ANÁLISE NUMÉRICA DE UMA CÂMARA DE COMBUSTÃO DE UMA MICROTURBINA A GÁS COM RECIRCULAÇÃO DE GASES DE ESCAPE

Marcelo Dal Belo Takehara

marcelo.takehara@gmail.com

Resumo. Embora seja previsto um aumento na produção de energia renovável nos próximos anos, o predomínio dos processos de geração de energia a partir de combustíveis fósseis ainda não pode ser integralmente substituído. Devido a tal situação, soluções que visem melhorar a eficiência e diminuir as emissões de tais processos vêm sendo pesquisadas. Inserido neste contexto, o sistema de recirculação de gases de escape (exhaust gas recirculation, EGR) é utilizado para diminuir as emissões de óxidos de nitrogênio (NO_x), que surgem através da combustão em motores a diesel, gasolina e em câmaras de combustão de turbinas a gás, e pode auxiliar um possível processo de captura e separação de CO₂ (CCS-Carbon capture and Storage). Outra tecnologia que faz parte do CCS é o processo "oxyfuel", ou oxi-combustão, que utiliza somente oxigênio como oxidante, facilitando assim, a posterior captura do dióxido de carbono. Em se tratando de combustíveis, o gás de síntese, proveniente do processamento do coque ou da biomassa, é uma boa alternativa que pode ser utilizado em combinação com tecnologias de captura de CO₂ antes de ser queimado em câmaras de combustão. Este trabalho tem como objeto de estudo o escoamento reativo de uma câmara de combustão, originalmente constituída para trabalhar com GLP, com tais sistemas aplicados, através do uso da fluido dinâmica computacional (CFD) e com auxílio do software FLUENT®. Primeiramente realizou-se uma validação dos resultados da simulação, comparando-os com estudos experimentais retirados da literatura - sem o uso destas tecnologias na câmara de combustão. Foram testados diferentes combustíveis e tecnologias ao longo do projeto, comparando com dados experimentais da literatura e avaliando qualitativamente os resultados obtidos, como as concentrações de CO₂ nos gases de saída e os perfis de temperaturas destes processos; realizou-se também uma análise prévia sobre possíveis problemas na combustão, como a instabilidade. As simulações foram realizadas através do método dos volumes finitos com uma malha tridimensional. A modelagem das alternativas utilizou o modelo de turbulência baseado em RANS, modelo de equilíbrio químico para a combustão com o transporte da fração de mistura e sua variância. Aproximações razoáveis foram obtidas com as simulações apresentadas, podendo-se inferir uma viabilidade técnica na implementação destas novas tecnologias de captura de CO₂ na área de micro turbinas a gás.

Palavras chaves: Combustão, Cogeração de energia elétrica, Mecânica dos fluidos computacional, Análise numérica.

1. Introdução

A utilização de microturbinas a gás mostra-se cada vez mais como uma boa alternativa à geração de energia centralizada, que no país se dá em grande parte através dos recursos hídricos. Estes apresentam grande dependência de fatores climáticos e da sazonalidade, e devem ser complementados por formas alternativas de geração, visando um crescente desenvolvimento do país. Sistemas de geração de energia distribuída, como o caso de micro turbinas, fornecem maior confiabilidade ao sistema de distribuição, além de descongestionar a rede elétrica, e não apresentam a grande perda de carga durante a transmissão, como na geração de energia centralizada.

Embora seja previsto um aumento na utilização de fontes renováveis de energia, o predomínio dos processos de geração de energia a partir de combustíveis fósseis ainda não pode ser substituído. Várias pesquisas apontam uma ligação entre essas emissões, principalmente de CO₂, e o aquecimento da superfície terrestre. Segundo cenários do Intergovernmental Panel on Climate Change (IPCC) 2007, por exemplo, em um caso em que a economia esteja exclusivamente ligada à utilização de combustíveis fósseis, a temperatura da superfície terrestre pode aumentar em torno de 6°C.

A principal forma de redução nas emissões do principal causador do efeito estufa, o CO_2 , são as tecnologias de captura e armazenamento de carbono (Carbon Capture and Storage - CCS). Para implementá-las de forma eficiente e com baixo investimento são necessárias algumas modificações nos modelos atuais de microturbinas a gás. Três alternativas para isso foram estudadas: 1) a recirculação de gases de escape; 2) utilização do "*oxyfuel*"; e 3) utilização de gás de síntese como combustível. Estes processos têm como principal objetivo o aumento da fração de CO₂ nos gases de exaustão, facilitando, desta forma, futuros processo de captura.

Neste trabalho, uma análise desses métodos foi realizada com uma câmara de combustão desenvolvida por Heitor (1985), originalmente operada com GLP. Uma representação desta câmara pode ser observada na Figura 2. A operação da câmara ocorre da seguinte forma: o ar comprimido é direcionado para a câmara de combustão através do *casing* e entra no *liner*, em parte pelo swirler, ar primário, e o restante, por furos de diluição presentes no próprio *liner*, ar secundário. O swirler gera uma zona de recirculação, que promove a ancoragem da chama e melhora a mistura do combustível com o ar. O ar que é admitido pelos furos de diluição promove uma homogeneização da temperatura dos gases de combustão, resfriando a temperatura dos gases de entrada na turbina (TIT – "turbine inlet temperature), limitada pelo material construtivo da turbina (KRIEGER FILHO, 2009). Temperaturas próximas de 800°C ainda estariam de acordo com os dados da literatura, embora já ocorram turbinas que operem com temperaturas superiores a 1000°C (SOARES, 2008).

2. Revisão bibliográfica

2.1. Métodos de captura e armazenamento de CO₂

Captura e armazenamento de CO_2 é uma das mais importantes tecnologias para diminuir emissões deste gás e armazená-lo seguramente durante anos em formações geológicas. O setor de energia, no qual os combustíveis fósseis têm mais de 80% na contribuição na energia mundial, possuí grandes fontes de emissões de CO_2 , e por isso é potencialmente um grande foco nas tecnologias CCS.

Naturalmente a ocorrência de CO_2 é utilizada para melhorar a recuperação de petróleo em alguns países, como EUA e Turquia. O gás produzido industrialmente possui a mesma utilidade, podendo aumentar a recuperação em até 17%. As primeiras tecnologias de CCS em larga escala para armazenamento de CO_2 foram realizadas de forma offshore nos anos 90 e de forma onshore em 2004. Devido à utilidade na recuperação de petróleo, grande parte dos estudos e pesquisas realizados nesta área é desenvolvida pela indústria petrolífera (BERGER et al., 2006).

Os métodos de captura de CO_2 de combustíveis fósseis na área de geração de energia podem ser divididos em três categorias principais (ANANTHARAMAN et al., 2009):

- Métodos de pós-combustão: a separação ocorre no final do processo, após a combustão do combustível fóssil e um meio oxidante, através dos gases de combustão. Esta seria a principal maneira de realizar a captura de CO₂ em processos já instalados, pois não requer mudanças nas plantas, somente a adição de uma planta de separação adicioanal.

- Métodos de pré-combustão: o combustível fóssil é utilizado para produzir um gás de síntese e o CO₂ é separado antes de ocorrer a combustão (após a separação, o combustível é constituído por hidrogênio, nitrogênio e vapor).

- Métodos oxy-fuel: o meio oxidante neste caso é oxigênio no lugar de ar. Os produtos dessa combustão são principalmente CO_2 e vapor de água, este último pode ser facilmente condensado, separando-se dessa forma do CO_2 (Figura 1).



Figura 1: Processos para a captura e armazenamento de CO₂

2.2. Recirculação de gases de escape (EGR)

Como neste estudo pretende-se utilizar o propano como combustível, uma alternativa adequada para captura de CO_2 seria um dos métodos de pós-combustão, pois não requerem nenhuma alteração no processo já instalado. A tecnologia de separação e purificação de CO_2 por absorção é um processo de pós-combustão utilizado com diversos absorventes e tem sido bastante empregada por ser uma técnica economicamente viável e de grande aplicabilidade na indústria. Este processo baseia-se em um ciclo onde um absorvente percorre dois cilindros, onde em um ocorre a absorção e no outro a dessorção e separação do CO_2 . Para melhorar os processos de CCS, diminuído as perdas de eficiência nas plantas de captura de CO_2 e diminuindo o tamanho delas, podem-se aumentar as concentrações de dióxido de carbono nos gases de escape. No trabalho de Berstad, Ditaranto e Hailong (2010) foram estudadas alternativas para aumentar esta concentração. Quatro diferentes tecnologias foram utilizadas para avaliar o aumento da concentração de CO_2 , aumentado assim a eficiência. Entre elas está o processo de recirculação de gases de escape. A utilização do EGR implicou num aumento na concentração molar de CO_2 de 3,8% para no mínimo 10%, e apresentou a melhor eficiência elétrica entre as quatro alternativas.

2.3. "Oxyfuel"

Outra possibilidade para gerar baixas emissões, é efetuar a troca do oxidante, que geralmente é constituído por ar, por oxigênio (O_2). Este processo é denominado de *"oxyfuel"*, e possui, em vias gerais, as seguintes partes: processamento e compressão do combustível; separação do ar e compressão do O_2 ; geração de energia e captura e condicionamento de CO_2 . Um esquema deste processo aplicado a turbinas a gás é apresentado na Figura 1.

A separação de ar é, na maioria das vezes, constituída por uma unidade criogênica de separação (coluna criogênica) que devolve um fluxo de oxigênio para o sistema de geração. Os sistemas de "oxyfuel" tenderiam a

trabalhar com temperaturas mais elevadas do que os sistema convencionais de combustão, pois ocorre a combustão somente com O_2 , o que poderia ocasionar falhas nas palhetas da turbina. Para diminuir esta temperatura, uma recirculação de gases é utilizada, sendo composta basicamente por H₂O e CO₂, o que promove uma diluição do O₂, diminuindo assim, a temperatura dos gases na combustão. Outra alternativa para este problema encontrado no processo *"oxyfuel"*, seria injetar água na câmara de combustão para diminuir a alta temperatura. O vapor d'água formado faria parte dos gases de combustão, sendo tipicamente 80% vapor e 20% CO₂ (em massa), segundo Anderson, MacAdam e Viteri (2008).

Outra vantagem de se utilizar o *"oxyfuel"*, é a alta redução de das espécies NOx, justamente pela ausência do nitrogênio no oxidante. Tanto as formações de NOx, causadas pela alta temperatura ou pela presença no combustível, foram reduzidas neste processo.

2.4. Gás de Síntese

Além das tecnologias explicadas anteriormente, várias alternativas relacionadas aos combustíveis com baixo índice de carbono estão sendo estudadas, resultando assim em baixas emissões de CO₂. Um exemplo destes combustíveis são os denominados gases de síntese. O gás de síntese é tipicamente formado por hidrogênio e monóxido de carbono.

O gás de síntese foi primeiramente produzido como um produto intermediário do processamento da biomassa, que apesar de um baixo valor calorífico, está se tornando cada vez mais atraente como alternativa para a indústria de energia. Hoje em dia, grande parte deste combustível é produzida principalmente a partir do carvão ou biomassa através da gaseificação ou formados na indústria do aço durante o processamento do coque. Um exemplo do interesse da utilização do gás de síntese como combustível em micro turbinas pode ser encontrado no estudo de Delattin, Lorenzo, Rizzo, Bram e Ruick (2009), no qual uma análise experimental foi realizada para verificar a empregabilidade do gás de síntese em uma câmara de combustão desenvolvida para micro turbinas a gás natural. Neste artigo foram obtidos dados experimentais mudando-se gradualmente a alimentação de gás natural para o denominado gás de síntese. A composição deste gás utilizado foi de 79,5% H_2 e 20,5% CO (valores em base volumétrica), com ar pré aquecido de 450°C.

Não ocorreu durante os experimentos problemas com relação à auto-ignição, instabilidade e mudanças na posição da chama. Além disso, a combustão de gás de síntese produziu emissões extremamente baixas de NOx e CO.

3. Metodologia

Este trabalho tem como objetivo a análise numérica, através da ferramenta de CFD FLUENT®, de uma câmara de combustão utilizando os métodos anteriormente discutidos. A análise numérica possibilitará avaliar perfis de temperatura durante o processo de combustão e as frações de CO₂ na saída, que deve apresentar um aumento para posterior utilização de um processo de CCS. A estratégia utilizada para analisar numericamente o escoamento reativo na câmara de combustão com EGR foi adotar elevadas concentrações de CO₂ como entrada na câmara, representando altas taxas recirculação (aproximadamente 40%). A concentração de oxigênio na entrada da câmara pode ser aproximada para 16% (mol), analisado o trabalho de Berstad, Ditaranto e Hailong (2010), pois ocorrendo uma reação com valores abaixo deste, a combustão apresenta grandes concentrações de hidrocarbonetos ainda não oxidados e de CO. Balanços de massa e energia foram realizados para atingir composições e temperaturas do oxidante próximas a da literatura.

Para analisar a câmara de combustão utilizando o "oxyfuel", a estratégia inicial foi considerar o sistema mostrado no capítulo anterior, utilizando oxigênio como oxidante e com uma recirculação dos gases de escape, os quais se constituem basicamente de CO_2 após a condensação da água.

Na utilização do gás de síntese, uma metodologia ser seguida foi apresentada no trabalho de Bajer, Kwiatkowski e Wedolowski (2007), no qual se realizam reações na câmara com diferentes composições de gás de síntese, avaliando os contornos de temperatura e velocidades ao longo da câmara.

Para modelar a combustão turbulenta foram utilizados o modelo de turbulência RANS baseado nas equações do tensor de Reynolds (Reynolds Stress Model –RSM) e o modelo de equilíbrio químico para a combustão com o transporte da fração de mistura e sua variância com uma única reação global e tratamento estatístico das reações turbulentas.

3.1. Modelos

Para realizar a análise numérica do escoamento reativo na câmara de combustão, alguns modelos baseados na mecânica dos fluídos, termodinâmica e cálculo numérico devem ser adotados. Neste artigo serão apresentados os modelos e as equações matemáticas, de forma resumida, que são importantes para a modelagem deste estudo. Para informações mais detalhadas devem-se consultar as referências fornecidas.

3.1.1. Equações de Conservação

Um problema de escoamento deve obedecer: equações de conservação da massa, conservação da quantidade de movimento (segunda lei de Newton), conservação de energia (taxa de variação da energia igual à soma da taxa de

adição de calor e a taxa de realização de trabalho em uma partícula de fluido - primeira lei da termodinâmica) e conservação das espécies químicas.

Uma forma geral de representar essas equações de conservação é utilizar a seguinte equação de transporte:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \phi \vec{u}) = \operatorname{div}(\Gamma \operatorname{div} \phi) + S_{\phi}$$
(3.1)

A equação de transporte pode ser interpretada da seguinte maneira: a taxa de aumento da quantidade ϕ no volume de controle, somada à taxa de transporte de ϕ por advecção deve igualar-se à taxa de transporte de ϕ por difusão mais a taxa de geração de ϕ dentro do volume de controle (MALALASEKERA et al., 2007).

3.1.2. Método dos volumes finitos

Equações matemáticas podem fornecer uma modelagem para os mais diversos problemas da engenharia, e dependendo da complexidade, não possuem uma solução analítica aceitável. Estes modelos matemáticos apresentam usualmente equações diferenciais, as quais podem ser solucionadas por algum método numérico.

O método dos volumes finitos é aplicado na Dinâmica dos Fluidos Computacional, no qual a geometria do problema é divida em um grande numero de volumes de dimensões reduzidas. No decorrer do método dos volumes finitos ocorre a manutenção do significado físico das equações de conservação de uma quantidade em um algoritmo numérico, sendo um grande atrativo na sua implementação.

No método de volumes finitos, a equação de transporte é integrada em todo domínio computacional, que é composto por todos os pequenos volumes que dividem a geometria.

Estas equações são, então, discretizadas, resultando em um sistema de equações algébricas que é resolvido por um método numérico convenientemente escolhido. O exemplo a seguir é dado com a regra do ponto médio:

3.1.3. Modelos de turbulência

O escoamento reativo turbulento na câmara de combustão pode ser descrito pelo modelo de turbulência RANS (*Reynolds*-Averaged Navier-Stokes). As equações de Navier-Stokes com médias de Reynolds (RANS) em um tensor cartesiano são representadas por:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\tilde{u}_{i}) + \frac{\partial}{\partial x_{j}}(\bar{\rho}\tilde{u}_{i}\tilde{u}_{j}) = -\frac{\partial\bar{p}}{\partial x_{i}} + \frac{\partial}{\partial x_{j}}\left(\mu\frac{\partial\tilde{u}_{i}}{\partial x_{j}}\right) + \frac{\partial}{\partial x_{j}}\left(-\overline{\rho u''_{i}u''_{j}}\right)$$
(3.2)

Onde u'' é a flutuação de velocidade densidade-massa, \bar{p} é pressão média e μ é a viscosidade dinâmica molecular.

As equações de momento incluem o tensor de tensão turbulenta $\tau_{ij}^t = -\overline{\rho u''_{\iota} u''_{J}}$, o qual é modelado utilizando o Modelo de tensões de Reynolds (RSM-Reynolds Stress Model), como descrito a seguir. Este modelo é aplicado tendo em vista a rotacionalidade do escoamento, o que será justificado pela utilização de um swirl na entrada de ar da câmara. O modelo de tensões de Reynolds, juntamente com a equação para a taxa de dissipação, fecha as equações de Navier Stokes com médias de Reynolds. Resolvendo equações de transporte para a tensões de Reynolds, tem-se:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\bar{\rho} \widetilde{u}_{i} \widetilde{u}_{j} \right) + \frac{\partial}{\partial x_{k}} \left(\bar{\rho} \widetilde{u}_{k} u_{i} '' u_{j} '' \right) = \frac{\partial}{\partial x_{k}} \left(-T_{kij} \right) + \frac{\partial}{\partial x_{m}} \left(\mu \frac{\partial \left(u_{i} '' u_{j} \right)}{\partial x_{m}} \right) + P_{ij} + \Pi_{ij} - \varepsilon_{ij}$$

$$(3.3)$$

Onde T_{kij} é o fluxo tensão de Reynolds, P_{ij} é a produção do tensor, Π_{ij} é o tensor gradiente velocidade-pressão e ε_{ij} é o tensor dissipação.Para evitar um refinamento da malha nas fronteiras sólidas, as chamadas funções de parede são utilizadas. As paredes neste problema, são representadas como adiabáticas.

3.1.4. Modelo de combustão turbulenta

A combustão é modelada através do modelo termoquímico de fração de mistura, onde f é a variável transportada (Malalasekera, 2007). Devido à sua definição, a equação de transporte para a fração de mistura média, f, não apresenta termo de fonte ou sorvedouro e, assim, pode ser escrita como:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\bar{\rho} \tilde{f} \right) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\bar{\rho} \tilde{f} \right) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu_t}{\sigma_t} \frac{\partial \tilde{f}}{\partial x_j} \right)$$
(3.4)

Utilizando a hipótese de número de Lewis unitário para um sistema adiabático, as equações normalizadas para a entalpia de mistura apresenta a mesma estrutura e condições de contorno da equação da fração de mistura. Portanto, no modelo de escalar conservativo, somente uma equação de transporte para o escalar f é resolvida, representando as duas variáveis termoquímicas fração de mistura e entalpia de mistura (KRIEGER FILHO, 2009).

3.2. Geração de Malhas

A geometria da câmara de combustão da microturbina utilizada no estudo de Heitor (1985), a qual será avaliada inicialmente neste trabalho, encontra-se representada na Figura 2:



Figura 2: Geometria e malha tridimensional da câmara de combustão.

Para gerar esta geometria, um programa de CAD foi utilizado. As equações de transporte são resolvidas em um domínio computacional, denominado de malha, o qual é divido em diversos elementos de tamanho menor, os chamados volumes finitos. Esta geometria criada em um programa de CAD é dividida, então, em diversos elementos por um software gerador de malhas. A malha tridimensional da câmara de combustão da micro turbina utilizada no estudo de Heitor (1985) possui aproximadamente 1.300.000,0 de volumes e encontra-se representada também na Figura 2,

3.3. Condições de contorno

As simulações realizadas no trabalho possuem as seguintes condições de contorno:

Tabela 1: Condição de contorno das simulações

Posição	Entrada de Oxidante	Entrada de Combustível
Energia Cinética Turbulenta (k)	0,18 m2/s2	25 m2/s2
Tensor de Tensão de Reynolds	$u_{i}^{"}u_{j}^{"} = 0$ $u_{i}^{'^{2}} = \frac{2}{3}k, i = 1, 2, 3$	$u_{i}^{"}u_{j}^{"} = 0$ $u_{i}^{'^{2}} = \frac{2}{3}$ k, i = 1,2,3
Intensidade de turbulência (%)	10,0	10,0
Escala de comprimento de turbulência (m)	0,01	0,001
Fração de mistura média	0,0	1,0
Pressão (gPa)	3126	1933
Variância da Fração de Mistura	0	0

4. Resultados

Neste capítulo serão apresentados os resultados obtidos neste presente trabalho. Para cada análise, serão apresentadas as condições de contorno do problema e os resultados das simulações numéricas encontradas.

4.1. Condição Padrão - Validação da Câmara com dados experimentais

No trabalho de Heitor (1985), a combustão foi realizada utilizando propano como combustível e ar como oxidante (Tabela 2).

Tabela 2:	Condição de	e contorno em	condições	padrão.
-----------	-------------	---------------	-----------	---------



Figura 3: Gráficos de frações de misturas para a condição padrão.

A relação estequiométrica é dada pela reação:

 $C_3H_8 + 5(O_2 + 3,76N_2) = 3CO_2 + 4H_2O + 18,8N_2$

As vazões mássicas foram calculadas com uma taxa de equivalência de 0,3, o que resulta em um excesso de ar de 235%. Para essas condições têm-se os seguintes resultados das frações de misturas apresentados na Figura 3. Através dos gráficos de frações de mistura, pode-se notar que as máximas temperaturas ocorrem para fração de mistura média de aproximadamente 0,06 que é o valor estequiométrico para o propano para a combustão.

A temperatura média dos gases de combustão na saída do volume de controle foi calculada em 788,5 °C. Através do balanço de energia hipotético obteve-se a temperatura adiabática de chama de 809°C. Esta temperatura também pode ser observada no gráfico das frações de mistura para um valor de mistura f de 0,018, valor considerando as vazões mássicas utilizadas para a simulação. Os valores das temperaturas da simulação se aproximam da temperatura adiabática de chama, não sendo exatamente igual devido a este valor ser uma média na área de saída, mas comprova os resultados obtidos.

Na Figura 4 têm-se o perfil de temperaturas ao longo da câmara, onde observa-se altas temperaturas nas regiões com valores de frações de mistura próximos a 0,06. Estas zonas de alta temperatura ocorrem após o combustível e o ar se misturarem através do escoamento rotacional, promovido pelo swirler, até o estabelecimento de uma chama no centro da câmara, que se prolonga até a saída dos gases quentes. Uma elevada fração mássica de CO_2 é observada nestas regiões de altas temperaturas (Figura 4).

Deve-se notar que, embora o *swirler* promova uma boa mistura dos reagentes, temperaturas ainda elevadas, com valores próximos a 1800°C, são encontradas no final da câmara.



Figura 4: Perfil de temperaturas, Perfil de Fração de mistura, Vetores velocidade e velocidades axiais.

A distribuição de velocidades no plano central da câmara de combustão é mostrado na Figura 4. Nesta pode-se observar a ocorrência da zona de recirculação logo a frente do *swirler*, assim como na Figura 5, a qual mostra o perfil da velocidade no eixo z, sendo negativo no sentido da saída da câmara e positivo nas zonas de recirculação. A Figura 5 mostra uma comparação do presente dado numérico e resultados experimentais realizados por Heitor (1985). Observa-se que os perfis de velocidades são próximos, apesar de os dados experimentais mostrarem uma maior intensidade na recirculação, identificadas pelas velocidades axiais negativas no gráfico.



Figura 5: Velocidades axiais e na direção y na região dos primeiros furos de diluição - Comparação (Heitor, 1985).

As velocidades médias na direção y, no mesmo plano, são mostradas na Figura 5. Apesar de ocorrer pequenas discrepâncias de resultados no centro do plano representado (r/R=1,0), os resultados são muito próximos dos experimentais, assim como observou-se com o perfil de temperatura obtido na mesma referência e obtido na simulação. Pôde-se notar um pequeno desvio nas temperaturas finais, as quais na simulação ainda estão na ordem de 1500°C, enquanto na análise experimental, elas estão próximas de 1330°C. Porém as zonas de elevadas temperaturas e o

contorno delas apresentam uma boa proximidade, fazendo com que os resultados desta primeira simulação sejam validados com dados experimentais.

A composição dos gases de combustão é dada em uma tabela comparativa com os quatro casos estudados, ao final deste capitulo (Tabela 6).

4.2. Recirculação de 40% dos gases de escape

A recirculação de gases será considerada no modelo utilizado alterando apenas os valores das concentrações dos gases que compõe a entrada de oxidante na malha da câmara de combustão. Para isso, considera-se que o ar atmosférico é pré-misturado com os gases de combustão recirculados antes de entrarem no compressor.

Estes gases na saída da turbina possuem a temperatura aproximadamente de 127°C, esta que será utilizada para estabelecer o calor específico destes gases e assim calcular a temperatura dos gases que entram novamente na câmara de combustão através da primeira lei da termodinâmica. A recirculação de gases terá uma taxa de 40%, sendo um dado inicial, levando em conta os trabalhos de referência. As composições dos gases e as respectivas temperaturas são apresentadas na Tabela 3.

Tabela 3: Condições iniciais para o EGR



Figura 6: Gráficos de frações de misturas para a EGR.

Os vetores velocidade não se alteram significativamente para esta simulação, não sendo novamente representado. Através dos perfis de temperatura e de fração de mistura (Figura 7), pode-se perceber que eles permaneceram muito próximos ao do caso sem recirculação.





A temperatura média dos gases de combustão na saída do volume de controle foi calculada em 861,2 °C. A composição dos gases de combustão é dada pela Tabela 6. Evidenciando um aumento de mais de 40% de CO_2 nos gases de combustão em comparação a encontrada no caso em que não se utiliza a recirculação. Mesmo apresentando uma grande variação, a concentração de 5,3% está ainda distante do valor encontrado na referência (10%), mesmo adotando-se uma taxa de recirculação alta.

4.3. Simulação com "oxyfuel"

Para evitar elevadas temperaturas no interior da câmara e aumentar a concentração final de CO_2 , a estratégia utilizada foi simular uma recirculação de gases, como mostrado na Figura 1, utilizando uma fração volumétrica de CO_2 no oxidante igual à fração de N₂ no ar atmosférico, da seguinte forma:

$$C_3H_8 + 5(O_2 + 3,76CO_2) = 21,8CO_2 + 4H_2O$$
(4.1)

Esta nova mistura no oxidante pode ser denominada de "ar sintético". Uma possibilidade para a formação deste ar sintético seria realizar a combustão com oxigênio puro, obtido através de uma unidade de separação de ar, e logo após utilizar a recirculação de gases de escape, resultando em mistura formada basicamente com CO_2 e O_2 .

Realizando o balanço de energia para a entrada de oxidante com uma recirculação de gases de exaustão provenientes da turbina, formando uma mistura de O_2 e CO_2 , similarmente a realizada anteriormente, tem-se as seguintes condições:

Tabela 4: Condições de contorno para "oxyfuel".



Figura 8: Gráficos da fração de mistura para "oxyfuel".



Figura 9: Perfis de temperatura e das espécie CO₂ e O₂ para "oxyfuel".

Através da Figura 9 observa-se que as temperaturas ao longo da câmara apresentaram uma acentuada redução, se comparada com a combustão com ar. Como foi previsto no trabalho, devido a valores de calor específico do CO_2 ser menor que o do N_2 para temperaturas acima de 600K. A temperatura máxima na câmara ficou próxima dos 1350°C, tendo um significativo decréscimo da condição anterior. Além disso, podem-se comprovar as temperaturas finais encontrada nos gases de exaustão e a temperatura adiabática de chama calculada, próximas de 805,2°C e 785°C.

As facões volumétricas finais de CO_2 (Figura 6), aproximadamente 80% em volume, estão de acordo com processos de pós-captura de carbono, como é discutido no trabalho de Costa(2009). Além disso, o perfil de temperatura encontrado está próximo ao encontrado nos trabalhos de referência, o que pode significar uma viabilidade técnica deste processo.

4.4. Gás de Síntese

Outra possibilidade para a captura de CO_2 seria utilizar o gás de síntese, produto da gaseificação da biomassa por exemplo, como combustível, e o ar sintético como oxidante, para se obter altas concentrações de CO_2 no gases de exaustão. Para este caso, utilizou-se uma composição de gás de síntese próxima a encontrada na literatura:

Tabela 5: Condições de contorno para combustão do Gás de Síntese.



Figura 10: Fração média de mistura Gás de Síntese.



Figura 11: Perfil de temperatura e fração média de mistura para o Gás de Síntese.

Pode-se observar pelo perfil de temperatura (Figura 11) que as reações ocorrem majoritariamente no centro da câmara. A partir da figura pode-se também inferir que este processo se dá de maneira estável, pois pode-se verificar que as elevadas temperaturas ocorrem até antes do término da câmara, sendo este processo mais desejável que o perfil apresentado nas outras simulações. Além disso, a Figura 12 revela uma alta taxa de recirculação, região representada por velocidades em z, positivas, o que pode justificar uma melhor mistura dos reagentes, e um prolongamento de altas temperaturas menor em relação às simulações anteriores.

Frações volumétricas de CO_2 na ordem de 80% nos gases de combustão são observadas na Tabela 6. Esta elevada concentração tornaria um futuro processo de captura CO_2 muito eficiente e ao mesmo tempo econômico.



Figura 12: Velocidade na direção z e fração mássica de CO₂ para o Gás de Síntese.

Ga	ses	N ₂	02	CO2	T(≌C)
Processo	Normal	0,77	0,144	0,036	788
	EGR	0,761	0,114	0,053	861
	Oxyfuel	-	0,11	0,808	849
	Syngas	-	0,121	0,825	652

Tabela 6: Fração volumétrica e temperatura dos gases de combustão para todos os casos.

5. Conclusão

O objetivo do presente relatório foi analisar a utilização de tecnologias que tornassem os processos de captura de CO2 mais adequados para a área de microturbinas a gás. Estes novos processos vêm se mostrando muito uteis na redução de emissão de um dos principais gases do efeito estufa, o dióxido de carbono. Os resultados das simulações foram satisfatórios. O perfil de temperaturas ao longo da câmara apresentou certa semelhança nos diferentes casos estudados, sendo as temperaturas dos gases de combustão adequadas para o processo de expansão em microturbinas a gás. Verificou-se ainda que os métodos utilizados podem auxiliar uma futura captura de CO2, tendo em vista que foram encontradas altas concentrações deste gás ao fim do processo de combustão na câmara, próximos de 80% em fração volumétrica, aumentando em muito a eficiência dos processos de captura de pós-combustão. Além disso, pode-se inferir que o caso utilizando gás de síntese, apresentou bons resultados no que diz respeito ao perfil da temperatura. Neste caso pode-se observar que as elevadas temperaturas ocorrem até um certo trecho da câmara de combustão. Na saída da câmara a temperatura dos gases está mais uniforme, o que poderia levar a uma melhor combustão em análises experimentais. Este fato pode ser justificado pela elevada zona de recirculação, como pode ser observada no perfil de velocidades para este caso. Da mesma forma pode-se inferir que grandes zonas de recirculação promovem uma mistura mais homogênea dos gases e uma estabilidade maior na combustão no interior da câmara. Logicamente, como foram utilizadas algumas simplificações neste projeto, como um mecanismo de combustão com equilíbrio químico e uma condição adiabática para as paredes da câmara, os resultados obtidos não possuem critérios quantitativos para comparações. Estes resultados podem ser utilizados somente para inferir certas consequências do processo e para análises mais qualitativas do mesmo. Para aperfeiçoar esta análise do escoamento reativo, modelos de combustão utilizando a cinética química em conjunto com mecanismos de reações detalhados podem ser utilizados, assim como trocas de calor por radiação e condução na parede do *liner*.

6. Referências

- Anderson, R.; MacAdam S.; Viteri F. Adapting gas turbines to zero emission oxy-fuel power plants. Berlin, Germany, 2008.
- Anantharaman, R.; Bolland, O.; Nord, L. O. Design and off-design analyses of a pre-combustion CO2 capture process in a natural gas combined cycle power plant, 2009.
- Bajer, K.; Kwiatkowski, K.; Wedolowski, K. Turbulent flow and combustion in real-life syngas burner. University of Warsaw, 2007.
- Berger, B.; Steeneveldt, R.; Torp, T. A. CO2 Capture and storage. Closing the Knowing–Doing Gap, 2006.
- Berstad, D.; Ditaranto, M.; Hailong, L. A quantitative comparison of gas turbine cycles with CO2 capture, 2009.
- Bolland, O.; Hammer, T.; Keyser, J. Natural Gas Oxy-Fuel Cycles Part 2: Heat Transfer Analysis of a Gas Turbine, 2009.
- Bolland, B.; Jordal, K.; Kvamsdal, H. M. Technologies for increasing CO2 concentration in exhaust gas from natural gas-fired power production with post-combustion, amine-based CO2 capture, 2010.
- Bram, S.; Delattin, F.; Lorenzo, G.; Ruyck, J. Combustion of syngas in a pressurized microturbine-like combuster: Experimental results, 2009.
- Brix, J.; Glarborg, P.; Jensen, A.; Jensen, P.; Toftegaard, M. B. Oxy-fuel combustion of solid fuels, 2010.
- Clemens, F.; Griffin, T.; Jansohn, P.; Mantzaras, I.; Marechal, F. Technologies for Gas Turbine Power Generation with CO2 Mitigation, 2011.
- Gobbato, P.; Lazzaretto, A.; Masi, M.; Toffolo, A. Numerical simulation of a hydrogen fuelled gas turbine Combustor. Italy, 2010.
- Krieger Filho, G. C. Relatório científico final Projeto FAPESP, 2009.
- Malalasekera, W.; Versteeg, H. K. An introduction to computational fluid dynamics The Finite Volume Method, 2nd edition, Prentice Hall, London, UK, 2007.
- IPCC AR4 WG1 (2007), Solomon, S.; Qin, D.; Manning, M.; Chen, Z.; Marquis, M.; Averyt, K.B.; Tignor, M.; and Miller, H.L., ed., *Climate Change 2007: The Physical Science Basis*. Cambridge University Press, 2007.
- Heitor, M. F. T. V.; Experiments in turbulent reacting flows. Doctoral Thesis. London University, 1985.
- Soares, C.; Gas Turbines, a handbook of air, land, and sea applications. Elselvier. 2008

Costa, I. V. L.; análise do potencial técnico do sequestro geológico de co2 no setor petróleo no brasil. UFRJ, 2009.

7. Direitos autorais

Os autores são os únicos responsáveis pelo conteúdo do material impresso incluído no seu trabalho.

NUMERICAL ANALYSIS OF A COMBUSTION CHAMBER OF A MICRO GAS TURBINE WITH EXHAUST RECIRCULATION

Marcelo Dal Belo Takehara

marcelo.takehara@gmail.br

Abstract.

Despite the efforts to increase the production of renewable energy in the next years, the predominance of energy generation processes from fossil fuels still can not to be totally replaced. Because of this fact, new solutions that aim to improve the efficiency and reduce the emissions of such processes have been researched. In this context, the exhaust gas recirculation can be used to decrease the nitrogen oxides emissions, resulting from the diesel and Otto motors combustion and gas turbines combustors. Such system can help to a possible carbon capture and storage (CCS) process. Another CCS technology is the "oxyfuel" process - that uses pure oxygen as oxidant, what facilitate the future carbon dioxide capture. In relationship to the fuels, the syngas, originated from the biomass or coke gasification, is a good alternative to use in pre-combustion CCS methods. The main topic in this work is the study of a reacting flow of a gas combustor, originally manufactured to operate with LPG, with the cited systems before, by using a commercial computational fluid dynamic (CFD) software - FLUENT. Firstly, a validation of the simulation results was evaluated by comparing with experimental data from the literature; in this part the CCS methods were not used. After, a variety of fuels and technologies were tested during the project. The analysis of the results - as the dioxide carbon concentration of the exhausted gas and the temperature contours - were made qualitatively. The simulations were performed using the finite volume method with a three-dimensional mesh. The modeling of the alternatives used the turbulence model based on RANS, chemical equilibrium model for the transportation of combustion mixture fraction and its variance. Quite good approximations were obtained with the presented simulations, inferring a technical feasibility in implementing these new technologies for CO₂ capture in the area of micro gas turbines.

Keywords. combustion, cogeneration of electricity, computacioanal Fluid Mechanics, Numerical analysis.