do motor em cargas elevadas. Para condições de baixa carga, a combustão pré-misturada passa a ter uma participação importante no desenvolvimento de altas temperaturas no jato combustível, fazendo com que a menor temperatura de chama adiabática das misturas contendo biodiesel provoque uma redução na emissão de NO<sub>x</sub>.

A Tabela 6 apresenta os valores mensurados para a emissão de NO<sub>x</sub> e para a fração do combustível injetado queimada no modo pré-misturado com o motor operando a 2000 rpm e em condições de baixa, média e plena carga. Os valores verificados para as emissões de óxidos de nitrogênio demonstram a extensão dos efeitos apontados por Choi e Reitz para o biodiesel proveniente do metanol com o emprego do éster etílico de soja. Para o regime de plena carga, que foi dominado pela combustão difusiva, observa-se um leve favorecimento à formação de óxidos de nitrogênio com a adição de biodiesel. Com o acréscimo da participação da combustão pré-misturada em condições de carga parcial, verificou-se uma redução nas emissões de óxidos de nitrogênio para a mistura B20 com relação ao óleo diesel.

Deve-se mencionar, contudo, que a generalização destes resultados não se mostra adequada, pois a tecnologia formação de mistura aplicada em cada motor governa a morfologia do jato combustível e a dinâmica do processo de combustão, possuindo, portanto, pronunciada influência sobre as emissões de NO<sub>x</sub> alcançadas com a aplicação do biodiesel. A relevância da configuração do motor sobre a formação deste poluente foi comprovada pela Agencia de Proteção Ambiental Estadunidense (EPA, 2002), que efetuou um estudo detalhado dos efeitos da utilização do biodiesel sobre as emissões de exaustão. Para a aplicação da mistura B20, por exemplo, registraram-se neste estudo alterações de +8% a -6% na emissão de NO<sub>x</sub> de acordo com o motor utilizado (EPA, 2002).

Tabela 6: Emissão de Óxidos de Nitrogênio para a operação do motor a 2000 rpm.

Carga (fração do torque máximo)	$\chi_p$ (Diesel/B20) [%]	NO <sub>x</sub> (Diesel/B20) [ppm]	Varição no NO <sub>x</sub> p/ B20 [%]
33%	43,00/ <b>42,06</b>	310/ <b>292</b>	<b>-5,8</b>
66%	22,10/ <b>22,04</b>	664/ <b>614</b>	<b>-7,53</b>
100%	9,11/ <b>9,06</b>	879/ <b>882</b>	<b>+0,4</b>

## 6. Emissões de Monóxido de Carbono e Material Particulado

Os resultados obtidos para a emissão de monóxido de carbono com o motor operando a 2000 rpm e em condições de baixa, média e plena carga foram reportados na Tabela 7. Obteve-se uma redução média de 26% para esta substância poluente com a mistura B20. A origem de tal comportamento reside no empobrecimento da mistura no interior do jato combustível com o emprego do biodiesel. Estes dados também demonstram uma elevação gradual nos benefícios provenientes da adição de biodiesel com a redução da carga na qual o motor opera.

A utilização do biodiesel também pode contribuir para o abatimento da emissão de material particulado nos grandes centros urbanos. Por apresentar oxigênio em sua composição, o biodiesel introduz um oxidante nas regiões de mistura rica do jato de combustível, fornecendo um caminho alternativo para os percussores de fuligem. Obtém-se, deste modo, uma redução na fração não-solúvel do material particulado. De acordo com Choi e Reitz (1999), esta redução possui forte correlação com a concentração de oxigênio presente no combustível. A Tabela 8 apresenta valores mensurados para a densidade de fumaça nos gases de escape ( $k$ ) utilizando-se a mistura B20 e o óleo diesel como combustíveis. Estes dados indicam uma ampliação nos benefícios da adição de biodiesel quanto à emissão de material particulado mediante o enriquecimento da mistura. A restrição obtida na emissão de material particulado também depende da configuração do motor empregado, constando na literatura reduções médias de 10,1% (EPA, 2002) a 25% (McCormick et al., 2005) mediante a utilização da mistura B20. Os dados reportados na Tabela 8 indicam que o motor empregado no presente estudo se encontra em uma região média quanto à redução na emissão de material particulado, assim como ocorreu com o comportamento registrado para o  $\text{NO}_x$ .

Tabela 7: Emissão de monóxido de carbono para a operação do motor a 2000 rpm.

Carga (fração do torque máximo)	$\phi_b$ (Diesel/B20) (gases de escape)	CO (Diesel/B20) [ppm]	Varição no CO p/ B20 [%]
33%	0,30/ <b>0,28</b>	743/ <b>524</b>	<b>-29,48</b>
66%	0,51/ <b>0,49</b>	404/ <b>304</b>	<b>-24,75</b>
100%	0,66/ <b>0,63</b>	3117/ <b>2378</b>	<b>-23,70</b>

Tabela 8: Emissão de material particulado para a operação do motor a 2000 rpm.

Carga (fração do torque máximo)	$\phi_b$ (Diesel/B20) (gases de escape)	$k$ (Diesel/B20) [m-1]	Varição em $k$ p/ B20 [%]
66%	0,51/ <b>0,49</b>	0,49/ <b>0,44</b>	<b>-10,20</b>
100%	0,66/ <b>0,63</b>	3,34/ <b>2,71</b>	<b>-18,86</b>

## Eficiência Exergética do Processo de Combustão

Empregou-se o modelo de diagnóstico desenvolvido por Bueno (2006) durante a análise das eficiências do processo de combustão e da conversão da exergia do combustível em trabalho no interior do cilindro. Este modelo constitui uma extensão da análise de liberação de energia através da incorporação de conceitos relacionados à análise exergética, sendo baseado, portanto, no processamento de dados experimentais de pressão no cilindro.

A introdução de biodiesel no combustível apresentou efeitos negativos quanto à eficiência exergética do processo de combustão, ou seja, quanto à fração da exergia química da carga consumida pelo processo de combustão que é convertida em exergia termomecânica, tornando-se disponível para a transferência através de calor e trabalho. Apesar de possuir um comprimento médio das moléculas superior, a mistura B20 apresentou eficiência exergética instantânea de queima praticamente equivalente à do diesel sob as mesmas condições de temperatura. Esta convergência é ilustrada na Figura 4a, que traz os valores obtidos para a eficiência instantânea de queima em função da temperatura da carga.

Entretanto, ao se analisar o comportamento da eficiência exergética global de queima, que corresponde a toda a extensão do processo de combustão, observa-se que a adição de biodiesel reduz o valor deste parâmetro de desempenho. A Figura 4b exemplifica esta tendência, apresentando os valores obtidos para a eficiência exergética global de queima em condições de plena carga. Este fato tem origem na redução de temperatura da carga acarretada pelo emprego das misturas contendo o biodiesel, que foi ilustrada na Figura 5 juntamente com seu impacto na eficiência instantânea de combustão.

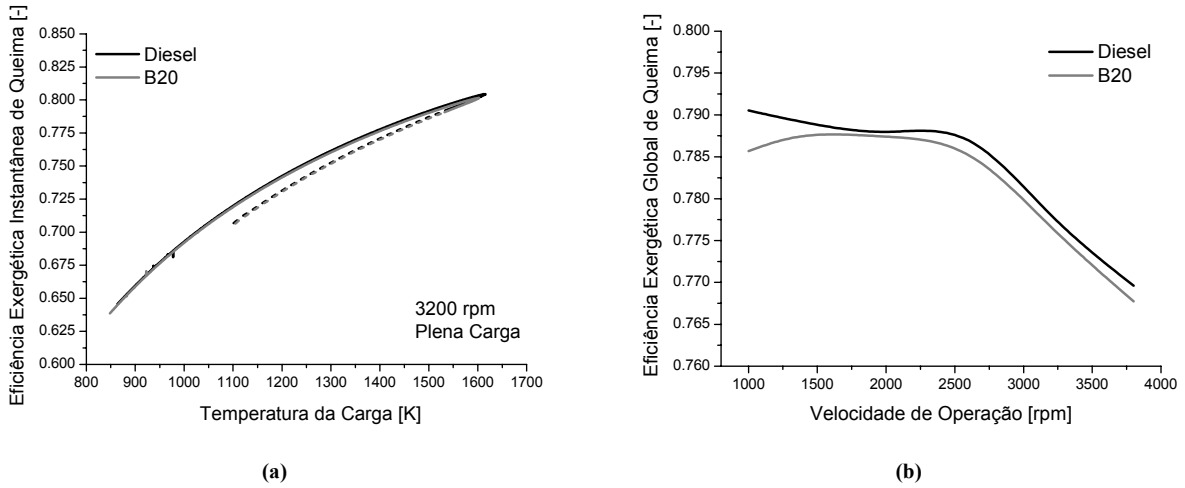


Figura 4: Variação da eficiência exergética do processo de combustão com a temperatura e rotação.

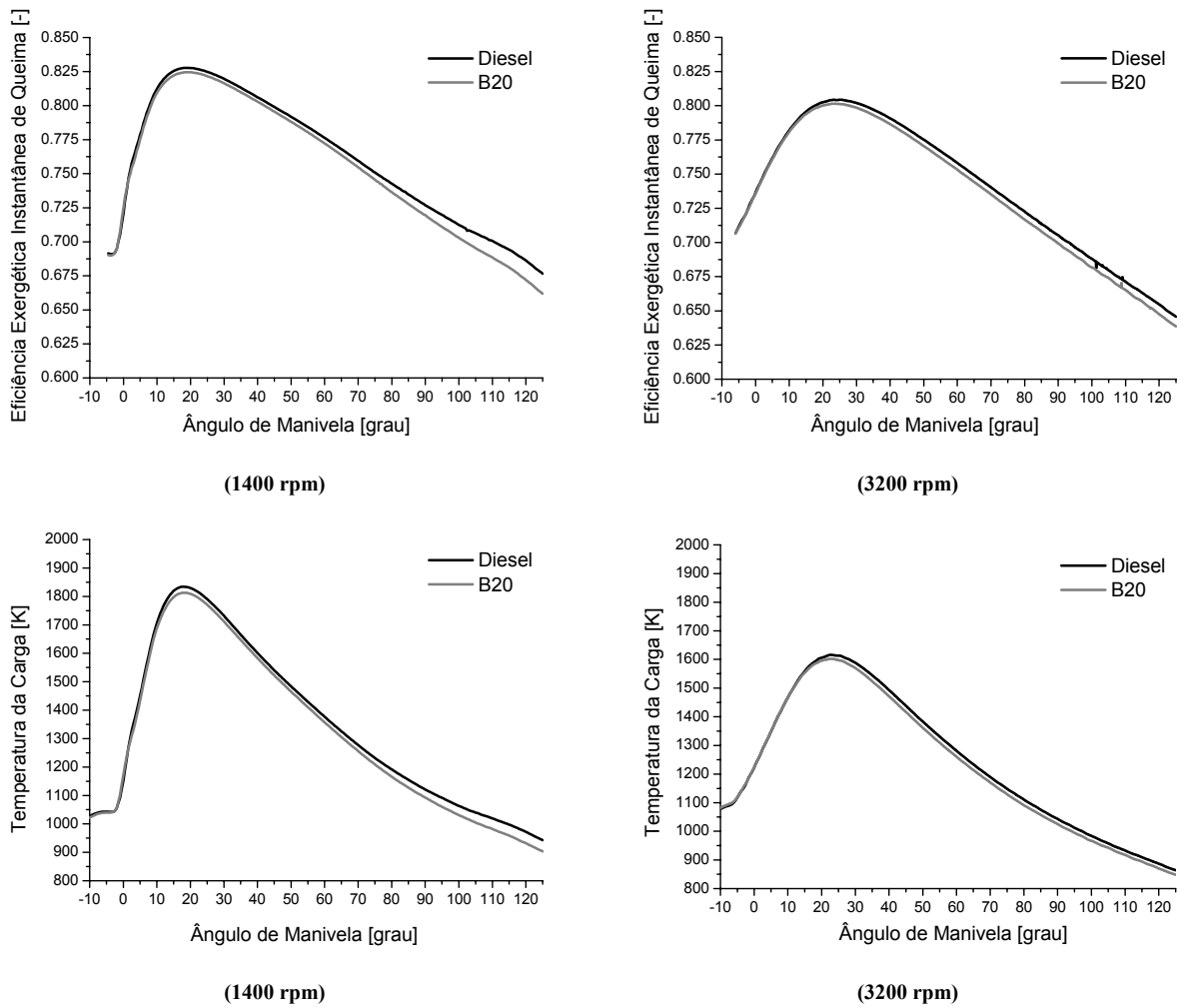


Figura 5: Eficiência exergética instantânea de queima e temperatura do fluido de trabalho em plena carga.

## 7. Eficiência de Operação

A exposição dos efeitos causados pelo biodiesel à eficiência de operação do motor tem início com uma análise, em condições de plena carga, da distribuição dada no cilindro à exergia fornecida com o combustível. O modelo de análise exergética formulado por Bueno (Bueno, 2006) também foi aplicado nesta tarefa, obtendo-se como resultados os termos cumulativos do balanço de exergia no cilindro durante a fase fechada do ciclo. A Figura 6 traz os valores destes termos normalizados com relação à exergia fornecida com o combustível, onde  $\Delta Ex_Q$  representa a fração rejeitada através do calor,  $\Delta Ex_W$  a fração liberada sob a forma de trabalho indicado,  $\Delta I$  a fração destruída por irreversibilidades,  $\Delta Ex_{tm}$  a fração acumulada na carga sob a forma de exergia termomecânica e  $\Delta Ex_{ch}$  a fração acumulada sob a forma de exergia química não convertida pela reação de combustão, que não pode ser aproveitada no interior do cilindro.

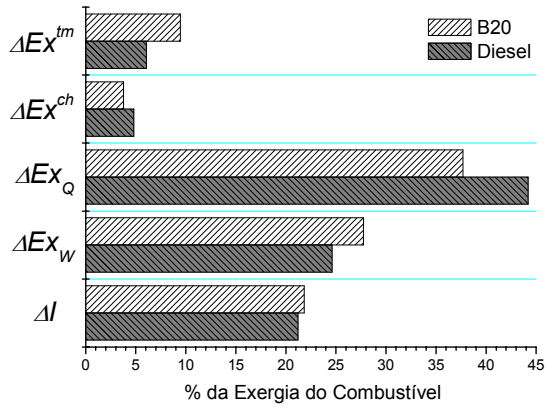
Devido à redução na eficiência exergética de combustão descrita há pouco, observam-se nesta ilustração valores superiores para a irreversibilidade mediante a utilização da mistura B20. Entretanto, ao se analisar a eficiência de operação do motor, outros aspectos além da eficiência de combustão e da destruição de exergia devem ser levados em conta. Dentre tais aspectos, pode-se destacar o nível de consumo da exergia química da carga e a razão de conversão da exergia termomecânica em trabalho.

Por promover a formação de produtos de combustão com menor exergia química, a adição de biodiesel à mistura reduziu a parcela da exergia química da carga que não pôde ser consumida ao longo do processo de combustão. Este comportamento tem origem no empobrecimento da mistura e na redução da relação C/H do combustível ocasionados pela introdução do biodiesel. Vale ressaltar que o incremento no consumo da exergia química da carga suplantou os efeitos da redução na eficiência exergética de combustão, obtendo-se uma quantidade superior de exergia termomecânica para a transferência através de fluxos de trabalho, calor e massa com o acréscimo de biodiesel ao combustível. Ainda por conta da redução na relação de equivalência proporcionada pelo biodiesel, verificou-se um decréscimo na rejeição de exergia termomecânica através do calor e uma elevação para a transferência por meio do trabalho de expansão com a mistura B20. Constatou-se, portanto, um favorecimento à conversão da exergia do combustível em trabalho no interior do cilindro mediante a utilização da mistura B20.

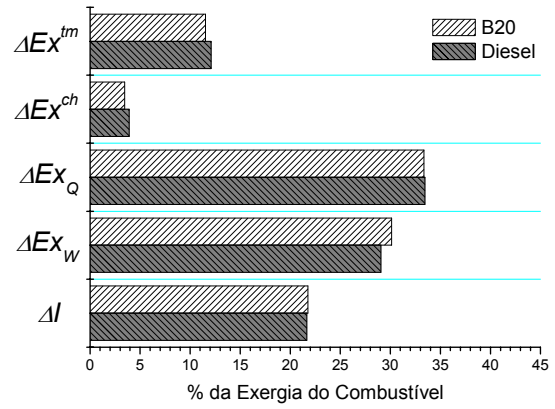
A avaliação dos termos fornecidos pelo modelo de análise exergética para o balanço de exergia no cilindro, que podem ser considerados parâmetros indicados, proporcionou uma visão intensiva dos efeitos da adição de biodiesel sobre a eficiência de operação do motor. Todavia, resta acompanhar a ação destes efeitos sobre a eficiência global de operação do motor, isto é, sobre o comportamento observado nos ensaios em bancada para as variáveis de frenagem. Utilizou-se a seguinte expressão para a determinação da eficiência de conversão do combustível:

$$n_f = \frac{P_b}{m_f ex_f} \quad (1)$$

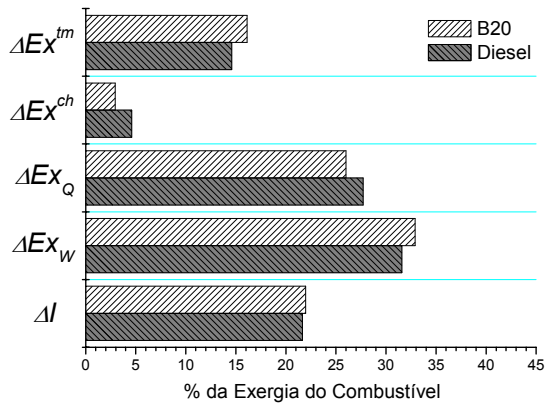
onde  $P_b$  representa a potência de frenagem,  $m_f$  a vazão mássica de combustível entregue ao motor e  $ex_f$  a exergia de fluxo deste combustível. Os mapas de eficiência obtidos para as misturas parciais de interesse foram apresentados na Figura 7. Estes mapas demonstram que o ganho de eficiência capturado pelo modelo de análise exergética se estendeu para os parâmetros de frenagem do motor, em todo o seu campo de operação. Observa-se, ainda, uma rápida elevação na eficiência de conversão do combustível com a adição de biodiesel até a mistura B10, e um ganho modesto no campo de eficiências com o acréscimo da concentração de biodiesel entre este patamar e a mistura B20.



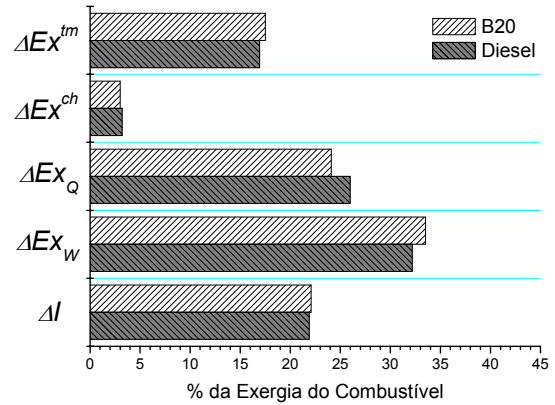
(1000 rpm)



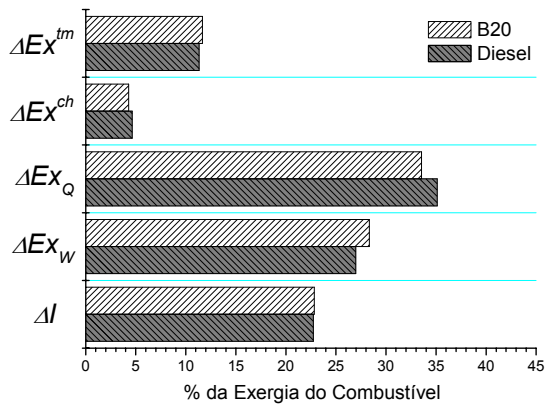
(1400 rpm)



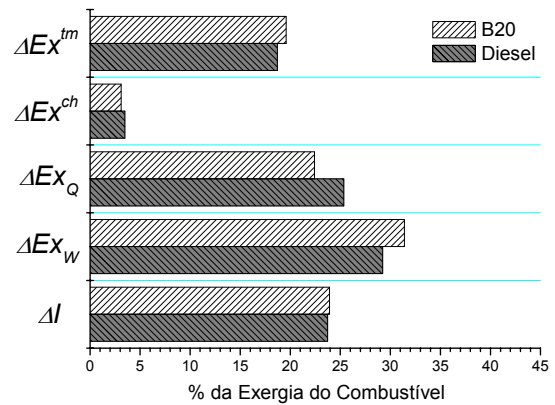
(2000 rpm)



(2600 rpm)



(3200 rpm)



(3800 rpm)

Figura 6: Termos cumulativos do balanço de exergia obtidos para a operação do motor em plena carga.



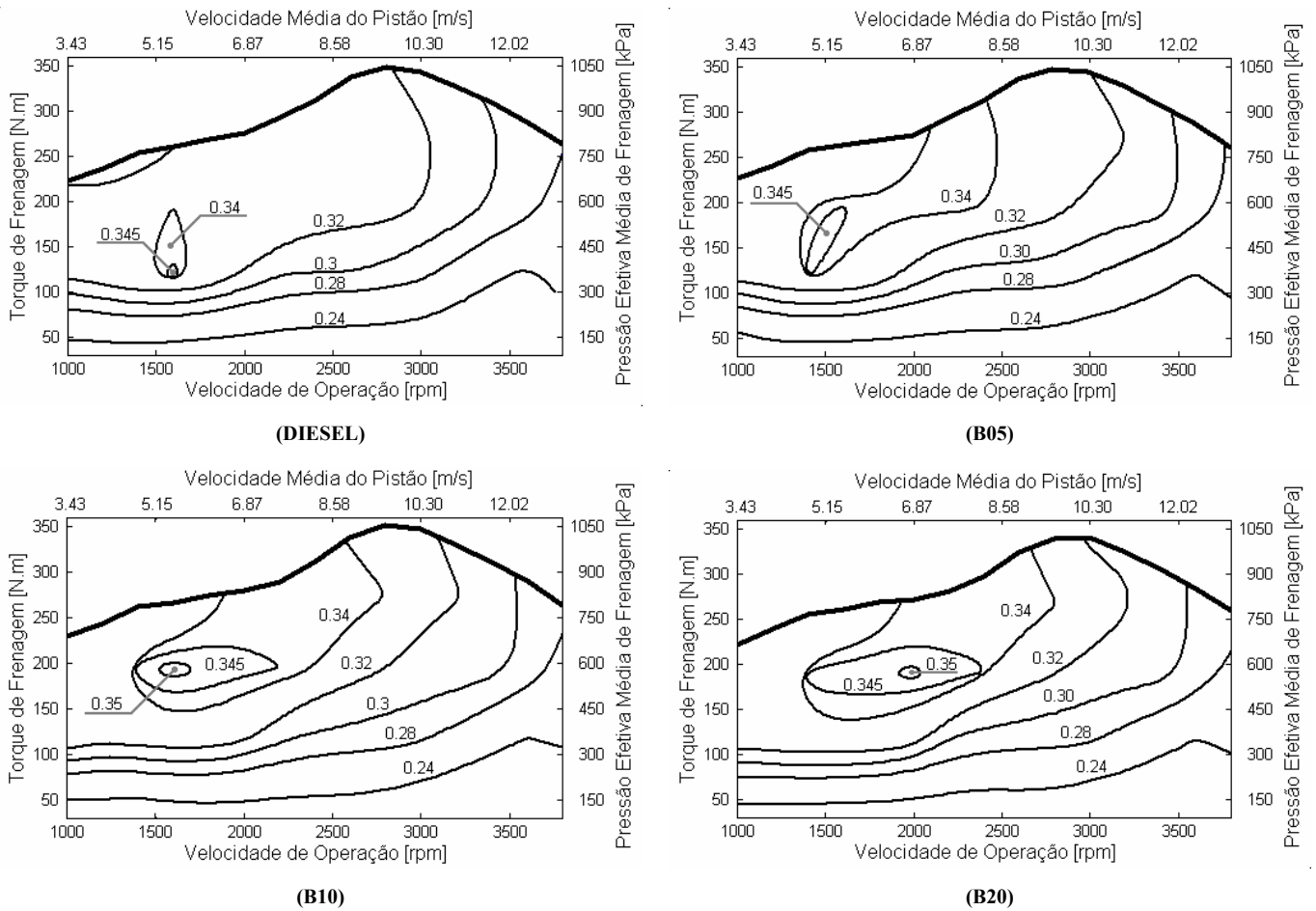


Figura 7: Mapas de eficiência de conversão do combustível para as misturas entre óleo diesel e biodiesel.

### 8. Desempenho e Consumo Específico

Os resultados obtidos em ensaios dinamométricos de plena carga foram apresentados na Figura 8. O desempenho registrado para as misturas parciais nesta ilustração traduz a contraposição entre os principais efeitos da adição de biodiesel ao óleo diesel: o ganho na eficiência de conversão e as reduções no fornecimento e no conteúdo energético do combustível. Graças à rápida elevação na eficiência de conversão do combustível verificada para a introdução de biodiesel até 10% em volume, a mistura B10 exibe o melhor compromisso entre os fatores mencionados acima, suplantando os demais combustíveis quanto ao desempenho. Para a adição de biodiesel em concentrações superiores à da mistura B10, o ganho de eficiência não se mostrou suficiente para compensar os efeitos da redução no influxo de exergia associado ao combustível, verificando-se uma pequena queda no desempenho com relação ao óleo diesel.

A Figura 9 traz os mapas de consumo específico obtidos com o óleo diesel e as misturas parciais em estudo. Para o consumo específico, a adição de biodiesel estabelece um compromisso entre a elevação da eficiência de conversão do combustível e a redução de seu conteúdo energético, que também favorece a mistura B10. A partir da mistura B10, a adição de biodiesel no combustível passa a ocasionar uma pequena deterioração no consumo específico. Todavia, neste caso, ainda se observa um benefício para as misturas B15 e B20 com relação ao óleo diesel.

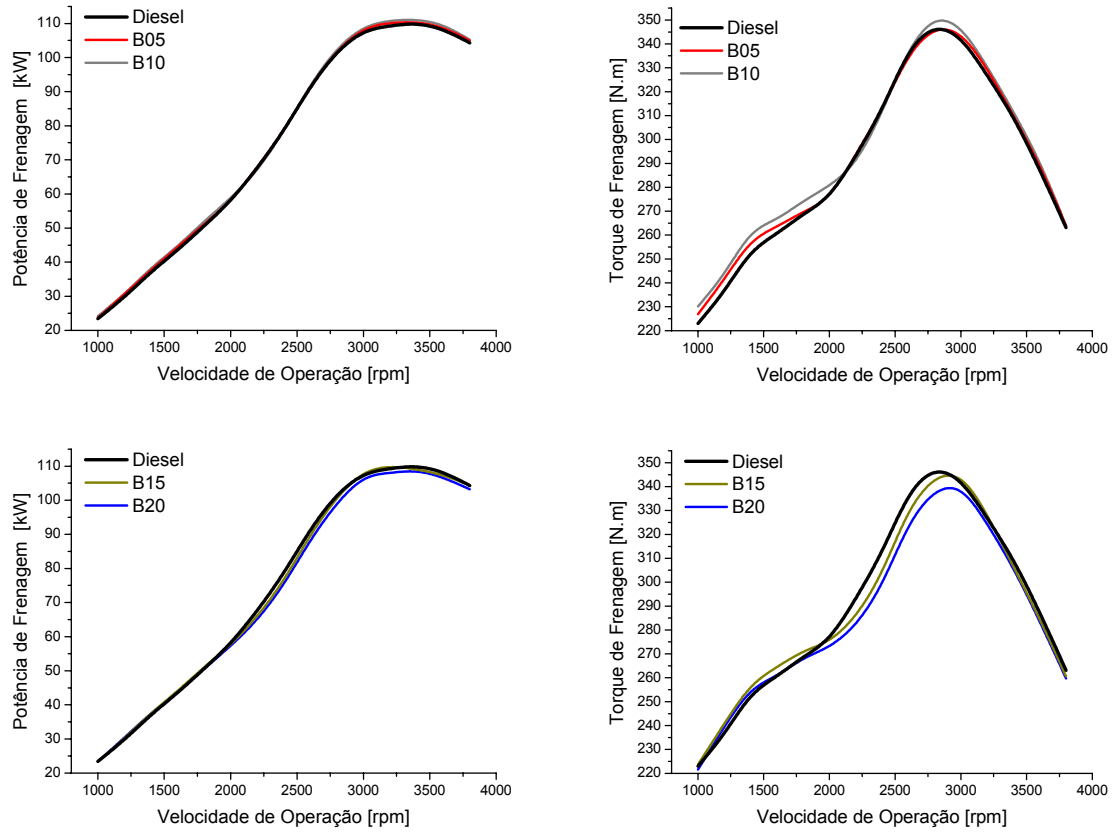


Figura 8: Diagramas de desempenho obtidos para as misturas entre óleo diesel e biodiesel.

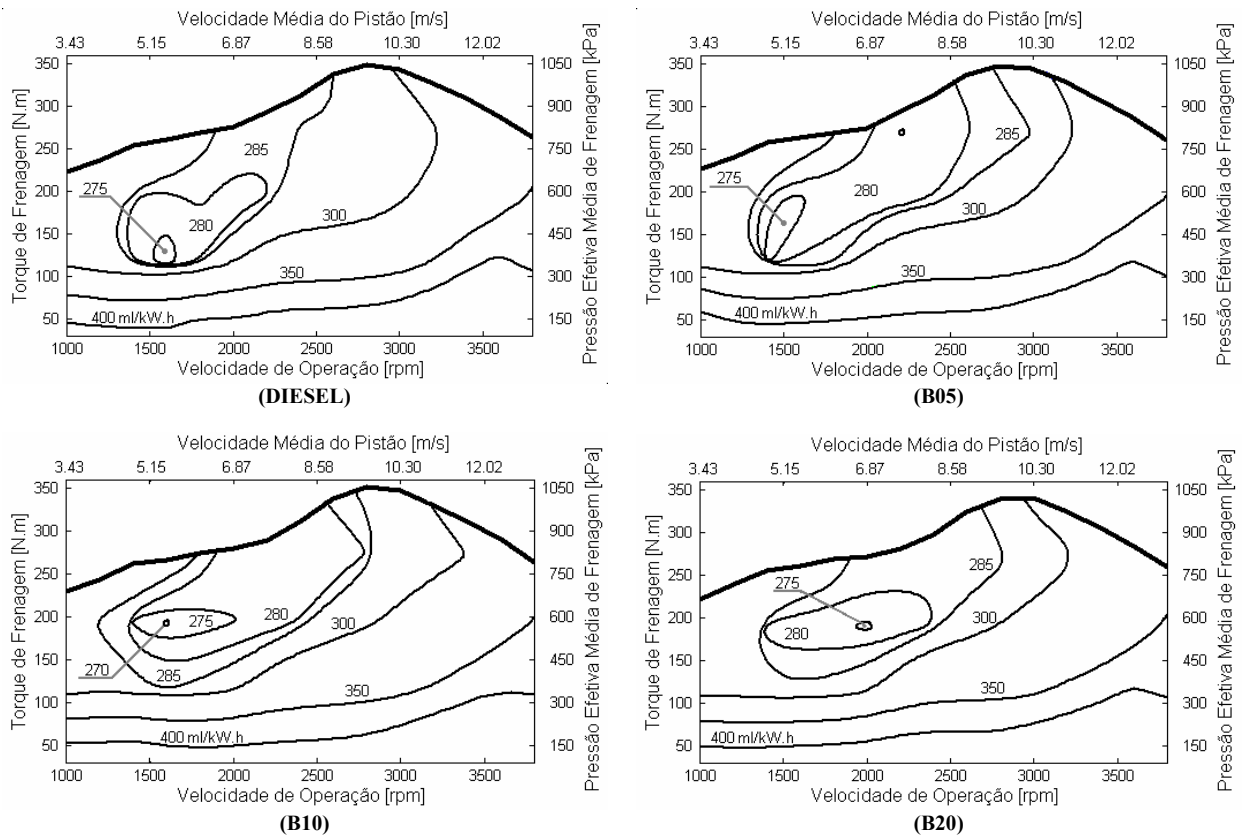


Figura 9: Mapas de performance obtidos para as misturas entre óleo diesel e biodiesel.

## 9. Conclusões

Os efeitos da adição do éster etílico de soja ao óleo diesel foram analisados utilizando-se dados coletados em ensaios realizados com um motor diesel rápido de injeção direta turbo-alimentado. Para as misturas combustíveis estudadas, que compreendem a adição de até 20% de biodiesel em volume, verificou-se uma aceleração na liberação de energia durante a queima difusiva e um acréscimo na fração queimada do combustível injetado. A introdução de biodiesel também promoveu um empobrecimento da mistura, além de uma redução no influxo de energia associado ao combustível.

Demonstrou-se que a adição de biodiesel nas concentrações estudadas favorece a conversão da exergia do combustível em trabalho de expansão no interior do cilindro, proporcionando uma elevação na eficiência de conversão do combustível. Esta elevação de eficiência possui um impacto operacional relevante, proporcionando uma redução no consumo específico de combustível para as misturas estudadas e um ganho de desempenho para a adição de biodiesel em concentrações abaixo da correspondente à mistura B10. Em patamares superiores ao da mistura B10, o impacto da eficiência de conversão é superado pelos efeitos da redução do influxo de energia com o combustível, obtendo-se um desempenho ligeiramente inferior ao verificado com o óleo diesel.

Os resultados apresentados reiteram a atratividade, sob o ponto de vista operacional, da adição do éster etílico de soja ao óleo diesel sob a forma de misturas parciais. Deve-se ressaltar, ainda, que dentre os combustíveis analisados a mistura B10 ofereceu as melhores características quanto ao desempenho e ao consumo específico.

## 10. Referências

- Benson, R. S., Whitehouse, N.D., 1983, "Internal Combustion Engines", Primeira Edição, Pergamon Press.
- Bueno, A. V., 2006, "Análise da Operação de Motores Diesel com Misturas Parciais de Biodiesel", Faculdade de Engenharia Mecânica, Universidade Estadual de Campinas, Tese de Doutorado.
- Chang, C., Farrell, P., 1997, "A Study on the Effects of Fuel Viscosity and Nozzle Geometry on High Injection Pressure Diesel Spray Characteristics", SAE Paper 970353.
- Choi, C. Y., Reitz, R. D., 1999, "A Numerical Analysis of the Emissions Characteristics of Biodiesel Blended Fuels", J. of Engineering for Gas Turbines and Power, Vol. 121, p. 31.
- Choi, C. Y., Reitz, R. D., 1999, "An Experimental Study on the Effects of Oxygenate Fuel Blends and Multiple Injection Strategies on DI Diesel Engine Emissions", Fuel, Vol. 78, p. 1303-1327.
- Dec, J. E., 1997, "A Conceptual Model of DI Diesel Combustion Based on Laser-Sheet Imaging", SAE Paper 970803.
- Grabosky, M., S., McCormick, R., L., 1998, "Combustion of Fat and Vegetable Oil Derived Fuels in Diesel Engines", Pog. Energy Combust. Sci., Vol. 24, pp. 125-164.
- McCormick, R.L., Tennant, C.J., Hayes, R.R., Black, S., Ireland, J., McDaniel, T., Williams, A., Frailey, M., Sharp, C.A., 2005, "Regulated Emissions from Biodiesel Tested in Heavy-Duty Engines Meeting 2004 Emission Standards", SAE Paper 2005-01-2200.
- United States Environmental Protection Agency (EPA), 2002, "A Comprehensive Analysis of Biodiesel Impacts on Exhaust Emissions", Draft Technical Report EPA420-P-02-001.

### Analysis of Diesel Engine Operation with Biodiesel Blends

André Valente Bueno

Universidade Estadual de Campinas- Faculdade de Engenharia Mecânica- Departamento de Energia  
valente@fem.unicamp.br

Jose A. Velásquez

Pontifícia Universidade Católica do Paraná- Departamento de Engenharia Mecânica  
jose.velasquez@pucpr.br

Luiz Fernando Milanez

Universidade Estadual de Campinas- Faculdade de Engenharia Mecânica- Departamento de Energia  
milanez@fem.unicamp.br

### Abstract

The consequences of the biodiesel blends with diesel fuel were analyzed establishing cause and effect relationships between the engine performance and the combustion and mixture preparation processes. In this investigation, aspects like pollutant emissions, mixture preparation, dynamic of the combustion process, fuel conversion efficiency, performance under full load and specific fuel consumption were included. Techniques traditionally associated with diesel engines research and development were utilized for this purpose, including heat release analysis, exergetic analysis and dynamometric bench tests. The results obtained in the present work indicate operational benefits with the use of the biodiesel blends.

Keywords: Biodiesel, Biofuels, Diesel Engines, Exergetic Analysis

## **DETERMINAÇÃO EXPERIMENTAL DA SENSIBILIDADE TÉRMICA DOS PROPELENTES COMPÓSITOS DO TIPO HTPB/AP/AL**

### **William Stanisce Corrêa**

Instituto de Aeronáutica e Espaço – IAE, São José dos Campos, Brasil  
william@iae.cta.br

### **Wilson Kiyoshi Shimote**

Instituto de Aeronáutica e Espaço – IAE, São José dos Campos, Brasil  
wilson@iae.cta.br

### **Rodrigo Roversi Rapozo**

Instituto de Aeronáutica e Espaço – IAE, São José dos Campos, Brasil  
rapozo@iae.cta.br

### **Pedro Teixeira Lacava**

Instituto Tecnológico de Aeronáutica – ITA, São José dos Campos, Brasil  
placava@ita.br

**Resumo.** O conhecimento da sensibilidade térmica dos propelentes é de fundamental importância para o cálculo dos parâmetros propulsivos de motores foguete. Conforme citado na literatura a temperatura inicial do bloco propelente exerce influência sobre a velocidade de queima destes motores. Diferenças na velocidade de queima, devido à diferença de temperatura inicial do bloco propelente, resultam em alteração no tempo de operação e no nível de pressão de câmara, podendo afetar o desempenho do foguete. Este trabalho apresenta os valores da sensibilidade térmica dos propelentes PC1, PC2 e PC3, utilizados no foguete de sondagem VSB-30, obtidos através da queima de motores testes com o bloco de propelente climatizado em diferentes temperaturas. A obtenção deste parâmetro permite a estimativa da velocidade de queima, e previsão de funcionamento de motores em diferentes condições de operação com maior precisão.

*Palavras chave:* sensibilidade térmica, propelentes sólidos, propelentes compósitos tipo HTPB/AP/AL, motor foguete.

### **1. Introdução**

A previsão correta do funcionamento de motores foguetes a propelente sólido depende das informações das características do propelente, de sua velocidade de queima, da evolução da superfície de queima do bloco de propelente e também das condições ambientais do local de lançamento. O conhecimento do comportamento balístico do propelente no ambiente de operação do foguete é essencial para o sucesso de missões, onde, a trajetória, o apogeu e o ponto de impacto da carga útil devem ser calculados com precisão. A sensibilidade térmica do propelente é um dos parâmetros que influenciam nestes cálculos, visto que o tempo de operação pode variar, dependendo da temperatura do sítio de lançamento (Corrêa, 2005).

Assim, dentre desse contexto, o presente trabalho apresenta os valores das sensibilidades térmicas dos propelentes sólidos compósitos HTPB/AP/Al utilizados no foguete de sondagem VSB-30, calculados para três faixas de temperaturas. Esse foguete foi desenvolvido pelo IAE em parceria com a ESA, Agência Espacial Européia, e é lançado de uma base na Suécia, apresenta rígidos requisitos para o cálculo de sua trajetória em função da limitação da área disponível para resgate da carga útil, sendo este um dos fatores motivadores para realização deste estudo.

A necessidade mais urgente é a de determinar o comportamento de queima destes propelentes em temperaturas próximas de 0°C ou até mesmo abaixo desta, que são temperaturas facilmente verificadas neste sítio de lançamentos. Apesar de o lançador ser abrigado e climatizado durante as operações de preparação para o lançamento, o veículo fica exposto nos instantes finais que antecedem o lançamento. Esta exposição pode ser suficiente para alterar a temperatura do bloco de propelente, mesmo considerando as boas propriedades isolantes do propelente. Essa alteração certamente mudará o comportamento de queima dos propelentes e conseqüentemente, poderá alterar a missão do veículo como um todo. A dispersão do ponto de impacto em missões envolvendo recuperação de carga útil, principalmente em veículos não controlados, é um grande complicador que pode por em risco o sucesso da missão (Corrêa, 2005).

Apesar de haver muitas publicações relacionadas a propelentes compósitos HTPB/AP/Al, trabalhos envolvendo estudos de sensibilidade térmica da velocidade de queima são raros. Se considerarmos as composições químicas

específicas dos propelentes, este trabalho pode ser visto como um estudo de caso aplicado aos propelentes em uso no IAE. Foram identificados na pesquisa bibliográfica alguns trabalhos referentes ao assunto.

O trabalho realizado por Gaunce e Osborn (1986), inicia-se endossando a teoria que reconhece a influência da temperatura inicial do bloco, na queima do propelente sólido. O trabalho ainda expressa a sensibilidade térmica do propelente na forma de dois diferentes coeficientes de temperatura, sendo o primeiro relativo ao efeito da temperatura na velocidade de queima num ambiente com pressão constante ( $\sigma_p$  definido em Sutton (1992)), e o segundo o efeito da temperatura na pressão de um motor a propelente sólido ( $\pi_k$  definido em Sutton (1992)). Esses autores ainda condenaram assumir que os dois coeficientes possam ser relacionados, de tal maneira que todos os efeitos da temperatura fossem agrupados em uma única constante, como era feito até então.

Hamke et al (1987) apresentam um estudo específico para um propelente AP/ HTPB. Este trabalho aborda uma técnica para determinar teoricamente o coeficiente de sensibilidade térmica  $\pi_k$ , através de dados gerados por um modelo de combustão, que permite estudo paramétrico dos fatores (velocidade característica, expoente de pressão e de temperatura da velocidade de queima) que afetam este coeficiente e são influenciados pela temperatura inicial do bloco propelente. Como conclusão os autores fazem comparações do comportamento de  $\pi_k$  com a variação dos teores de oxidante em relação à pressão ou  $K_n$  (razão entre a área de queima e a da garganta) e ao expoente de pressão.

Cohen e Flanigan (1985) fizeram uma revisão bibliográfica dos mecanismos que afetam a sensibilidade térmica e utilizaram os modelos de combustão apresentados nestas publicações. Classificaram os mecanismos que afetam a sensibilidade térmica em quatro categorias: a primeira considera os mecanismos simples que são tratados nos modelos analíticos, incluindo o aumento da temperatura da superfície do propelente e o calor oriundo da chama; a segunda considera os aspectos complexos e não ideais dos mecanismos dos processos de combustão que geralmente não são tratados nos modelos, como exemplos podem ser citados a queima e a fundição da superfície, a aglomeração de alumínio, as não conformidades de diversas escalas, e determinadas interações entre os componentes químicos; a terceira vem das mudanças dos mecanismos de controle, alguns dos quais são tratados nos modelos apresentados, e ocorrem por alterações no expoente de pressão, que como resultado também ocasiona alterações na sensibilidade térmica; a quarta cobre os efeitos do ambiente do motor, principalmente na queima erosiva. Os autores ainda fizeram algumas considerações sobre os modelos de combustão, onde as análises fundamentais de combustão provêm entendimento do mecanismo de controle da sensibilidade térmica, explicando a maioria dos efeitos observados em dados experimentais. Porém, estes modelos não tratam alguns dos aspectos do comportamento de combustão não ideal e a influência dos aditivos por si de uma maneira direta. Os autores recomendaram que a dependência das propriedades térmicas com a temperatura deveria ter sido levada em conta, além dos efeitos dos tipos de ligantes.

No trabalho de Kishore e Sridhara (1986), os autores afirmam que a temperatura inicial dos propelentes sólidos influencia a velocidade de queima, afeta o desempenho dos motores foguetes e que geralmente o aumento da temperatura aumenta a velocidade de queima. Os autores ainda definem sensibilidade térmica, citam uma série de trabalhos relacionados ao tema para diversos tipos de propelentes sólidos e apresentam relações envolvendo a sensibilidade térmica, pressão de câmara e temperatura inicial do bloco.

## 2. Metodologia para obtenção da sensibilidade térmica

Neste item são mostrados os equacionamentos e os procedimentos utilizados para determinação dos valores da sensibilidade térmica dos três propelentes estudados em três diferentes faixas de temperatura.

A equação da velocidade de queima para os propelentes sólidos compósitos é dada por:

$$r = a P_C^n, \quad (1)$$

onde  $r$  é a velocidade de queima,  $P_C$  é a pressão de câmara,  $a$  é uma constante empírica influenciada pela temperatura ambiente do bloco de propelente, também conhecida como coeficiente de temperatura, e  $n$  é o expoente de pressão da velocidade de queima (Barrère, 1960). A determinação da velocidade de queima é experimental.

A sensibilidade térmica da velocidade de queima, representada por  $\sigma_p$ , expressa a variação da velocidade de queima em função da variação da temperatura do bloco de propelente para uma determinada pressão de câmara.

$$\sigma_p = \left( \frac{\partial \ln r}{\partial T} \right)_p = \frac{1}{r} \left( \frac{\partial r}{\partial T} \right)_p \quad (2)$$

A sensibilidade térmica da pressão  $\pi_k$ , expressa a variação da pressão de câmara em função da temperatura do bloco de propelente para um valor particular de  $K$ , uma função geométrica da razão entre a superfície de queima  $A_b$  e a área da seção crítica  $A_t$ .

$$\pi_K = \left( \frac{\partial \ln P}{\partial T} \right)_K = \frac{1}{P_C} \left( \frac{\partial P}{\partial T} \right)_K \quad (3)$$

Geralmente, no desenvolvimento de um novo propelente, o coeficiente  $\sigma_p$  é calculado a partir de dados de queima em Bomba Crawford e  $\pi_K$  a partir da queima de motores reduzidos ou em motores em escala real.

Para um dado valor de  $\pi_K$ , o efeito de pequenas variações da temperatura do bloco de propelente na pressão da câmara do motor pode ser obtido a partir da integração da equação (2):

$$\Delta P \cong \pi_K P_C \Delta T \quad , \quad (4)$$

onde  $P_C$  é a pressão de câmara a uma determinada temperatura,  $\Delta P$  é o acréscimo de pressão devido à diferença de temperatura  $\Delta T$ , que é tomada em relação à temperatura de referência.

Os valores de  $\pi_K$  e  $\sigma_p$  dependem primariamente da natureza da velocidade de queima, da composição do propelente e do mecanismo de combustão do propelente.

A equação (5) estabelece a relação entre as duas sensibilidades térmicas.

$$\pi_K = \frac{1}{1-n} \sigma_p \quad (5)$$

Substituindo o valor de  $r$  da equação (1) na equação (2) obtém-se a equação (6), que define  $\sigma_p$  em termos de variações no fator de temperatura  $a$  para uma pressão de câmara constante.

$$\sigma_p = \left[ \frac{\partial \ln(a P_C^n)}{\partial T} \right]_P = \frac{1}{a} \left[ \frac{\partial a}{\partial T} \right]_P \quad (6)$$

Usando a sensibilidade térmica e a equação (1), a velocidade de queima do propelente, pode ser aproximada para:

$$r = a P_C^n e^{\sigma_p \Delta T} \quad (7)$$

A alteração na velocidade de queima devido à variação na temperatura do bloco de propelente, em relação à lei de queima determinada empiricamente, é traduzida pelo parâmetro denominado sensibilidade térmica ( $\pi_K$ ).

De (5), vem:

$$\sigma_p = \pi_K \cdot (1-n) \quad (8)$$

substituindo  $\sigma_p$  em (7) fica:

$$r = a \cdot P_C^n e^{\pi_K \cdot (1-n) \cdot \Delta T} \quad (9)$$

ou,

$$r = a \cdot P_C^n e^{\pi_K \cdot (1-n) \cdot (T-T_0)} \quad (10)$$

Desta forma o coeficiente “a” da equação (10) será definido da seguinte forma:

$$a = a_0 \cdot \alpha \quad (11)$$

onde:

$$\alpha = \frac{r_1}{r_2} \quad (12)$$

e

$$\alpha = e^{(1-n) \cdot \pi_K \cdot (T-T_0)} \quad (13)$$

Aplicando ln em (13), vem:

$$\ln \alpha = (1 - n) \cdot \pi_K \cdot (T - T_0) \cdot \ln e \tag{14}$$

$$\ln \alpha = (1 - n) \cdot \pi_K \cdot (T - T_0) \tag{15}$$

$$\pi_K = \frac{\ln \alpha}{(1 - n) \cdot (T - T_0)} \tag{16}$$

Sendo  $a_0$  o coeficiente de pressão à temperatura  $T_0$ ,  $\alpha$  a correção da velocidade de queima em função da temperatura  $T$ ,  $n$  o expoente de pressão,  $T$  a temperatura do bloco de propelente e  $T_0$  a temperatura de referência do bloco de propelente.

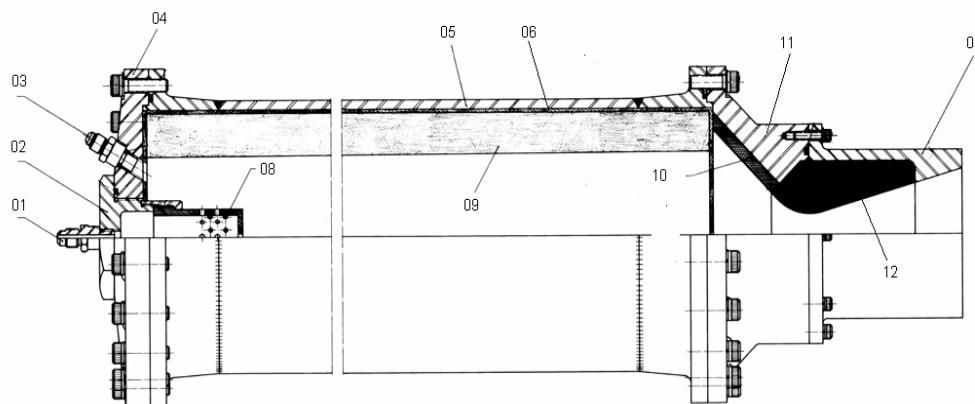
O parâmetro propulsivo de maior relevância relacionado ao desempenho do motor foguete é o impulso específico ( $I_{sp}$ ), que representa o impulso gerado pela combustão do propelente e expansão dos gases pela tubeira por unidade de massa de propelente ( $m_p$ ), que pode ser expresso a partir dos resultados de ensaio de queima mostrado na equação (17). Através das medições de empuxo foi determinada também a influência da temperatura do propelente no desempenho do foguete.

$$I_{sp} = \frac{\int F(t) \cdot dt}{m_p} \tag{17}$$

### 3. Arranjo experimental

A fim de compatibilizar interesses de realização dos ensaios, prazos e disponibilidade operacional (produção dos propelentes e ensaios associados), foi estabelecido um arranjo otimizado de forma a viabilizar este estudo.

A opção pelo motor teste (Fig. (1)) foi feita por ser economicamente viável e representativo das características balísticas dos motores em escala reais. Em seguida, observados os aspectos de segurança para manuseio dos propelentes, foram selecionadas três temperaturas de ensaios, compatíveis com a câmara térmica disponível. Foram estabelecidas também três pressões de câmara, representativas das pressões usuais de operação dos motores que utilizam estes tipos de propelentes. Desta maneira, foram utilizados nove motores testes para cada tipo de propelente, perfazendo um total de vinte e sete ensaios.



ITEM	DESCRIÇÃO	ITEM	DESCRIÇÃO
01	Tomada de pressão do Ignitor	07	Tubeira
02	Cabeçote do Ignitor	08	Cesto do ignitor
03	Tomada de pressão da câmara	09	Propelente
04	Tampa dianteira	10	Proteção térmica rígida.
05	Tubo motor	11	Tampa traseira
06	Proteção térmica flexível	12	Grafite

Figura 1. Motor teste.

O motor teste apresentado na Fig. (1) foi montado no Banco de Provas Horizontal de 100kN (BPH-100kN) adaptado e utilizado para ensaios de motores teste e instrumentação para aquisição de dados.

O motor teste é fixado num berço solidário a uma base, que por sua vez é ligada à estrutura do banco por intermédio de quatro lâminas metálicas que permitem movimento axial. Esta base é ainda conectada a um sistema, composto de cabo, polias e uma massa que permite aplicação de pré-tensão na célula de carga disposta ortogonalmente ao sistema e também ligada à estrutura do banco (Fig. (2)). Na extremidade oposta à da tubeira, é instalada uma estrutura metálica que tem por objetivo interligar o motor à célula de carga, provendo espaço entre eles para instalação do ignitor e saída das mangueiras, onde são instalados os transdutores de pressão. Adicionalmente existe um sistema que trava o conjunto, de forma a permitir a aplicação de esforços durante a instalação do motor e do ignitor, sem o risco de danificar as lâminas. Este sistema só é liberado no procedimento de ajuste da pré-tensão da célula de carga, realizado nos instantes finais que antecedem a ignição do motor.



Figura 2. Motor instalado no banco de ensaios.

Para a climatização dos motores, utilizou-se uma câmara térmica regulada para as temperaturas de 60°C e -40°C de forma a obter as temperaturas desejadas e adotadas como extremos da faixa de estudo. A variação de pressão na câmara foi obtida através de diferentes diâmetros de seção crítica na garganta da tubeira de acordo com o tipo de propelente utilizado, PC1, PC2 e PC3. As diferenças entre os três propelentes estudados são basicamente as seguintes: granulometria do oxidante sólido utilizado, percentual de alumínio e o percentual de resina (combustível) na mistura. O propelente PC3 é utilizado no motor S31 (primeiro estágio) e se enquadra na categoria dos “boosters”, pois é caracterizado por uma queima muito rápida, produzindo um efeito de catapulta no restante do veículo. O propelente PC1 é utilizado no motor S 30, constituindo o segundo estágio, e finalmente o propelente PC2 utilizado nos propulsores impulsores de rolamento (PIR). Ao todo foram realizados 27 ensaios para combinações de temperatura dos propelentes, diâmetro crítico e tipo de propelente, conforme apresenta a Tab. 1. Nessa tabela ainda são apresentados os resultados experimentais para a pressão média na câmara e para o tempo total de queima. A Fig. (3) mostra uma curva típica de pressão na câmara versus o tempo de ensaio, donde se extrai as informações para se obter o tempo de queima  $t_b$ .

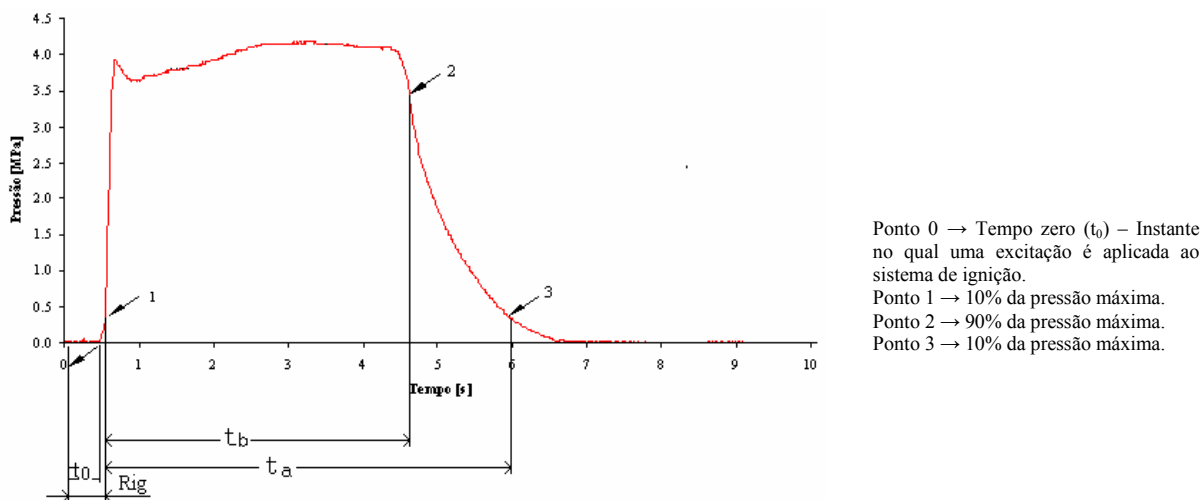


Figura 3. Resultado típico de pressão na câmara versus tempo de ensaio.



Tabela 1. Resumo dos ensaios realizados.

Propelente	Diâmetro da seção crítica (mm)	Temperatura do bloco propelente $T$ (K)	Pressão média $\bar{P}_c$ (MPa)	Tempo de queima $t_b$ (s)
PC1	21,00	233	4,22	3,94
	19,00	296	4,76	3,66
	17,00	333	5,12	3,48
	21,00	233	5,69	3,59
	19,00	296	6,24	3,25
	17,00	333	6,83	3,08
	21,00	233	7,46	3,32
	19,00	296	8,54	3,14
PC2	17,00	333	9,21	2,91
	21,00	231	3,25	4,41
	19,00	296	4,17	4,01
	17,00	333	4,70	3,60
	21,00	231	4,61	3,51
	19,00	296	5,86	3,17
	17,00	333	6,51	2,98
	21,00	231	6,37	3,17
PC3	19,00	296	8,07	2,93
	17,00	333	8,66	2,72
	29,00	233	3,76	2,39
	27,00	289	4,36	2,23
	25,00	333	4,91	1,98
	29,00	233	4,81	2,12
	27,00	289	5,50	1,90
	25,00	333	6,37	1,74
PC3	29,00	233	6,14	1,86
	27,00	289	7,24	1,71
	25,00	333	8,30	1,49

#### 4. Cálculo das leis de queima

A lei de queima para um propelente específico a uma dada temperatura, foi obtida utilizando o seguinte procedimento:

1. Três motores são ensaiados com diferentes diâmetros da seção crítica submetidos à mesma temperatura.
2. Das curvas obtidas, exemplificadas na Fig. (4), calculam-se o tempo de queima ( $t_b$ ) e a pressão média de câmara ( $\bar{P}_c$ ) através da equação (18).

$$\bar{P}_c = \frac{\int_0^{t_b} P_c dt}{t_b} \quad (18)$$

3. A espessura de queima ( $web$ ) é obtida diretamente do bloco de propelente.
4. Através da razão entre a espessura de queima e o tempo de queima extrai-se a velocidade de queima utilizando a equação (19).

$$r = \frac{web}{t_b} \quad (19)$$

5. A partir dos três pontos obtidos experimentalmente, gera-se o gráfico da velocidade de queima em função da pressão conforme mostrado nas Fig.'s. (5) a (7) e, a partir da linha de tendência, obtêm-se o expoente de pressão e o coeficiente de temperatura.

Através dos dados experimentais foram verificadas pequenas alterações no expoente de pressão  $n$ , que são decorrentes das incertezas das medições. Portanto, para determinação das “leis de queima corrigidas” para a faixa de temperatura em estudo, denotadas por  $r^C$ , foi utilizado o valor médio de  $n$ , denotado por  $\bar{n}$ , oriundo das leis de queima obtidas a partir de dados dos motores em escala reduzida ( $r^0$ ).

Em consequência, houve a necessidade de se corrigir o valor do coeficiente  $a$ , de forma a preservar o valor real da velocidade de queima ( $r^0$ ) original.

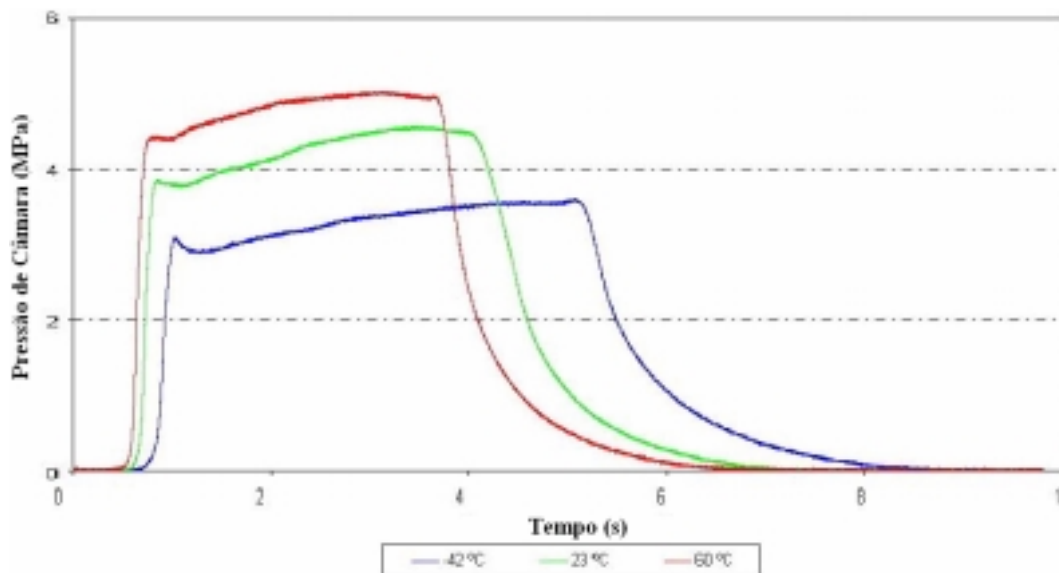


Figura 4. Comportamento da pressão de câmara em diferentes temperaturas para o propelente PC2.

Assim, a lei de queima e a sensibilidade térmica  $\pi_K$ , representativas da faixa de temperatura em estudo, foram obtidas da seguinte maneira:

1. Obtém-se o valor de  $\bar{n}$ , correspondente à faixa em estudo.
2. Atribui-se um valor de referência para  $P_C$ , denotado por  $P_{Cref}$ , e calcula-se as velocidades de queima, pela aplicação das leis de queima correspondentes aos extremos da faixa em estudo. Foi adotada como referência a pressão de 6 MPa por ser esta a pressão média de operação da maioria dos motores utilizados pelo IAE. Assim, a equação (20) passou a ser uma variação da equação (1) obtida a partir de dados do motor teste para a pressão de referência.

$$r^o = a \cdot P_{Cref}^{\bar{n}} \quad (20)$$

onde  $r^o$  é a lei de queima obtida a partir de dados de motores testes e  $P_{Cref}$  a pressão de câmara de referência.

3. Obtém-se o valor de  $\alpha$ , que é a razão das velocidades de queima da temperatura em estudo, através da equação (12).
4. Através da equação (16), calcula-se  $\pi_K$  correspondente à faixa de temperatura em estudo.
5. Estabelecem-se as novas leis de queima, denotadas  $r^C$ , correspondentes aos extremos da faixa em estudo, utilizando-se o valor de  $\bar{n}$  e calculando-se o novo valor de  $a$ , de maneira que a velocidade de queima obtida experimentalmente através da equação (20) fosse preservada.

Para verificação da influência da temperatura do propelente na sensibilidade térmica, este parâmetro foi calculado nas três faixas de temperatura.

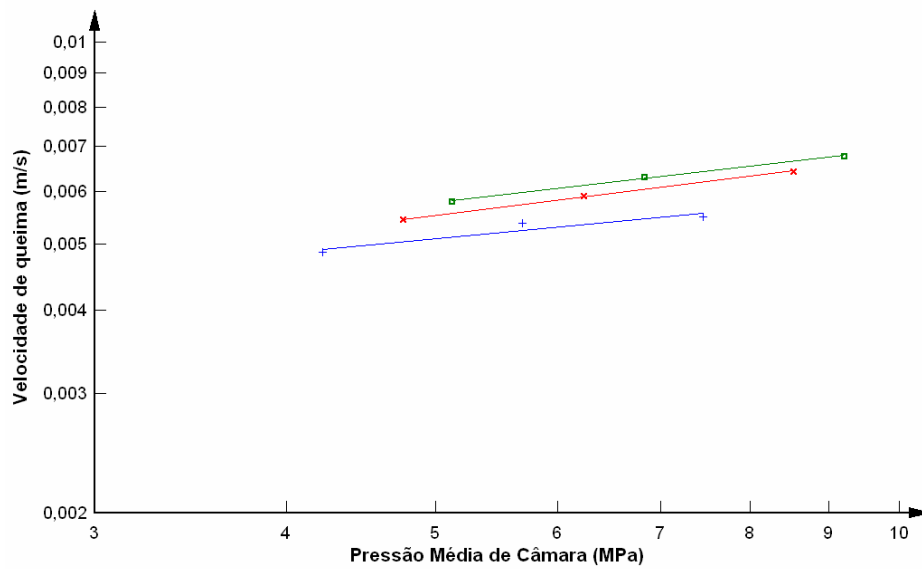


Figura 5. Influência da pressão e da temperatura de ensaio na velocidade de queima para o propelente PC1, sendo ■ T = 333K, X T = 296K e + T = 233K .

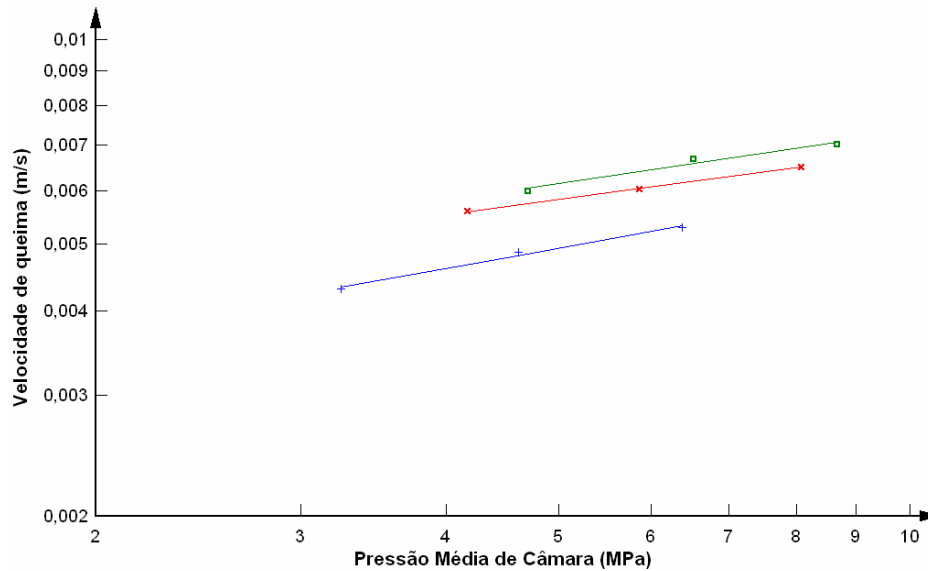


Figura 6. Influência da pressão e da temperatura de ensaio na velocidade de queima para o propelente PC2, sendo ■ T = 333K, X T = 296K e + T = 231K .

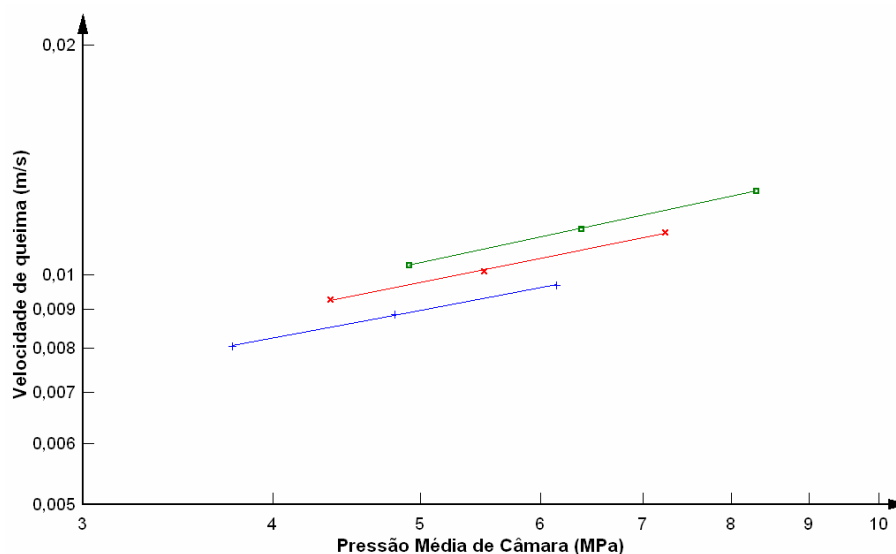


Figura 7. Influência da pressão e da temperatura de ensaio na velocidade de queima para o propelente PC3, sendo ■ T = 333K, X T = 289K e + T = 233K .

## 5. Resultados

São apresentadas a seguir as leis de queima obtidas com os dados dos vinte e sete ensaios em três diferentes temperaturas do bloco de propelente e a velocidade de queima para a pressão de câmara de 6 MPa para cada um dos propelentes. A partir das leis de queima e das equações apresentadas, são obtidos os valores das sensibilidades térmicas.

### PC1:

T = 333 K	$r^o = 0.003743 P_C^{0,2667}$	$r^o = 0.003743 \times 6^{0,2667}$	$r_{333K}^o = 6.0360 \times 10^{-3}$ m/s
T = 296 K	$r^o = 0.003469 P_C^{0,2867}$	$r^o = 0.003469 \times 6^{0,2867}$	$r_{296K}^o = 5.7983 \times 10^{-3}$ m/s
T = 233 K	$r^o = 0.003577 P_C^{0,2190}$	$r^o = 0.003577 \times 6^{0,2190}$	$r_{233K}^o = 5.2958 \times 10^{-3}$ m/s

### PC2:

T = 333 K	$r^o = 0.004033 P_C^{0,2595}$	$r^o = 0.004033 \times 6^{0,2595}$	$r_{333K}^o = 6.4203 \times 10^{-3}$ m/s
T = 296 K	$r^o = 0.004001 P_C^{0,2316}$	$r^o = 0.004001 \times 6^{0,2316}$	$r_{296K}^o = 6.0588 \times 10^{-3}$ m/s
T = 231 K	$r^o = 0.002956 P_C^{0,3169}$	$r^o = 0.002956 \times 6^{0,3169}$	$r_{231K}^o = 5.2156 \times 10^{-3}$ m/s

### PC3:

T = 333 K	$r^o = 0.005133 P_C^{0,4320}$	$r^o = 0.005133 \times 6^{0,4320}$	$r_{333K}^o = 11.131 \times 10^{-3}$ m/s
T = 289 K	$r^o = 0.005054 P_C^{0,4056}$	$r^o = 0.005054 \times 6^{0,4056}$	$r_{289K}^o = 10.453 \times 10^{-3}$ m/s
T = 233 K	$r^o = 0.004817 P_C^{0,3827}$	$r^o = 0.004817 \times 6^{0,3827}$	$r_{233K}^o = 9.563 \times 10^{-3}$ m/s

Foi observado, através dos resultados dos ensaios, diferença no retardo de acendimento dos motores para os diferentes níveis de temperatura do propelente, como mostrado na Tab. (2). Os valores do impulso específico e da velocidade característica do propelente foram também afetados, de onde se pode notar a influência da temperatura do bloco no tempo de queima, no retardo de ignição e na energia do propelente.

Tabela 2. Tabela comparativa da influência da temperatura do propelente nos parâmetros propulsivos.

Propelente	Pressão média $\bar{P}_c$ (MPa)	Temperatura do bloco, $T$ (K)	Impulso específico, $I_{sp}$ (s)	Velocidade característica $C^*$ (m/s)	Retardo de ignição, $R_{ig}$ (s)
PC1	4,22	233	208,7	1503,5	0,71
	4,76	296	215,3	1520,0	0,60
	5,12	333	220,5	1527,5	0,58
	5,69	233	216,9	1521,0	0,73
	6,24	296	222,3	1537,5	0,63
	6,83	333	228,6	1543,2	0,58
	7,46	233	222,6	1572,8	0,66
	8,54	296	231,5	1573,0	0,63
	9,21	333	233,6	1556,9	0,58
PC2	3,25	231	184,8	1387,2	0,83
	4,17	296	191,9	1406,6	0,67
	4,70	333	199,3	1437,7	0,59
	4,61	231	191,9	1409,4	0,73
	5,86	296	203,4	1448,8	0,59
	6,51	333	208,2	1452,3	0,57
	6,37	231	196,4	1428,3	0,63
	8,07	296	211,8	1489,1	0,49
	8,66	333	212,5	1478,1	0,52
PC3	3,76	233	218,2	1480,8	0,79
	4,36	289	225,0	1501,2	0,64
	4,91	333	227,6	1497,7	0,53
	4,81	233	224,0	1491,8	0,65
	5,50	289	229,4	1501,9	0,59
	6,37	333	232,5	1511,0	0,56
	6,14	233	230,6	1513,0	0,79
	7,24	289	233,2	1502,8	0,50
	8,30	333	237,9	1513,0	0,48

A partir das Fig.'s. (5), (6) e (7), foram obtidos os comportamentos da sensibilidade térmica dos três propelentes estudados, em função das diferentes faixas de temperatura, conforme Tab. (3).

Tabela 3. Tabela comparativa da sensibilidade térmica para diversas faixas de temperatura.

Propelente	Faixa de temperatura (K)	Sensibilidade térmica ( $10^{-3} K^{-1}$ )
PC1	233 a 333	1,73
	233 a 296	1,93
	296 a 333	1,50
PC2	231 a 333	2,86
	231 a 296	3,18
	296 a 333	2,08
PC3	233 a 333	2,57
	233 a 289	2,62
	289 a 333	2,46

## 6. Conclusões

Os dados obtidos dos vinte e sete ensaios realizados tiveram comportamento que permitiu a obtenção dos valores da sensibilidade térmica dos propelentes escolhidos de maneira adequada. As dispersões verificadas no expoente de pressão da lei de queima e no retardo de ignição estão associadas à natureza do propelente e também às incertezas das medições.

As diferenças verificadas nos valores das sensibilidades térmicas dos três propelentes estudados estão relacionadas com suas composições químicas e com as características físicas. As diferenças entre os três propelentes estudados são basicamente as seguintes: granulometria do oxidante sólido utilizado, percentual de alumínio, e percentual de resina (combustível) na mistura.

A metodologia adotada para determinação da sensibilidade térmica mostrou-se eficiente, sendo que os extremos das faixas de temperatura podem ser ainda ampliados e também acrescentadas temperaturas intermediárias com o objetivo de melhorar a visualização da tendência verificada de redução no valor da sensibilidade térmica para as faixas mais elevadas de temperatura.

Analisando as características energéticas dos motores ensaiados mostrados em Tab.s. (2) e (3), foi possível verificar a tendência de aumento do impulso específico com a temperatura, maior do que o justificado pelo aumento da pressão de câmara, de forma a indicar uma possível influência da temperatura no impulso específico. Neste caso sugere-se também um estudo experimental mais específico para sua comprovação.

## 6. Referências

- Barrère, M. (1960). "Rocket propulsion". Elsevier, 1960, 829 p.
- Cohen, N. S.; Flanigan, D. A (1985). Mechanisms and models of solid-propellant burn rate sensitivity: a review. "AIAA Journal", v.23, n.10, p. 1538-1547, out.
- Corrêa, W. S. (2005), "Estudo da sensibilidade térmica dos propelentes sólidos compósitos do tipo HTPB/AP/Al". 115 p. Dissertação de Mestrado – ITA, São José dos Campos.
- Gaunce, M. T.; Osborn J. R. (1986). Temperature sensitivity coefficients of solid propellant burning rate. "Acta Astronautica", v.13, n. 3, p. 127-130, mar.
- Hamke, R. E; Gaunce, M. T.; Osborn J. R. (1987) The effect of pressure exponent on temperature sensitivity. "Acta Astronautica", v.15, n. 6/7, p. 377-382, jun./jul.
- Kishore, K; Sridhara, K (1986). Effect of temperature on the burning rate of solid propellants: a review. "Journal of Propulsion and Power", v.2, n. 3, p. 192-194, mai./jun..
- Sutton, G. P. (1992), "Rocket propulsion elements: an introduction to the engineering of rockets". 6.ed. New York: John Wiley & Sons, pp.365-414.

## EXPERIMENTAL DETERMINATION OF THERMAL SENSIBILITY OF HTPB/AP/AL PROPELLANTS

**William Stanisce Corrêa**

Instituto de Aeronáutica e Espaço – IAE, São José dos Campos, Brasil  
william@iae.cta.br

**Wilson Kiyoshi Shimote**

Instituto de Aeronáutica e Espaço – IAE, São José dos Campos, Brasil  
wilson@iae.cta.br

**Rodrigo Roversi Rapozo**

Instituto de Aeronáutica e Espaço – IAE, São José dos Campos, Brasil  
rapozo@iae.cta.br

**Pedro Teixeira Lacava**

Instituto Tecnológico de Aeronáutica – ITA, São José dos Campos, Brasil  
placava@ita.br

**Abstract.** *The knowledge of the thermal sensitivity of the propellants is fundamental for the calculation of the rocket engines propulsive parameters. As found in the literature, the initial temperature of the propellant grain has a considerable influence on the burning rate of these engines. Differences in the burning rate due the change of propellant initial temperature grain result in alterations in the operation time and in the chamber pressure level, and it might affect the rocket performance. The present work shows a methodology for obtaining the thermal sensitivity of the propellants PC1, PC2 and PC3, used in the survey rocket VSB-30, which consists the burning of small scale engines, with the propellant grain at several temperatures. The results obtained for this parameter allow the prediction of the engine performance with high precision, and in different operation conditions, to estimate the burning rates.*

**Keywords:** *thermal sensibility, solid propellants, HTPB/AP/AL propellants, rocket engine.*

## OBSERVATION OF PARTICLE FLOW AND DEPOSITION IN INDUSTRIAL BOILERS

**João Luis Toste de Azevedo**

Instituto Superior Técnico, Av. Rovisco Pais, 1049-001 Lisboa, Portugal.

[toste@ist.utl.pt](mailto:toste@ist.utl.pt)

**Paulo Miguel Marques Fontes**

Escola Superior de Tecnologia de Setúbal, Instituto Politécnico de Setúbal, Estefanilha, 2914-508 Setúbal, Portugal.

[pfontes@est.ips.pt](mailto:pfontes@est.ips.pt)

***Abstract.** The present paper presents results from the flow observation within industrial furnaces obtained using a CCD camera installed in a cooled probe. Results are also presented of the visualisation of deposits in heat exchanger tubes for a black liquor recovery boiler. The results of the observation allowed a characterisation of the area of superheaters in high, medium and low slagging potential. A deposition probe was also used to measure the rate of particle entrainment in both sides of the furnace and these are compared with results from a CFD based numerical model showing qualitative agreement. Results are also presented obtained in a pulverised coal fired furnace. In this case the probes had to be miniaturised and the initial results showed the decrease of the heat flux due to the deposits. Some deposits were also collected for further analysis in an electronic microscope.*

*Key words:* Particulate matter; Industrial furnaces; Experimental methods

### 1. Introduction

The measurement of particle deposition in tubes is difficult in an industrial environment. The instrumentation of water tubes (e.g. Valero and Cortés, 1996) is one of the most common methods to evaluate the influence of deposits on heat transfer to observe its change along time. Several probes have been developed to measure either the incident and/or absorbed heat flux. This information is valuable to plant operations once they have to program the use of soot blowers. The development of probes for measurements in test furnaces (e.g. Baxter, 2000) on the other extreme are used to characterise the formation of the deposits in well controlled conditions and include the measurement of heat flux, thickness of the deposits and the surface temperature by optical principles. These techniques however are difficult or impossible to transfer to probes to use in industrial environment. The visualisation of the deposits directly is another technique that can be applied and usually is based on infrared detectors using proper filters to avoid the radiation from the flames and particles entrained.

The present paper presents several simple probes that have been used with a reasonable success to characterise the formation of deposits in two well-characterised industrial furnaces. One is a black liquor recovery boiler with a thermal capacity of 270 ton/h of steam at  $P = 64$  bar,  $T = 460$  °C, where measurements for the gas composition and temperature were performed in a horizontal plane across the furnace for two different modes of operation corresponding to a rotational or interlaced flow pattern of the secondary air (Fontes et al, 2005). The other furnace considered is pulverised fired from a 315 MWe capacity boiler. This furnace has been characterised with the use of rectangular ports in the front wall and with boosted air in swirled circular ports for overfire air (see respectively Costa et al 2003 and 2006).

The objective of the work carried out is the characterization of the particulate matter flow in the furnace and its consequences for particle deposition. In the next session the probes developed are described. Section 3 presents the general characteristics of the boiler furnaces. The collection of images inside the furnaces is reported in section 4 and the result of particle deposition is presented in section 5. Section 6 presents the main conclusions and discusses the potential for the use of the probes presented.

### 2. Probes developed

Two types of probes were developed, one to use a normal CCD camera within the furnace and the other to allow for the collection of deposits in the probe and to evaluate the rate of heat transfer.

#### 2.1. Probe for visualization

The objective of the development of the probe for visualization is to allow for an effective cooling of the CCD sensor. Further a light source had to be included in the probe to visualize the deposits in the upper part of the recovery boiler furnace and when the probe was used during a stop period for tube inspection. In the recovery boiler, the ports for inspection are rectangular and the probe was built based on boxes with two tubes, one to feed cooling water and other with compressed air for cooling and to connect the camera cables to a portable computer.



Figure 1 shows photographs from the three probes used for the recovery boiler. The middle one (B) without any light source was used during furnace operation in the lower areas, the first (A) for the upper areas and the third (C) during boiler stops to inspect the tubes. Camera C was cooled exclusively by compressed air.

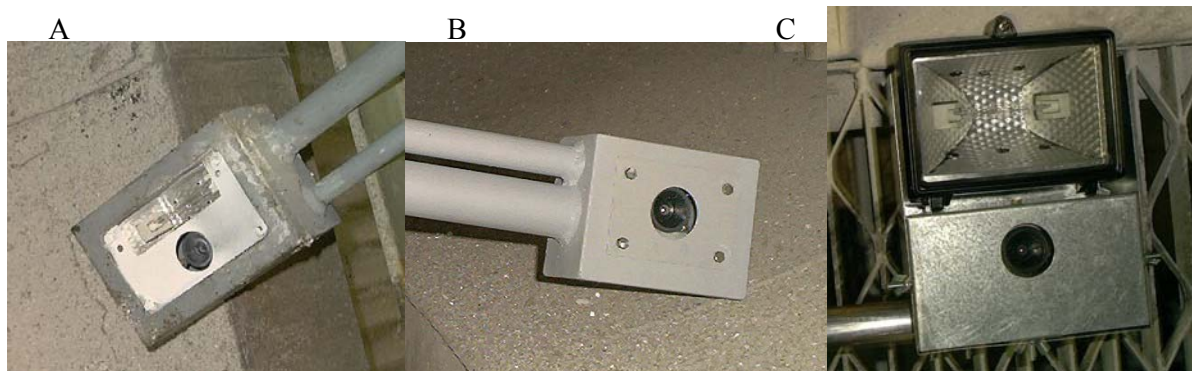


Figure 1 – Photograph of the three cameras developed for the recovery furnace.

In the case of the pulverised coal furnace the ports available for inspection have three inch diameter so a general water cooled probe was built with 70 mm diameter with the possibility to assemble two heads, one for the CCD and other for particle deposition. Figure 2 presents a sketch of the probe tip and a photograph of the probe head.

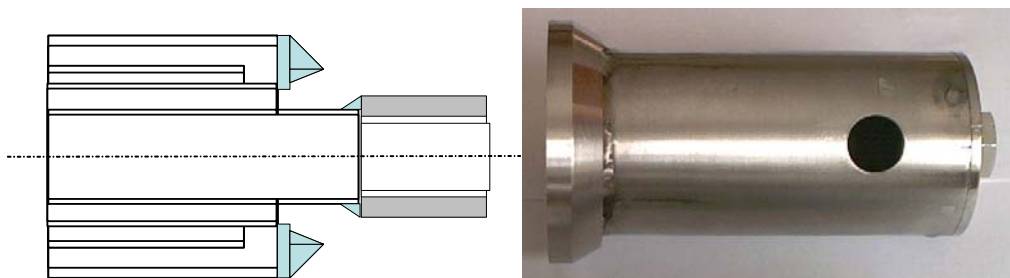


Figure 2 – Sketch of the probe and the probe head with the hole for the CCD camera.

### 2.1. Probe for deposition

For the recovery boiler furnace the objective was the measurement of the particle entrainment so a rectangular probe was prepared with air cooling as it is presented in figure 3. The probe has a sampling plate with 15x8 cm that can be easily removed from the probe to measure the mass collected. The probe head for the pulverised coal furnace as mentioned was mounted in the same probe shown in figure 2. In this case the head is a closed volume as presented in figure 3 where the location of thermocouples are indicated to measure the wall temperature, the inlet and outlet cooling air temperature and a further thermocouple was used to measure the gas temperature.

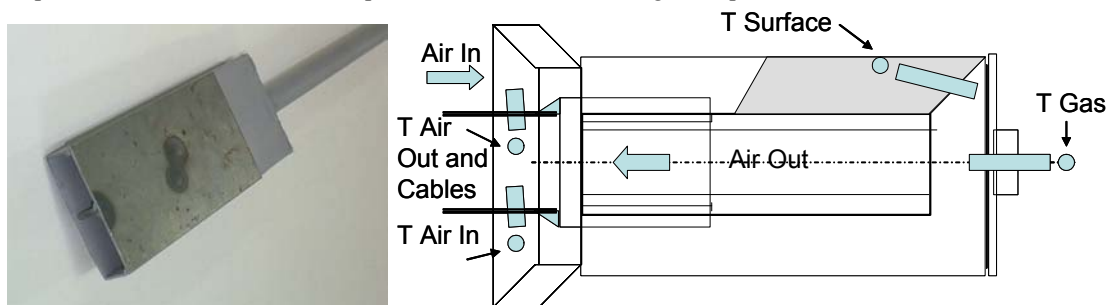


Figure 3 – Photograph of the deposition plate and scheme of the deposition probe head.

### 3. Furnaces analysed

This section presents briefly the configuration of the furnaces considered in the study so the reader may identify the locations of the visualisation and measurements presented later in the paper. The recovery boiler furnace has a cross section of 9.73mx10.31m and a total height of 41.44 m. The combustion air is supplied at four levels: 1.05m for the primary air, 2,35 and 3,1 for secondary air and at 8.85m for tertiary air, while the black liquor is fed at 5.85m. All are

distributed by the four sides of the furnace and the regulation of the flow in the secondary air ports allows the creation of different flow patterns in the furnace, namely a rotational and an interlaced mode.

The observations were made only at the upper part of the furnace close to the super-heaters that start at 27m in level m. There are four super-heaters from left to right in the direction of the gas flow named IA; III; II; IB. The steam is generated in the membrane walls, and the screen and convective evaporator. The screen has also the purpose of protecting the super-heaters. The first sketch in figure 4 shows the upper part of the recovery furnace where the super-heaters are located. Access is possible through the rectangular ports between the heat exchangers.

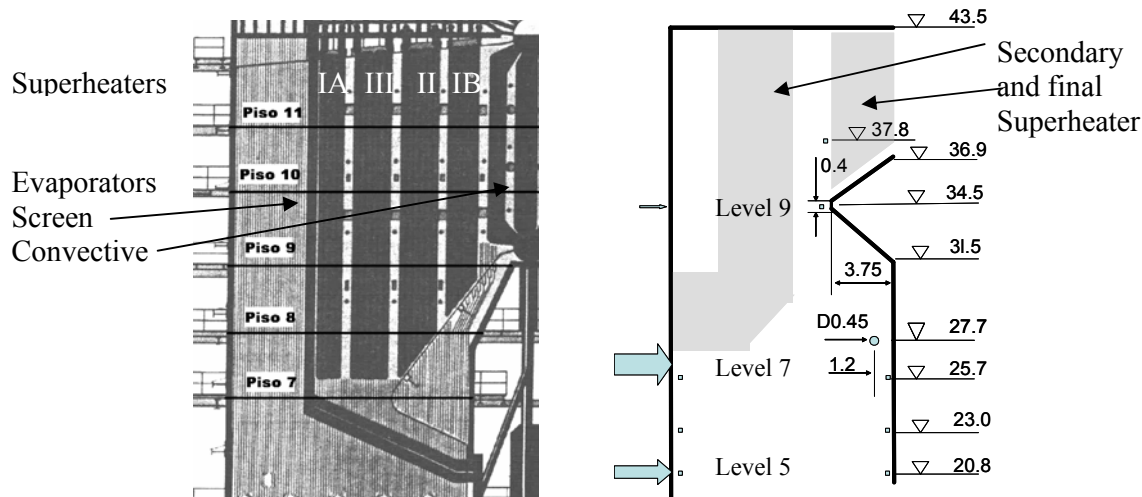


Figure 4 – Schematic representation of the upper part of the furnaces from i) heat recover and ii) pulverised coal.

The pulverised coal furnace cross section is 11.43x15m and the total height is 43.5 m. The burners are located in five rows of four burners in the front wall (from 10.4 m to 10.8 m) and the flow patterns is characterised by a deflection around the burner level 3 upwards in the furnace close to the back wall. The furnace is equipped with staged air supply at level 7 at 25.7 m and then the gases are deflected towards the furnace exit.

The second sketch in figure 4 shows the upper part of the pulverised coal furnace. There are five secondary super-heaters platens and are inspection ports distributed in the front wall to observe them. The other ports are located at the side walls close to the front and back wall. At level 3 and 5 corresponding to the middle and upper row of burners there is also inspection ports at the back wall enabling the observation of the probe inserted into the furnace from the side wall.

#### 4. Visualisation studies

Figure 4 presents a sample of images collected from the entrance of the third super-heater at different levels and using different cameras. As it can be seen the image is more clear for camera C during a stop and during operation camera A provided also reasonable visual information. The image from camera B used in regions of higher temperature was in general poorer due to the interference of hot gases flowing close to the camera.



Figure 5 – Deposits in tubes from superheater III  
a) Level 10 (Camera A); b) Level 7 (Camera B); Level 11 (Camera C)

From a large collection of images a qualitative evaluation of the effects of slagging in the tubes was elaborated as presented in figure 6. This type of information can be used to operate the soot blowing system selectively.

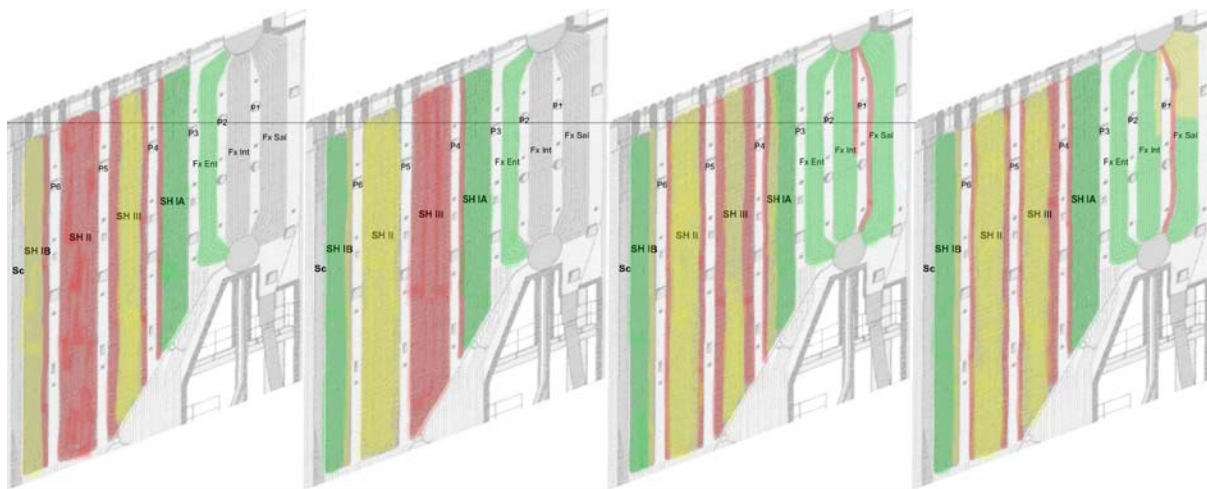


Figure 6 – Classification of severity of slugging in heat exchanger tubes.

The cooling of the CCD camera in the pulverised coal furnace was performed exclusively with compressed air and no damage was observed in the electronic board of the camera. The plastics holding the lenses however were affected during the utilization and therefore the lifetime was limited. The images obtained in the furnace with high air staging were performed in a region with temperatures between 800 and 1000°C. Figure 7 presents an example of the lower part of the secondary super-heater where the irregular shape of the deposits can be seen and an example of deposits at the tube wall. The tube walls are not prone to heavy slugging so there is little interest in these images. The most interesting region of the furnace to be observed is the entrance of the final super-heater section where temperatures are up to 1200°C, but no images could be collected due to the overheating of the probe. An improved version with the probe head water cooled is required to access that area.



Figure 7 – Visualization of i) secondary superheater and ii) boiler wall tube.

## 5. Deposition studies

The deposition probe in the recovery furnace was used to access the rate of particles flow in the two sides of the furnace under different operating conditions. The probe was polished before performing each test. Each test consisted in introducing the plate facing down to the main flow direction and letting it exposed during a fixed time period. After removing the plate from the furnace, the rate of compressed air was increased to produce a fast cooling and avoid further reactions. Then the plate was dismantled and stored in a plastic bag for weighting the collected particles. A mass flux was then calculated simply dividing the mass by the area of the plate and by the exposure time.

Of course some particles deviate from the plate and there will be some re-entrainment but the objective was the comparison of the behaviour in the two sides of the furnace. The particulate matter present in the recovery boiler is a mixture of carbonaceous burning particles and drops formed from the condensation of sodium and potassium vapours. The time for each measurement was a subject of investigation. If this time is too short the errors due to the time to insert and to remove the probe and the small mass of the deposit become more important. On the other hand for large exposition times, the deposits in the surface of the plate may melt and in this case the mass may be partially lost.

Measurements were performed at level 7 (27.6 m) at a distance of 1 m from the front wall. The mass deposited in the plate could be reproduced within 10% when repetitions were done. Figure 8 shows three sets of results from the mass collected in plates in four tests performed in sequence with different time exposures. From this figure it can be observed that the rate of deposition increases initially and then decreases. Plotting the values in terms of rate of deposition allows the observation that the maximum was observed for an exposure time of 3 minutes and thus this was selected for further tests. Measurements were performed in both sides of the furnace for five cases, two in the rotational

mode and three with interlaced distribution of secondary air. A summary of the results is presented in table 1, including the black liquor flow rate observed for each case.

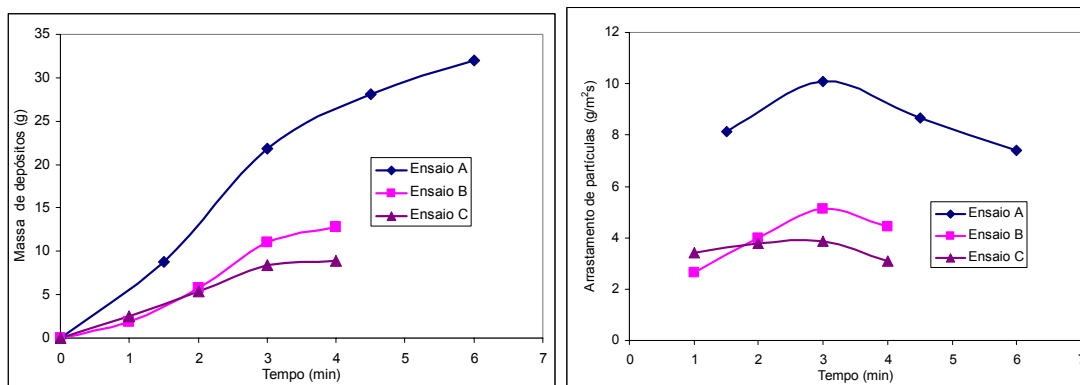


Figure 8 – Mass deposited and rate of deposition in the probe as a function of time.

Table 1 – Rate of particle entrainment captured by the probe. (Values in g/m<sup>2</sup>s).

Case Number	Rotational		Interlaced		
	14	15	16	17	18
Rate particle deposition Left side (North) (g/m <sup>2</sup> s)	10.86	9.69	2.92	8.15	4.77
Rate particle deposition Right side (South) (g/m <sup>2</sup> s)	4.31	4.23	4.81	10.96	8.35
Black liquor flow rate (ton/h)	27.2	26.8	22.0	26.6	25.1

From the table it can be observed that in general the interlaced mode leads to a better balance between both sides of the furnace while in the rotational mode the contribution is higher in the left side. The values depend on many factors including the black liquor flow rate that has a clear influence in the values observed in case 16. CFD based calculations were carried out where particle trajectories were evaluated (Fontes et al, 2005). The interlaced mode led to higher rate of particle entrainment but is more distributed than in the rotational mode as observed. The calculated values for case 14 were 4.14 in the left side and 1.46 in the right side while for case 17 the values were 3.51 and 3.93. Despite the calculated values are less than half the measured ones a good qualitative agreement can be observed which allows the conclusion that in general the rotational mode leads to a lower rate of entrainment but with higher impact in the left side of the boiler (north) as was observed from the visualisation study (See figure 6).

The tube deposition probe was used in two pulverised coal fired furnaces from the Sines power station. The first campaign was performed in unit IV to test the probe and the second in unit I after improving the assemblage. The thermocouples for the measurement of the air temperature in the first version were fixed with cement to the tubes: Inlet in the water cooled part and outlet in the tip of the probe head. The cable for the inlet air temperature had to go through the central tube and back to the location of the air inlet. In the second version the thermocouples were installed in four hole ceramic supports that were mounted in holes as indicated in figure 3. In this case all the cables went through the central tube making the assembling and robustness better. The thermocouple for gas temperature was successfully installed in the first version but the readings were found to be in general lower than measured with a dedicated probe probably due to the plane surface behind, so the reading from this thermocouple was not so relevant. In the second campaign also a thermocouple was located close to the internal surface of the probe head wall to monitor temperature.

Figure 9 shows two typical graphical evolutions of the inlet and outlet air temperature. The graph from the first version in unit IV, presents also the gas temperature while for the second version the wall temperature is also presented. The measurements made from the front wall of the furnace where temperatures are around 800-850°C and there is lower flow intensity no deposits were observed for different periods of exposition. In this case the temperature difference between the inlet and outlet air temperature remained approximately constant. On the other end for tests made in the ports from the side wall in levels 9, 5 and 3 deposits were formed in the probe and some were collected as shown in figure 10. In the levels of the burners (5 and 3) there are ports also in the back wall that allowed the observation of the build up of 2-5 cm deposits that could not be taken out from the furnace due to the small size of the ports. The second

graph in figure 9 shows a decrease in the surface temperature and in parallel a decrease of the outlet air temperature which can be attributed to the decrease of heat extraction by the probe head as a consequence of deposit build up.

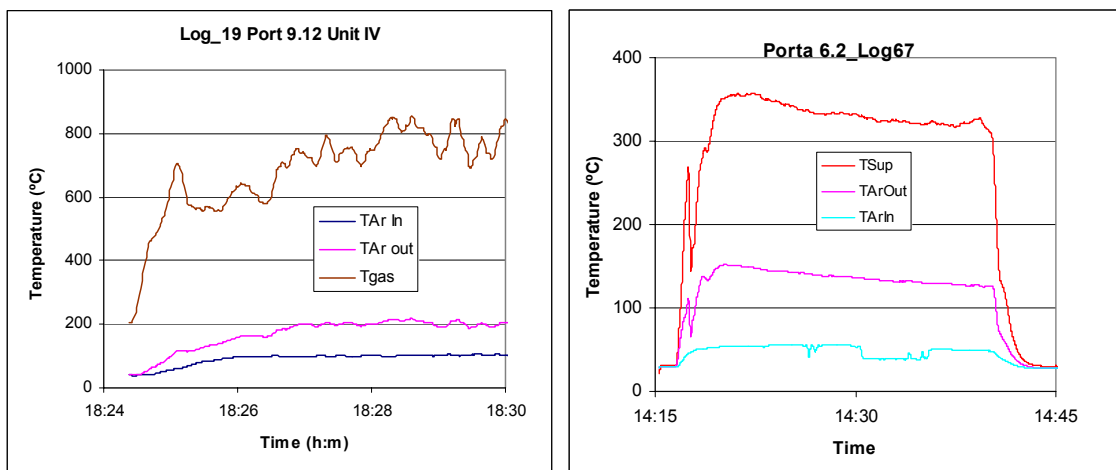


Figure 9 – Temperature evolution in the deposition probe. a) First and b) second versions.



Figure 10 – Photograph of the probe after exposure in the furnace and collected deposits.

Table 2 presents a summary of results from the measurements with the deposition probe, namely the measured temperatures and the calculated heat flux. This value was calculated based on the measured air flow rate and the side area of the tube head. The calculated values are in the expected range once incident radiation may contribute with values in the order of 300 kW/m<sup>2</sup> and the convection contribution may become important for the tests close to the back wall where the flow is higher. In most cases a decrease of the heat flux was observed within 10 to 20 minutes. The higher decreases were observed for the higher surface temperature as a consequence of an easier adhesion on the probe surface. The inlet air temperature was stable in all the period and with a lower value than observed in the first version of the probe showing that in that case the thermocouple must have been displaced. The values in table show also in general that when the probe is further inserted in the furnace leads to higher surface temperature and heat fluxes.

**Table 2** – Measured values with the tube deposition probe and calculated heat fluxes in unit I.

Case	48	50	53	54	58	67	68	70	71	73
Port	9.1	9.1	9.1	9E	9E	6.2	6.2	5.2	5.2	3.2
Distance (m)	0.5	1	1	0.5	0.5	1.5	1.5	0.5	1.5	1.5
Temp. Air Inlet (°C)	49	43	47	47	55	52	48	43	55	55
Temp. Air Out Initial (°C)	135	136	175	148	290	151	200	157	280	167
Temp. Air Out Final (°C)		122		176	260	125	165	130	140	
Time of exposure (min)	1	13	1	14	20	20	22	15	4	15
Temp. Surface Initial (°C)	307	280	550	370	430	355	460	380	625	
Temp. Surface Initial (°C)		300		295	420	320	460	380	433	
Heat flux Initial (kW/m <sup>2</sup> )	228	320	282	372	581	604	629	490	1020	445
Heat flux Final (kW/m <sup>2</sup> )		282		466	511	465	484	374	426	

## 5. Conclusions

The use of a common CCD camera is valuable to reveal information from deposits within boiler furnaces. The collection of images during furnace operation in high temperature areas suffers from interference of the flowing gases. However for cooler areas the images are good if appropriate illumination is provided. The images collected during boiler stops are very good and this probe can be used without cooling water.

The use of a plate to evaluate the rate of particle entrainment was shown to give good qualitative results allowing for the comparison of different firing configurations. The use of a tube deposition probe permitted the collection of deposits samples and showed the influence of operation conditions (gas and surface temperature) on the deposition rate.

## 6. Acknowledgement

This work was carried out as part of the project POCTI/EME/47900/2002 from FCT (Fundação Ciência e Tecnologia) de Portugal with the title *Análise da Deposição de Partículas em Caldeiras*. Thanks are due to the staff from the Setúbal pulp factory and Sines power plant that enabled the access to the industrial sites.

## 7. References

- Valero, A. and Cortés, C., 1996, "Ash fouling in coal-fired utility boilers. Monitoring and optimisation of on-load cleaning", *Prog. Energy Combust. Sci.*, vol. 22, pp. 189–200.
- Baxter, L.L., 2000, "Ash deposit formation and deposited properties – A comprehensive summary of research conducted at Sandia's combustion research facility", SANDIA Report, SAND2000-8253.
- Fontes, P., Costa, M. and Azevedo, J.L.T., 2005, "Modelling of a Black Liquor Recovery Boiler and Comparison with Detailed Experimental Data", 8<sup>th</sup> Int. Conf. on Energy for a Clean Environment, Lisboa, 27-30 June.
- Costa M, Silva P and Azevedo JLT, 2003, "Measurements of gas species, temperature, and char burnout in a low-NOx pulverized-coal-fired utility boiler", *Combustion Science and Technology*, 175 (2): 271-289.
- Costa, M., Cassiano, J. and Azevedo, J.L.T., 2006, "Experimental characterization of a full scale pulverised coal fired furnace with air staging", 7<sup>th</sup> European Conference on Industrial Furnaces and Boilers, Porto, 18-21 April.

# GESTÃO TECNOLÓGICA: UMA ABORDAGEM SOBRE DESENVOLVIMENTO DA COMBUSTÃO INDUSTRIAL SEGUNDO A REALIDADE BRASILEIRA

**Edson José Joaquim de Souza**

Petrobras SIX, rod. BR 476, Km 143, São Mateus do Sul-PR,  
edsouza@petrobras.com.br

**Cristiane Lodi,**

Petrobras Gás & Energia-MC/Tecnologia para Desenvolvimento do Mercado, Av. República do Chile, 500- 22 andar  
cristianelodi@petrobras.com.br

**Resumo** – A atividade de combustão industrial no Brasil sempre guardou peculiaridades em relação a outros países, tanto os chamados desenvolvidos quanto os de nível de desenvolvimento industrial similar. Particularmente nas décadas de 80 e 90 fatores como a alternância das taxas de crescimento, a demanda pelo controle de emissões atmosféricas e principalmente a entrada do gás natural na matriz energética contribuíram para uma realidade tecnológica diferenciada na área de combustão. As necessidades atuais demandam soluções tecnológicas bastante diversas que vão desde a aplicação de conceitos básicos de combustão até soluções altamente especializadas, muitas vezes carentes de conhecimento a conquistar. As diretrizes para a classificação, priorização e investimento em programas de P&D devem considerar tais peculiaridades. O atual estágio do conhecimento acadêmico brasileiro na área de combustão, institutos de pesquisa e empresas, permite atender as necessidades tecnológicas do país nessa área, inclusive com espaço à inovação. O desafio, contudo é concatenar os atores dentro de uma política consistente de gestão, pluralizar o conhecimento corrente e acelerar o desenvolvimento tecnológico em combustão industrial. Este trabalho aborda critérios para a gestão do conhecimento, prospecção e investimento em programas de P&D na área de combustão industrial, efetivamente mais sintonizado com a realidade da indústria brasileira.

**Abstract-** Combustion sciences in the Brazilian industry have always had important difference of other developed and developing countries. Over the last twenty years the dangling economical growing tax, new emission control demands and the harder presence of natural gas in the Brazilian energy matrix have led to an uncommon technology pattern in industrial combustion. Nowadays the Brazilian industry, which deals with combustion in boilers, furnaces and heating demand non-conventional solutions. Some problems may be easily solved by the application of combustion fundamentals and thermodynamic principles; others yet really need an updated approach and high tech solutions – some of them based upon upcoming knowledge. Any managing approach for classifying and ranking research and development projects must consider such differences. The actual Brazilian knowledge in combustion sciences allows fitted solutions to almost all industry needs and also opportunities for innovation. However the main challenge is to join and keep all players and drivers under the same target, spreading the available knowledge in order to reduce the technology gap and promoting the development in combustion sciences. This paper presents a set of guidelines for knowledge managing, prospecting and investment in R&D programs in the field of industrial combustion in Brazil.

*Palavras-Chave: combustão, programas de P&D, indústria brasileira.*

*Keywords: combustion, R&D programs, Brazilian industry.*

## 1. Introdução

Os segmentos da indústria brasileira que empregam processos de conversão de combustíveis apresentam um persistente contraste tecnológico que prejudica o seu desenvolvimento e competitividade internacional. Por um lado existem empresas que se mantém tecnologicamente atualizadas, lançando mão de tecnologias de ponta em processos de queima de combustíveis. A ambiência criada por essas organizações permite o acesso a tecnologias avançadas em combustão e proporciona um nivelamento com concorrentes internacionais dentro de uma vanguarda tecnológica em combustão industrial (Leuckel,2002). Atualmente essas indústrias têm necessidades mais específicas que demandam soluções baseadas em conhecimento recentemente conquistado ou ainda a conquistar.

Outros segmentos, por sua vez, empregam tecnologia desatualizada, até mesmo obsoleta em combustão com conseqüente desperdício de energia e altos níveis de emissões. São atividades que muitas vezes poderiam ser melhoradas com o emprego de conceitos básicos de termodinâmica, de controle de queima ou mesmo o manuseio adequado de combustíveis. A realidade brasileira mostra que essas empresas, em sua maioria de pequeno e médio porte, demandam soluções simples que envolvem conceitos básicos, simplesmente abordados em cursos de graduação de engenharia. Essa realidade está ainda presente, apesar dos heróicos esforços de entidades dedicadas à pequena e média indústria.

A solução para o atendimento desse universo de demandas tecnológicas, independente do porte ou segmento do usuário final, é desafiadora e peculiar. Embora aparentemente óbvia, a forma de gestão dos recursos para investimento em P&D no Brasil deve necessariamente ser diferente dos métodos internacionalmente conhecidos. A escassez de recursos para investimento, a busca da pluralização e permeação de conhecimentos adquiridos e o incentivo a investigação científica são apenas alguns dos elementos envolvidos.

Falar em Pesquisa e Desenvolvimento na área de combustão industrial significa desenvolver ações no curto, médio e longo prazo, atrelando conhecimentos adquiridos, disponíveis hoje na academia, conhecimentos em processo de aquisição e consolidação e finalmente a inovação tecnológica propriamente dita.

Nesse contexto, os principais atores dessa rede para uma gestão consistente são: a academia, o usuário final, o empreendedor e, indispensavelmente, o gestor da política de P&D. A ausência de quaisquer deles, em especial dentro do modelo capitalista vigente, deixa a rede deficiente com grande chance ao insucesso.

## 2. A Combustão Industrial no Brasil

A Revolução Industrial, um dos principais marcos da história da conversão de combustíveis, foi marcada pela substituição da manufatura artesanal pela produção seriada e mecanizada. Teve início nos primeiros anos do século XVIII com Savery, Papin e Newcomen que ao buscarem soluções para o bombeamento de água potável inventaram o “motor” de bombeamento. Era o começo de uma saga de criações, culminando em 1784 com a máquina a vapor de J. Watt, materialização maravilhosa das então consolidadas relações termodinâmicas. Além de teares mecanizados, a máquina a vapor abriu múltiplas possibilidades de uso devido a sua revolucionária forma de geração de energia motriz. O princípio de funcionamento da máquina de Watt reinou soberano até a invenção da turbina a vapor no século XX, fato também importante que consolidou completamente a conversão de combustíveis para a geração de calor e movimento.

A história da combustão sempre teve estreita relação com a dos combustíveis. Ao longo dos séculos XVIII e XIX os combustíveis mais utilizados em atividades de produção eram a biomassa, principalmente a lenha e gordura animal como óleo de baleia, de peixe e suínos. A demanda por energéticos mais fortes deu espaço ao carvão mineral, popularmente usado na Inglaterra e norte da Europa (Andrews, 2005). Posteriormente a atividade de combustão no mundo seria fortalecida pela franca utilização de derivados de petróleo, inicialmente para iluminação de grandes centros no final do século XIX e início do século XX. A popularização ocorreu com a chegada dos motores de combustão interna, dando início à era do automóvel. Nessa época, chegavam à Europa e à América do Norte os primeiros conceitos sobre produtividade e competitividade industriais. O principal avanço científico, entretanto, era a diferenciação entre a deflagração e a detonação na reação de combustão, proposta por Chapman e Jouguet em 1900 (Andrews, 2005).

A combustão industrial no Brasil deu seus primeiros passos com a industrialização do sudeste, iniciada no final do século XIX. Nessa época o uso da lenha era ainda bastante freqüente. Se na Europa as primeiras fornalhas eram baseadas emlareiras de arrefecimento doméstico contra as baixas temperaturas, no Brasil tornaram-se uma mera escalada dimensional de fornos de cocção, de conformação de metais e alambiques de fazendas de cana de açúcar.

Na Europa e América do Norte, contudo, a atividade tomava um caminho diferente. Durante a primeira grande guerra e o período de reconstrução da Europa na década de 20 surgiu a ambiência necessária ao extraordinário desenvolvimento industrial norte-americano. A crescente demanda por energia indicou o uso de combustíveis de maior poder calorífico, consolidando o uso de combustíveis fósseis. Iniciava-se a sociedade do combustível.

A indústria petrolífera demandou forte desenvolvimento das ciências da combustão. Originalmente, a popularização indiscriminada do uso de caldeiras e fornos de destilação de petróleo levou a muitos acidentes envolvendo explosões de fornalhas. Grandes perdas de equipamentos e, sobretudo, vidas humanas foram registradas nessa fase. Sabia-se pouco sobre o controle e a estabilidade de chama em um queimador industrial, notórios responsáveis por grandes explosões. Outro fato marcante decorrente de tais acidentes foi o estabelecimento de códigos de projeto para caldeiras e vasos de pressão pela Sociedade Americana de Engenheiros Mecânicos, o ASME.

O curso das atividades de pesquisa e desenvolvimento em combustão só foi alterado com a escassez de energéticos durante a segunda grande guerra. Os países envolvidos trabalharam nos principais conceitos de conservação de energia, pouco presentes na indústria até então. Esses conceitos seriam nova e fortemente utilizados mais tarde com a crise do petróleo na década de 70.

Finalmente o grande elemento motivador das pesquisas nessa área nos anos 80 e 90 foi o controle de emissões poluentes oriundas da combustão. Embora a relação entre queima e poluição tivesse sido estabelecida há muito tempo, com os eventos das chuvas ácidas de Londres na década de 20, o estudo da geração de poluentes como elemento motivador de pesquisa científica em combustão só veio à tona nas décadas de 70 e 80 nos EUA, Japão e Europa. Tal tendência se perdura ainda fortemente nos dias de hoje. Podem-se, então, relacionar quatro marcos notáveis:

- O estudo da estabilidade de chama, visando segurança;
- O controle de ignição e operação de queimadores;
- A conservação de energia na combustão;
- Controle de emissões poluentes.

No Brasil, a combustão industrial passou por diversas fases nos últimos 50 anos. Algumas delas refletem tendências mundiais como as causadas pela crise do petróleo da década de 70, outras, entretanto explicam paradigmas históricos que prejudicam o desenvolvimento da atividade no país. Com a consolidação da indústria do petróleo e a vinda de multinacionais na década de 50, a indústria teve acesso ao estado da arte em combustão industrial disponível no mundo. As tecnologias eram inicialmente importadas, obtidas por licenciamento externo para a fabricação de equipamentos como queimadores, geradores de vapor e fornos de processo.



Se de um lado essas empresas tiveram acesso a tais tecnologias outras, contudo, ficaram à margem desse avanço dando início a uma estratificação tecnológica altamente contrastada de empresas do mesmo segmento. Além disso, criava-se também uma barreira de confiança entre a indústria e a academia brasileira. A primeira preferia importar tecnologias testadas a desenvolver estudos no país. Concomitantemente as universidades recolheram-se em ambientes meramente acadêmicos, preferindo trilhar passo-a-passo o desenvolvimento e, com isso, adquirir e disseminar o conhecimento. Esse fato, dentre outros fatores, explica o modelo compartimentado e o distanciamento entre a indústria e universidade brasileira, ainda persistente.

Atualmente, as duas grandes diretrizes tecnológicas em combustão industrial são o controle de emissões e a conservação de energia. O enfoque neste início de século é, contudo, diferente do ocorrido nos anos 70 e 80. O ponto comum e fortemente motivador é a relação entre o uso da energia de forma limpa e a garantia de uma vida sustentável às futuras gerações. Ao mesmo tempo, pode-se perceber claramente no Brasil um movimento de valorização da competitividade industrial como base para o desenvolvimento. As políticas econômicas evidenciam o fortalecimento das contas interna e externa, em especial o balanço de pagamentos, lastreada em uma agressiva política de exportação.

Esse momento é particularmente interessante para o país, pois os elementos motivadores são comuns ao empreendedor, à indústria e à academia. Um dos eventos notáveis que evidencia tal tese é aprovação da Lei de Inovação, que fomenta parcerias entre o meio acadêmico e a iniciativa privada, celebrando contratos de transferência de tecnologia e de licenciamento de outorga para direito de uso, bem como a utilização da infra-estrutura de pesquisa das universidades, mediante contrato.

A relação entre a necessidade e solução, especialmente as vinculadas às tecnologias, está mais evidente entre as partes favorecendo a integração. Cabe, entretanto, um modelo de gestão de pesquisa e desenvolvimento assertivo, que efetivamente forneça condições, mas monitore e avalie os resultados.

### **3. Gestão em combustão industrial- modelo de quatro partes em rede**

As ações para uma gestão de sucesso em P&D, independente da área de aplicação, passa pela motivação de todos os atores envolvidos. No caso de combustão industrial os dois grandes motivadores são, sem dúvida, a conservação de energia e o controle de emissões, ambas segundo um contexto de sustentabilidade, de integração e preservação do ser humano e meio ambiente. Dessa forma fica estabelecido um norte comum, primeiro e mais importante passo para a formação de uma REDE de competências. Podem-se identificar quatro instituições envolvidas nesta REDE:

- A indústria usuária, que efetivamente converte o combustível;
- A indústria empreendedora, fabricante de equipamentos;
- A academia, formada por universidades e centros de pesquisa;
- O gestor de recursos e fomento;

Pode-se perceber que, historicamente no Brasil, somente dois ou três desses atores se envolvem em projetos de P&D. Os poucos exemplos de sucesso, por exemplo, a indústria alcooleira com projetos de queima de bagaço de cana nos anos 80, reuniram pelo menos três dos atores. Há outros exemplos isolados de sucesso, mas a continuação e sustentação do desenvolvimento realmente dependem do modelo de quatro partes.

#### **3.1. A indústria usuária:**

Esta entidade é a que efetivamente exerce a conversão do combustível e conseqüentemente pode beneficiar-se do sucesso de projetos de P&D. Devido a razões históricas já comentadas nesse trabalho, a maioria das empresas brasileiras não enxerga na academia ou mesmo em projetos de P&D, a possibilidade de solução de suas necessidades. Cabe portanto um processo de aproximação e convencimento dessas empresas a integrarem a REDE. O modelo deve criar formas de atração e motivação agindo nas entidades patronais ou mesmo individualmente. O produto do conhecimento proporcionará benefícios para toda REDE, mas sobretudo, à empresa usuária. A materialização do conhecimento gerado pode ser feita de várias formas, alguns exemplos são:

- Protótipos de equipamentos para necessidades específicas como queimadores, permutadores de calor e geradores de vapor;
- Equipamentos de série com tecnologia inovada;
- Avaliações de engenharia utilizando ferramentas de simulação computacional para combustão e transferência de calor;
- Métodos e procedimentos operacionais mais eficazes e com menores riscos;
- Melhorias em processo ou equipamentos existentes;

#### **3.2. O empreendedor:**

A empresa ou empreendedor que assumirá a materialização ou fabricação em série do produto é outra figura indispensável neste modelo. Os riscos inerentes ao empreendimento, conhecidos no modelo capitalista atual, devem ser

assumidos por esta instituição. Infelizmente o comportamento da economia brasileira, alternando períodos de crescimento intercalados por recessões e, sobretudo a inflação galopante dos anos 80, contribuíram para a fuga de empreendedores. Historicamente as empresas brasileiras fornecedoras de equipamentos para combustão industrial sempre foram revendedores ou fabricantes licenciados de tecnologia estrangeira. O modelo de integração vigente nos últimos 30 anos criou descrença e distanciamento da academia. A definição de regras claras, macro e microeconômicas, e as perspectivas de crescimento do mercado de equipamentos são dois fatores importantes na ambiência necessária a atração de empreendedores. Estas empresas têm larga experiência na aplicação dos equipamentos, mas pouco conhecimento e interesse em desenvolvimento científico. Pesquisas realizadas na região da grande Curitiba no Paraná em 2004 mostraram que dentre as empresas que lidam com tecnologia, apenas 2% mantêm em seus quadros pessoal com mestrado e doutorado e menos de 5% interagem com universidades regularmente. Isso é muito pouco. A cultura para o desenvolvimento e inovação é promovida pelo exercício da interação com outros atores. Essas empresas precisam ser atraídas e integradas a REDE, mesmo porque sua ausência compromete os resultados do modelo de gestão.

### **3.3. A academia:**

A academia é representada por universidades e institutos de pesquisa, públicos ou privados, que possuam condições de conquistar e manter o conhecimento cientificamente calcado. A participação desse ator é indispensável para o sucesso do modelo de gestão em REDE. É necessário, contudo alguns cuidados importantes no relacionamento com as outras partes. Sabe-se que a academia brasileira tem a missão institucional de gerar e disseminar conhecimentos e isso deve ser considerado em qualquer plano de gestão. Historicamente a universidade assume o conhecimento como um bem comum à toda sociedade. Essa visão entretanto deve ser adaptada no plano de gestão de P&D ora proposto. Atualmente as relações internacionais, baseadas em um ambiente competitivo, exigem o respeito a patentes. Dessa forma o conhecimento auferido pela academia, dentro de um projeto de P&D que agregue todos ou parte dos atores da REDE, deve ter sua propriedade preservada antes de sua disseminação. Essa cultura ainda não esta presente na academia brasileira. Embora a questão sobre direitos de patentes tenha solução legal fácil, a cultura da inovação proprietária deve ser fortemente estimulada.

### **3.4. O gestor**

É sabido que sem recursos financeiros as idéias não saem do papel. Porém, entende-se que o gestor é muito mais do que um agente fomentador de recursos, pois é preciso também motivar a cultura da inovação, promovendo a ambiência necessária para o desenvolvimento tecnológico. E ter uma visão sistêmica sobre a avenida de oportunidades, encomendando projetos em áreas estratégicas, bem como analisando criticamente os projetos, priorizando-os e articulando-se com os atores necessários.

Por exemplo, os fundos setoriais, no âmbito do MCT, que constituem um mecanismo de estímulo ao fortalecimento do sistema de C&T nacional, impulsionando o desenvolvimento tecnológico e incentivando a geração de conhecimento e inovações, apoiando projetos que estimulem toda a cadeia do conhecimento, desde a ciência básica até as áreas mais diretamente vinculadas a cada setor. Também a aprovação da Lei de Inovação, dando aos pesquisadores a liberdade de se relacionar com as empresas, estimula o conceito REDE, além de preservar os recursos dos fundos setoriais destinados à pesquisa.

### **3.5. A REDE**

A rede deve promover a sinergia necessária para o trabalho cooperativo, em torno de um objetivo único, respeitando os interesses individuais. É importante lembrar que, embora os papéis de cada parte sejam específicos, o binômio investimento-risco é comum a todos.

Neste contexto, como exemplo, há a Rede GásEnergia - Rede de Excelência em Gás e Energia, uma iniciativa da Petrobras, no âmbito da Gerência de Tecnologia para Desenvolvimento do Mercado. Consiste em uma rede de abrangência nacional e internacional, com a finalidade de atuar como meio de suporte ao desenvolvimento do mercado de gás natural no país. Sua missão é ampliar a participação deste insumo na matriz energética nacional e dar-lhe sustentabilidade, por intermédio de parcerias estratégicas entre os diversos agentes do mercado do gás natural, tais como: distribuidoras, transportadoras, universidades, instituições de pesquisa, órgãos governamentais, empresas fabricantes de equipamentos e empresas usuárias.

A Rede GasEnergia realiza um trabalho cooperativo e segmentado por tecnologias para o desenvolvimento do uso do gás natural (DG&E, 2004). O processo engloba a coordenação de projetos que se transformam em produtos tangíveis (equipamentos ou metodologias), os quais irão atender às demandas dos diversos setores: industrial, automotivo, residencial e comercial. Por exemplo, no que concerne à carteira de projetos para aplicações industriais, a RGE possui cerca de 40 projetos, abordando soluções tecnológicas eco-eficientes em energia elétrica, frio, calor de processo e aquecimento direto, atendendo aos diversos segmentos industriais: cerâmico, químico, alimentício, metalúrgico, siderúrgico, agroindustrial, moveleiro, etc. A figura 1 apresenta o sistema de gestão da RGE, mostrando a transferência de conhecimento e a ligação entre os elementos da cadeia produtiva: a indústria usuária, o fabricante de equipamentos, a academia e o gestor. É um exemplo do modelo de quatro partes aplicado na prática.



Figura 1 – A RGE na cadeia produtiva

#### 4. Gestão em combustão industrial- Demandas e Oportunidades em P&D

Para que se possa propor um modelo de gestão de P&D em REDE, adequado as necessidades atuais da indústria, são necessárias a classificação e a conceituação do produto chamado conhecimento. Dessa forma é possível definir o quê pesquisar em cada um dos níveis e, sobretudo, como conduzir os projetos de forma bem sucedida.

##### 4.1. Estágio do conhecimento

A diversidade tecnológica encontrada no ambiente industrial brasileiro, em especial nas plantas dependentes da conversão de combustíveis, indica naturalmente diferentes tratamentos e soluções. Em muitos casos a demanda é pela simples aplicação de conceitos básicos de combustão e termodinâmica. Nessas empresas o conhecimento corrente, disponível em cursos de graduação ou mesmo em nível médio permite grandes saltos de qualidade e desempenho. Em outras, entretanto as soluções dependem da investigação científica de fronteira do conhecimento. Esses diferentes níveis de aprofundamento tecnológico permitem a seguinte estratificação segundo a disponibilidade:

- **Conhecimento corrente.**  
Está disponível na academia em vários níveis e em empresas empreendedoras ou prestadoras de serviço. Esse tipo de recurso técnico vai ao encontro da missão institucional da universidade. Cabe, entretanto que o modelo de gestão atraia a empresa usuária promovendo o relacionamento com os outros atores da REDE. A indústria usuária pode ser beneficiada em curto prazo simplesmente pelo aperfeiçoamento técnico de procedimentos operacionais, controle de processos ou mesmo a substituição de equipamentos existentes por outros mais atualizados, mas disponíveis no mercado mundial.
- **Conhecimento em consolidação ou a conquistar.**  
Trata-se de tecnologias especializadas, ainda em desenvolvimento ou no limiar do conhecimento atual. Está presente na academia e empresas de vanguarda tecnológica e sua implementação atualmente no Brasil dá-se em médio prazo, de 3 a 5 anos. O modelo de gestão em REDE pode contribuir sobremaneira no gerenciamento desse tipo de projeto de P&D em combustão.
- **Inovação tecnológica.**  
Embora a inovação tecnológica possa advir de qualquer um dos atores da REDE, não necessariamente vinculada a alta tecnologia, as estatísticas sobre inovação mostram uma estreita relação com a pesquisa científica, tanto em quantidade como em qualidade (Pacheco, 2004). É sabido que o exercício da investigação científica básica ou aplicada permite a criação de uma ambiência favorável à inovação (Silva, 2004 e Bishop, 2004). A contribuição da REDE nesse contexto é identificar necessidades reais da indústria usuária estimulando as outras partes a soluções criativas.

##### 4.2. Linhas de P&D em Combustão Industrial.

Sabe-se que as duas grandes vertentes de pesquisa e desenvolvimento em combustão industrial são a conservação de energia e o controle de emissões poluentes. Essas duas áreas confundem-se no momento em que a exploração da eficiência térmica, tanto nas reações de combustão quanto nos processos de transferência de calor, acarreta na redução da emissão de poluentes para uma mesma demanda térmica. Abre-se portanto o espaço a exploração dos principais fenômenos de transporte envolvidos em conversão de energia, especialmente a transferência de calor por radiação e convecção. Resumidamente as três principais linhas são:

- **Conservação de energia;**  
Esta linha de P&D em processos de combustão pode explorar todos os equipamentos típicos em uma instalação de queima (Energetics, 2001). Caldeiras, fornos, aquecedores, permutadores de calor e equipamentos para aplicações específicas podem ser abordados aplicando-se a 1º e 2º leis da

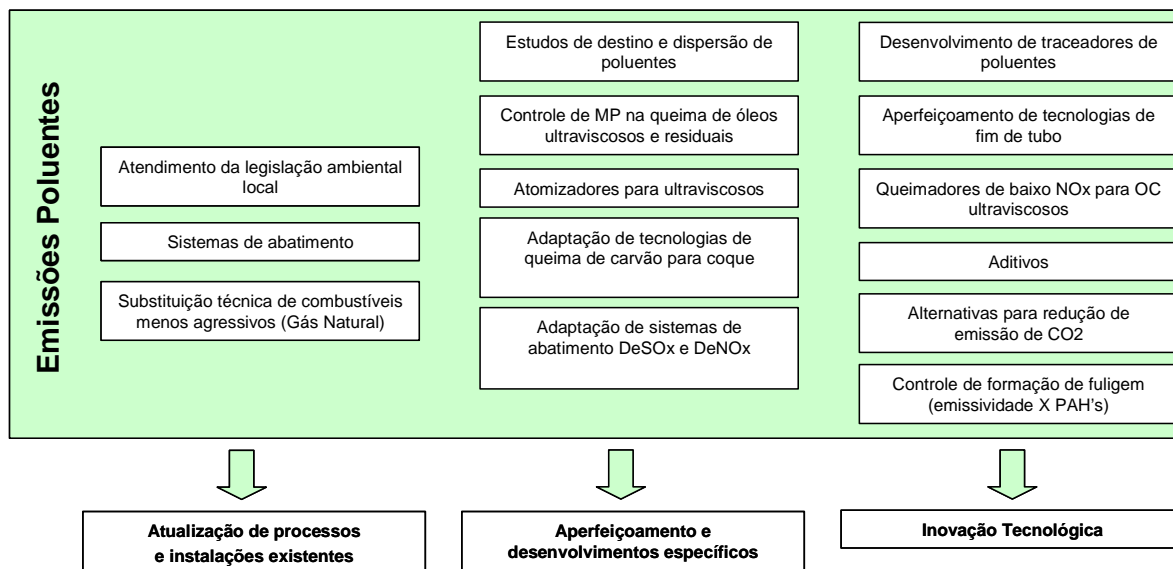
termodinâmica. Na parte de materiais abrem-se espaços para superisolantes, inclusive compósitos associados a alto vácuo;

- **Combustão e Transferência de calor;**  
Na área de combustão há espaço ao desenvolvimento de queimadores para aplicações específicas, micro-queimadores a gás natural, bem como a tropicalização e adaptação de tecnologias importadas. O estudo de cinética química experimental, estudo da ignição e o controle microscópico da mistura combustível e oxidante são áreas igualmente prospectivas. Outra linha importante é o desenvolvimento de sensores de chama e de espécies químicas para o monitoramento e estudo de chamas e poluentes; A forte presença do gás natural e suas incontestáveis vantagens sobre outros energéticos abre também várias rotas de P&D para a indústria e uso doméstico (DG&E, 2004). Além dessas rotas de oportunidades na área de combustão os processos de gaseificação têm ganhado espaço como opção energética de aproveitamento de resíduos. O avanço das tecnologias de separação e purificação de frações nobres como metano e hidrogênio permitem antever, igualmente a combustão, oportunidades importantes de desenvolvimento.
- **Controle de emissões poluentes;**  
O grande apelo dos últimos anos é o controle dos gases de efeito estufa, além dos poluentes tradicionais (Loving, 2004). Na pós-combustão o controle de geração e o desenvolvimento de processos de abatimento e descarte, economicamente acessíveis para NOx, SOx, CO2 e CO ainda são necessidades das indústrias. Na pré-combustão também se abrem novas oportunidades de P&D, principalmente no desenvolvimento de misturas combustíveis e na contenção de emissões de hidrocarbonetos. Também corroboram as emissões de compostos policíclicos aromáticos, sua formação e emissão;

Classificando-se as linhas de pesquisa segundo seu estágio e oportunidade pode-se discriminar o quadro 1:

Quadro 1 – Proposta de linhas de pesquisa para combustão industrial segundo a realidade brasileira

	<b>Conhecimento corrente</b>	<b>Conhecimento a desenvolver</b>	<b>Inovação tecnológica</b>
<b>Conservação de energia</b>	Planos de conservação de energia por segmento industrial	Otimização energética (Primeira e Segunda Leis)	Sistemas descentralizados de recuperação de calor
	Avaliação termoeconômica (ESCO's)	Gerenciamento energético em tempo real	Aproveitamento de correntes de baixa temperatura
	Avaliação prévia de eficiência energética de projetos industriais	Controle inteligente de combustão	Células de combustível
	Processos alternativos energeticamente racionalizados	Queimadores recuperativos	Superisolantes
<b>Combustão e Transferência de Calor</b>	Segurança em fornalhas (intertravamento e controle)	Fornos e caldeiras de alto desempenho (>50 mil horas)	Queima de combustível secundário
	Interação fornalha-chama (queimador ou fornalha?)	Gerenciamento energético em tempo real	Combustão sem chama e catalítica
	Formação/reciclagem de mão-de-obra	Aquecimento direto (de metalúrgica a alimentos)	Emissão acústica
		Conversão - Intercambiabilidade de combustíveis (gás natural)	Conectividade queimador/sensores/controle
		Queimadores porosos para gás natural	Sensores inteligentes de chama (biocomparação)
		Queimadores domésticos de alta eficiência	Micro-queimadores para gás natural
		Queimadores industriais de hidrogênio	



## 5. Conclusões

Dentro da conjuntura brasileira, considerando as oportunidades de desenvolvimento tecnológico apresentadas ao longo deste trabalho, percebe-se que a melhor forma de garantir maior competitividade à indústria que converte combustíveis é a criação de práticas de gestão focadas na interação dos diversos agentes da cadeia produtiva.

A falta de um dos atores ou a descaracterização de suas funções pode comprometer estruturalmente a gestão e seus resultados. Esse ciclo vicioso promove conseqüências frustrantes para a cadeia de conhecimento, inclusive com desperdício de recursos humanos e materiais. Iniciativas isoladas ou segmentadas comprometem a eficácia e a sobrevivência do modelo de gestão de P&D em combustão industrial.

## 6. Bibliografia

- LEUCKEL W., *Combustion Fundamentals and Concepts of Advanced Burner Technology*, 6th INFUB, Lisboa, 2002.  
 BISHOP P., GLENN J., WERBOS P., *Seminário Internacional "Futuros Tecnológicos"*, Curitiba, 2004  
 PACHECO C., ZANCAN G., *Seminário Internacional "Futuros Tecnológicos"*, Curitiba, 2004  
 LOVING A., *Capitalismo Natural*, Amana-key, 2004  
 SILVA, A.C.T., *Inovação*, Rio de Janeiro, 2004  
 ANDREWS G., GIBBS B., *Short course on Combustion Boilers and Furnaces*, Leeds, Inglaterra, 2005  
 DG&E/PETROBRAS, *Programa de Massificação do Uso do Gás Natural*, Rio de Janeiro, 2004.  
 ENERGETICS INC, CAPITAL SURINI, Estudo patrocinado pelo IHEA e DOE/OIT, *Roadmap for Process Heating Technology*, Washington/DC, EUA, 2001
-