

**UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO ESCOLA POLITÉCNICA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA MECÂNICA**

**ANÁLISE NUMÉRICA DE UMA CÂMARA DE COMBUSTÃO DE UMA
MICRO TURBINA A GÁS COM RECIRCULAÇÃO DE GASES DE ESCAPE**

Marcelo Dal Belo Takehara

São Paulo
2011

**UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO ESCOLA POLITÉCNICA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA MECÂNICA**

**ANÁLISE NUMÉRICA DE UMA CÂMARA DE COMBUSTÃO DE UMA
MICRO TURBINA A GÁS COM RECIRCULAÇÃO DE GASES DE ESCAPE**

Trabalho de formatura apresentado à Escola
Politécnica da Universidade de São Paulo para
obtenção do título de Graduação em Engenharia

Marcelo Dal Belo Takehara

Orientador: Guenther Carlos Krieger Filho

Área de Concentração:
Engenharia Mecânica

São Paulo
2011

FICHA CATALOGRÁFICA

Takehara, Marcelo Dal Belo

Análise numérica de uma câmara de combustão de uma micro turbina a gás com recirculação de gases de escape / M. Dal Belo Takehara. – São Paulo, 2011.

71 p.

Trabalho de Formatura - Escola Politécnica da Universidade de São Paulo. Departamento de Engenharia Mecânica.

1.Combustão 2.Cogeração de energia elétrica 3.Mecânica dos fluidos computacional 4.Análise numérica I.Universidade de São Paulo. Escola Politécnica. Departamento de Engenharia Mecânica II.t.

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 CO_2 (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 CO_2 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 CO_2 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 CO_2 na área de micro turbinas a gás.

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.

Lista de Tabelas

Tabela 1: Condição de contorno das simulações	41
Tabela 2: Condição de contorno em condição padrão.....	42
Tabela 3: Composição dos gases de combustão para condição padrão	44
Tabela 4: Condições de contorno para o EGR	52
Tabela 5: Composição dos gases de combustão para o EGR.	53
Tabela 6: Condições de contorno para “oxyfuel” – Relação Estequiométrica... 	56
Tabela 7: Composição dos gases de combustão para “oxyfuel” – Relação Estequiométrica.	56
Tabela 8: Condições de contorno para “oxyfuel”.	59
Tabela 9: Composição dos gases de combustão para “oxyfuel”.	59
Tabela 10: Condições de contorno para combustão do hidrogênio.....	62
Tabela 11: Composição dos gases de combustão para o hidrogênio.	63
Tabela 12: Condições de contorno para combustão do Gás de Síntese.	64
Tabela 13: Composição dos gases de combustão para o Gás de Síntese.	65

Lista de Figuras

Figura 1: Representação do ciclo brayton para turbinas a gás	17
Figura 2: Esquema da câmara de combustão	18
Figura 3: Processos para a captura e armazenamento de CO₂	22
Figura 4: Processo de separação de CO₂ com MEA	23
Figura 5: Esquema de turbina a gás utilizando egr e processo de captura pós-combustão.	24
Figura 6: Concentração de CO₂ com aumento da taxa de EGR.	25
Figura 7: Princípio da combustão “oxyfuel”.	26
Figura 8 Planta “oxyfuel” de geração de energia.....	27
Figura 9: Volumes finitos para malha bidimensional.	33
Figura 10: Geometria da câmara de combustão	38
Figura 11: Malha 3D da câmara de combustão.	39
Figura 12: Malha tridimensional com os refinamentos nas diferentes partes. ..	39
Figura 13: Detalhe da malha no swirler e nos bicos injetores de combustível. ..	39
Figura 14: Posição dos fluxos de massa na câmara	41
Figura 15: Gráficos de frações de misturas para a condição padrão.....	43
Figura 16: Perfis de fração de mistura, temperatura e da espécie CO₂ para condição padrão.	46
Figura 17: Perfis da espécie O₂ e da energia cinética de turbulência para condição padrão.	47
Figura 18: Vetores velocidade, perfil da velocidade e das velocidades em z para condição padrão.	48
Figura 19: Velocidade axial no plano dos primeiros furos de diluição (z=167mm) – comparação com dados experimentais.	49
Figura 20: Velocidade em y no plano dos primeiros furos de diluição (z=167mm) – comparação com dados experimentais.....	49
Figura 21: Perfil de temperatura (k) – dados experimentais. (Heitor, 1985)	50
Figura 22: Esquema utilizado para a simulação do EGR	51
Figura 23: Volume de controle para a mistura.	51
Figura 24: Gráficos de frações de misturas para o EGR.	53

Figura 25: Perfis de fração de mistura, temperatura e da espécie O₂ para o EGR.	54
Figura 26: Perfil da espécie CO₂ para o EGR	55
Figura 27: Gráfico da fração média de mistura para o “oxyfuel” - relação estequiométrica.....	56
Figura 28: Perfil de temperatura para “oxyfuel” – relação estequiométrica.	57
Figura 29: Curva comparativa entre os calores específico do N₂ e do CO₂.....	58
Figura 30: Gráficos da fração de mistura para “oxyfuel”	59
Figura 31: Perfis de temperatura e das espécie CO₂ e O₂ para “oxyfuel”.....	60
Figura 32: Fração média de mistura para o hidrogênio.....	62
Figura 33: Perfil de temperatura e vetores velocidade para o hidrogênio	63
Figura 34: Fração média de mistura pela temperatura para combustão do gás de síntese..	64
Figura 35: Perfil de temperatura e fração média de mistura para o gás de síntese..	65
Figura 36: Velocidade na direção z e fração mássica de CO₂ para o gás de síntese.	66

Lista de Símbolos

Caracteres gregos maiúsculos

ΔV – volume do volume de controle

Caracteres gregos minúsculos

β – coeficiente da função β -PDF

$\delta(x)$ – função delta de Dirac

ε – dissipação da energia cinética turbulenta

u_i – variável aleatória que segue uma distribuição Gaussiana, $i = 1, 2$ e 3

λ – condutividade térmica

μ – viscosidade molecular ou dinâmica

μ_t – viscosidade turbulenta

ρ – massa específica

σ_ε – número de Prandtl para a dissipação da energia cinética turbulenta

σ_h – número de Prandtl para a entalpia

σ_k – número de Prandtl para a energia cinética turbulenta

σ_t – número de Prandtl turbulento

τ_{ij} – tensor das tensões em coordenadas cartesianas

τ_p – escala de tempo de relaxação das partículas

φ – relação entre as frações mássicas de combustível e de oxidante

ψ – variável genérica

$\dot{\omega}_k$ – taxa de produção/consumo da espécie química k , $k = 1, \dots, K$

Caracteres latinos maiúsculos

$C_{1\varepsilon}$ – parâmetro de ajuste do modelo k - ε Padrão

$C_{2\varepsilon}$ – parâmetro de ajuste do modelo k - ε Padrão

$C_{3\varepsilon}$ – constante de ajuste do termo fonte de dissipação de energia cinética turbulenta

C_μ – parâmetro de ajuste do modelo k - ε Padrão

C_d – parâmetro de ajuste da equação de transporte da variância da fração de mistura

C_g – parâmetro de ajuste da equação de transporte da variância da fração de mistura

Le – tamanho característico de um turbilhão

Le – número de Lewis

\dot{m}_y – fluxo mássico na face y

Ma – número de Mach

M_k – massa molar da espécie química k , $k = 1, \dots, K$

Nl – fluxo molar de combustível

$P(\psi)$ – função densidade de probabilidade de ψ

P_Γ – pressão calculada no nó da célula

Pr – número de Prandtl

Re – número de Reynolds

Ru – constante universal dos gases perfeitos

S_ψ – termo fonte da variável ψ

$S_{\psi a}$ – parte implícita do termo fonte linearizado de ψ

S_b – parte explícita do termo fonte linearizado de ψ

S_c – parte explícita do termo fonte de ψ

S_{ij} – tensor deformação em coordenadas cartesianas

T – temperatura da mistura

T_0 – temperatura de referência empírica

T_t – escala de tempo integral da turbulência

U – componente axial da velocidade média

Y_k – fração mássica da espécie química k , $k = 1, \dots, K$

Caracteres latinos minúsculos

c_p – calor específico sensível para a mistura

$c_{p,k}$ – calor específico sensível para a espécie química k , $k = 1, \dots, K$

f – fração de mistura

f_{st} – fração de mistura estequiométrica

\vec{g}/g_i – vetor aceleração da gravidade/componente cartesiana na direção i , $i = 1, 2$ e 3

h – entalpia específica da mistura / coeficiente de transferência de calor por convecção

k – energia cinética turbulenta

nk – número de moles da espécie química k , $k = 1, \dots, K$

p – pressão

s – razão mássica, estequiométrica, de oxidante/combustível

t – tempo

\vec{u}/u_i – vetor velocidade / componente cartesiana na direção i , $i = 1, 2$ e 3

u_γ – componente da velocidade perpendicular a face γ de uma célula

\vec{x} – vetor deslocamento

x_i – comprimento em coordenadas cartesianas

Caracteres de outra origem

∞ – infinito

Operadores

Δ – diferença

$\frac{d}{dt}$ – derivada total em relação a t

$\frac{\partial}{\partial t}$ – derivada parcial em relação a t

Σ – somatória

\int – integral

$\overline{(\cdot)}$ – média de Favre

$\overline{(\cdot)}$ – média de Reynolds / média de conjunto

$\overrightarrow{(\cdot)}$ – vetor

- $(\cdot)''$ – flutuação turbulenta proveniente da média de Favre
- $(\cdot)'$ – flutuação turbulenta proveniente da média de Reynolds
- $(\cdot)''^2$ – variância

Índices subscritos

- $(\cdot)_1$ – região de concentração máxima de combustível
- $(\cdot)_0$ – região de concentração máxima de oxidante
- $(\cdot)_\gamma$ – faces de uma célula cartesiana, $\gamma = b, t, w, e, s, n$
- $(\cdot)_f$ – combustível
- $(\cdot)_{ox}$ – oxidante

Siglas

- CFD – *Computational Fluid Dynamics*
- LETE – Laboratório de Engenharia Térmica e Ambiental
- PDF – *Probability Density Function*
- RANS – *Reynolds Averaged Navier-Stokes*
- RSM – *Reynolds Stress Model*
- TIT – *Turbine Inlet Temperatur*
- IPCC – *Intergovernmental Panel on Climate Change*
- CCS – *Carbon Capture and Storage*
- MEA – *Monoetanolamina*
- MDEA – *Metildietanolamina*
- DEA – *Dietanolamina*
- IGCC – *Integrated Gasification Combined Cycle*
- SMR – *Steam Methane Reforming*
- ATR – *Autothermal Reforming*
- EGR – *Exhaust Gas Recirculation*
- HRSG – *Heat Recovery Steam Generator*
- PCI – *Poder Calorífico Inferior*

Espécies químicas

CO – monóxido de carbono

CO₂– dióxido de carbono

C₃H₈– propano

H₂O– água

H₂– hidrogênio

O₂– oxigênio

N₂– nitrogênio

SUMÁRIO

1. Introdução	15
2. Revisão bibliográfica	19
2.1. Análise numérica de câmara de combustão	19
2.2. Métodos de captura e armazenamento de CO ₂	20
2.3. Recirculação de gases de escape (EGR).....	23
2.4. “Oxyfuel”	26
2.5. Gás de síntese	28
3. Metodologia	30
4. Modelos	32
4.1. Equações de conservação	32
4.2. Método dos volumes finitos.....	33
4.3. Modelos de turbulência	34
4.4. Modelo de combustão turbulenta.....	37
4.5. Geração de malhas.....	38
5. Resultados.....	40
5.1. Condições de contorno.....	41
5.2. Análise da câmara em condição padrão	42
5.3. Recirculação de 40% dos gases de escape	51
5.4. Simulação com “oxyfuel”	56
5.4.1. Análise da diferença entre as propriedades do N ₂ e do CO ₂ :.....	58
5.5. Hidrogênio	62
5.6. Gás de síntese	64
6. Conclusão.....	67
7. Referências bibliográficas	69

1. Introdução

A utilização de micro turbinas 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, aplicadas também as micro turbinas a gás, como a utilização de hidrogênio e de gás de síntese, 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.

Devido a este fato soluções estão sendo pesquisadas para melhorar a eficiência e para diminuir as emissões desses processos que envolvam a queima de tais combustíveis. Neste trabalho, uma análise de algumas alternativas foi realizada com uma câmara de combustão desenvolvida por Heitor (1985), a qual será apresentada posteriormente neste relatório. Este trabalho poderá ainda servir como um futuro projeto para inserir a micro turbina de 5kW de potência do Laboratório de Engenharia Térmica e Ambiental (LETE) da Escola Politécnica da USP num cenário que limita cada vez mais as emissões de gases poluentes. Além disso, o presente estudo foi realizado em conjunto com um trabalho do Professor Carlos Alberto Gurgel Veras do departamento de engenharia mecânica da Universidade de Brasília (UnB).

A principal forma de redução nas emissões do principal causador do efeito estufa, o CO₂, são as tecnologias de captura e armazenamento de CO₂ (Carbon Capture and Storage - CCS). Para implementar estas novas tecnologias de forma eficiente e com baixo investimento são necessárias algumas modificações nos modelos atuais de micro turbinas a gás. Três boas alternativas para isso seriam a utilização da recirculação de gases de escape para aumentar as concentrações finais de CO₂, facilitando, assim, o processo posterior de captura e seqüestro deste, da mesma maneira utilizando-se o “oxyfuel”, no qual ocorre somente a combustão com oxigênio, tornado o CO₂ facilmente retirado dos gases de combustão através da condensação da água, e por último, pode-ser utilizar combustíveis novos, como o gás de síntese, formado principalmente por hidrogênio e monóxido de carbono a partir da gaseificação de combustíveis sólidos, e que pode ainda fazer parte de um processo de captura de carbono antes da queima na câmara de combustão.

Este trabalho tem como objeto de estudo a análise numérica do escoamento reativo de uma câmara de combustão de micro turbinas a gás, utilizando as alternativas encontradas para a diminuição de emissão, através do uso da fluido dinâmica computacional (CFD) e o auxílio do software FLUENT®. O objetivo do presente relatório é analisar a utilização destas novas tecnologias, avaliando, através dos resultados obtidos, o aumento da concentração de CO₂ nos gases de saída e os perfis de temperaturas destes processos, além de realizar uma análise prévia sobre possíveis problemas da combustão, como a instabilidade. Para isso uma boa análise dos modelos computacionais a serem utilizados será feita, como analisar os mais compatíveis modelos de turbulência, mecanismos de reações e modelos de combustão, levando em conta, além da precisão dos resultados, os gastos computacionais e o período determinado para o projeto. Os dados da análise numérica, que podem fornecer importantes informações sobre o processo em questão, como a distribuição de temperaturas e concentrações de gases deverão ser comparados e comprovados posteriormente com análises experimentais realizadas com uma micro turbina.

Câmara de combustão

Neste capítulo serão mostradas algumas informações sobre a micro turbina utilizada como referência a este projeto e seu funcionamento. Essas informações serão posteriormente utilizadas para compatibilizar os resultados obtidos nas simulações envolvendo a câmara de combustão estudada com os parâmetros dos gases utilizados nesta turbina em questão.

A micro-turbina a gás tem como base o ciclo ideal de Brayton. O ciclo se constitui das seguintes etapas: primeiramente o ar atmosférico passa pelo compressor, onde ocorre compressão adiabática e isentrópica, com aumento de temperatura e entalpia. O ar então é direcionado para a câmara de combustão, onde ocorre a combustão do combustível e o aumento de temperatura à pressão constante. Ao sair da câmara, os gases a alta pressão e temperatura, se expandem na turbina, onde ocorre a conversão em trabalho de eixo, acionando o compressor e eventualmente gerando energia (Wyllen et al., 2003). Um esquema deste ciclo está representado na Figura 1.

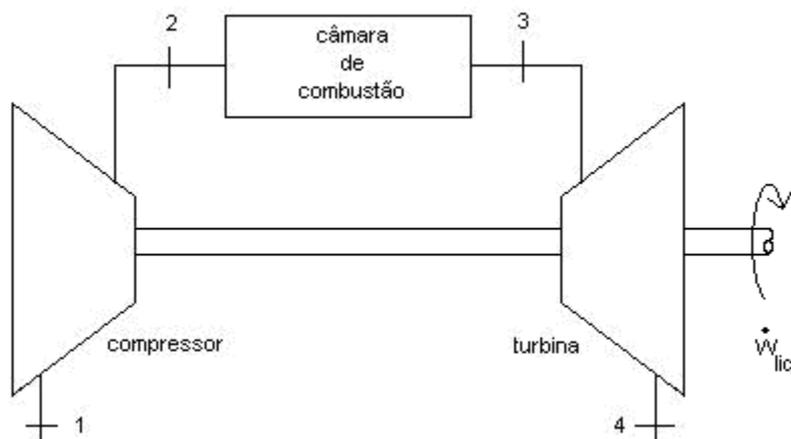


Figura 1: Representação do ciclo Brayton para turbinas a gás

A câmara de combustão, objeto de estudo deste trabalho é constituída dos seguintes componentes:

- *Liner*
- *Casing*
- *Swirler*

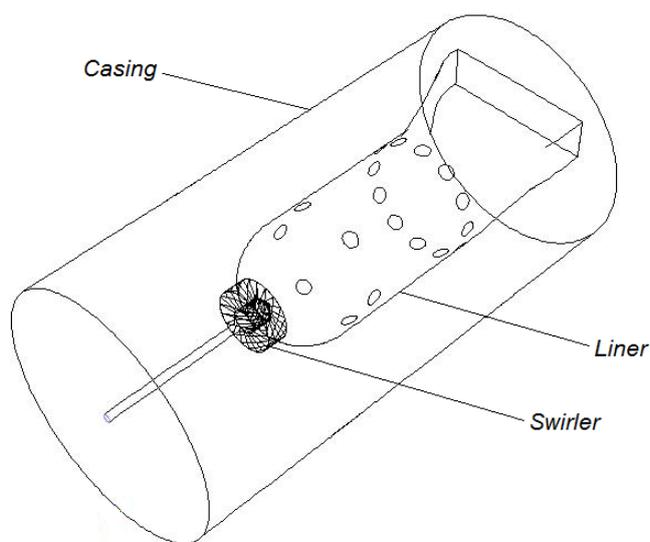


Figura 2: Esquema da câmara de combustão

Além dessas peças, há também o bico injetor de combustível, o qual não é mostrado no esquema da câmara, na Figura 2. 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), que é 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). Esta forma com a qual o ar escoava através do *liner*, propicia o resfriamento deste, evitando desta forma, seu desgaste.

2. Revisão bibliográfica

2.1. Análise numérica de câmara de combustão

Primeiramente foram analisados outros trabalhos, nos quais o objetivo era a simulação numérica de uma câmara de combustão de turbinas a gás. Estes estudos podem fornecer uma boa metodologia, que será mais bem explicada no próximo capítulo, para este trabalho. Bajer, Kwiatkowski e Wedolowski (2007) realizaram a análise numérica de uma câmara de combustão de uma turbina a gás que utiliza gás de síntese como combustível. O gás de síntese é um produto da gaseificação da biomassa e apresenta como principais componentes o nitrogênio (N_2), monóxido de carbono (CO) e hidrogênio (H_2). Com essa análise pretendia-se otimizar as combinações das emissões de CO e óxidos de nitrogênio (NO_x), as quais possuem grande dependência na temperatura de combustão, já que elevadas temperaturas levam à uma produção alta de NO_x e baixas temperaturas à de CO. Outro objetivo era a análise da turbulência causada na câmara, que aumenta a qualidade da mistura. Dois métodos foram realizados em paralelo, um utilizando o software comercial FLUENT® e outro o OpenFoam, e foram comparados uma com a outra. A estratégia para as simulações foi utilizar duas análises, a primeira observando apenas o escoamento sem as reações químicas presentes na câmara, e a segunda observando as reações químicas do combustível. Os modelos utilizados nas ferramentas de CFD foram o modelo de frações de misturas, o modelo de turbulência RANS κ - ϵ e o mecanismo detalhado de reações GRI-Mesh 3.0.

Como base para este trabalho, também poderá ser utilizado o artigo de Gobbato, Lazzaretto, Masi e Toffolo (2010), no qual é apresentada uma simulação numérica de uma câmara de combustão de uma turbina a gás utilizando hidrogênio. A utilização do hidrogênio é justificada pelo aumento dos preços de combustíveis fósseis e pelo aumento das mudanças climáticas na atmosfera. Embora ocorra essa troca do meio combustível para propano (C_3H_8), o qual será utilizado na microturbina em questão, este artigo faz considerações importantes no que diz respeito à utilização do CFD para analisar as temperaturas encontradas no interior da câmara e na parede do *liner*. Para isso é empregado um mecanismo de reações

simplificado e uma malha tridimensional grosseira, minimizando a complexidade do modelo, mas buscando preservar as condições físicas básicas do escoamento reativo. O modelo de turbulência RANS é utilizado e para modelar a combustão, são empregados o modelo de equilíbrio químico para a combustão com o transporte da fração de mistura e sua variância. As paredes externas são consideradas adiabáticas. No artigo os resultados da simulação numérica são comparados com resultados experimentais avaliados por termopares, apresentando uma aproximação aceitável na análise da temperatura no interior da câmara pelos dois métodos.

2.2. Métodos de captura e armazenamento de CO₂

Nos trabalhos de Bajer, Kwiatkowski e Wedolowski (2007) e Gobbato, Lazzaretto, Masi e Toffolo (2010) o gás sintético e hidrogênio são utilizados, respectivamente, para diminuir o alto custo dos combustíveis fósseis e para diminuir os efeitos causados pela emissão de gases poluentes, como principalmente o CO₂. No caso deste estudo, o propano será utilizado como combustível, e como faz parte dos chamados combustíveis fósseis, tem em sua combustão um alto emissor de CO₂. Para diminuir estas, as tecnologias de captura e armazenamento de CO₂ podem ser empregadas.

Captura e armazenamento de CO₂ 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, possui grandes fontes de emissões de CO₂, e por isso é potencialmente um grande foco nas tecnologias CCS.

Essa tecnologia engloba todo o processo, desde a captura deste, seu transporte até o armazenamento, incluindo maneiras, monitoramento e verificação da segurança destas operações. Um dos grandes problemas na implementação de tais tecnologias, é o alto custo e a penalidade em eficiência energética provocada por tais processos. Portanto, uma combinação entre novos processos de geração de energia e diferentes tecnologias de captura é essencial para tornar o CCS uma realidade.

Os custos do processo de captura de CO₂ dependem de diversos fatores, incluindo os custos do próprio combustível, as características das plantas industriais

ou de geração de energia, o tamanho da planta de captura, as porcentagens de CO₂ capturados, as características do armazenamento e da distância requerida para o transporte. A captura de CO₂ a altas pressões e altas concentrações pode ser realizada com custos relativamente baixos. Em plantas de geração de energia elétrica os custos do CCS são representados em grande parte pela separação e compressão do CO₂, chegando a representar de 50 a 80% do custo total.

Naturalmente a ocorrência de CO₂ é utilizada para melhorar a recuperação de petróleo em alguns países, como EUA e Turquia, o mesmo, sendo que a mesma utilidade tem o produzido industrialmente, podendo aumentar em até 17%. Além disso, pode-se utilizar para recuperação de metano, armazenamento oceânico e em formações salinas. As primeiras tecnologias de CCS em larga escala para armazenamento de CO₂ foram realizadas de forma offshore nos anos 90 e de forma onshore em 2004. Grande parte dos desenvolvimentos desta área é desenvolvida pela indústria petrolífera (BERGER et al., 2006).

Os métodos de captura de CO₂ 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 já instaladas, somente uma planta de separação adicional. Alguns exemplos desses métodos são: captura por absorção baseado em solventes químicos como MEA (monoetanolamina), MDEA (metildietanolamina) e DEA (dietanolamina), e por captura através de membranas. Valores típicos de separação de 99,9% (volumétrico) são encontrados.
- 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 (o combustível é formado basicamente por hidrogênio, nitrogênio e vapor). Ex: *integrated gasification combined cycle (IGCC)*, *steam methane reforming (SMR)* e *autothermal reforming (ATR)*.

- Métodos oxy-fuel: o meio oxidante neste caso é o 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 . Ex: Looping químico, separação criogênica e membranas de transporte de oxigênio. Nos trabalhos de Bolland , Hammer e Keyser (2009), e Brix, Glarborg, Jensen e Toftegaard (2009) foram realizadas simulações em turbinas a gás com a utilização desses processos.

Estes três processos podem ser representados pela seguinte Figura 3:

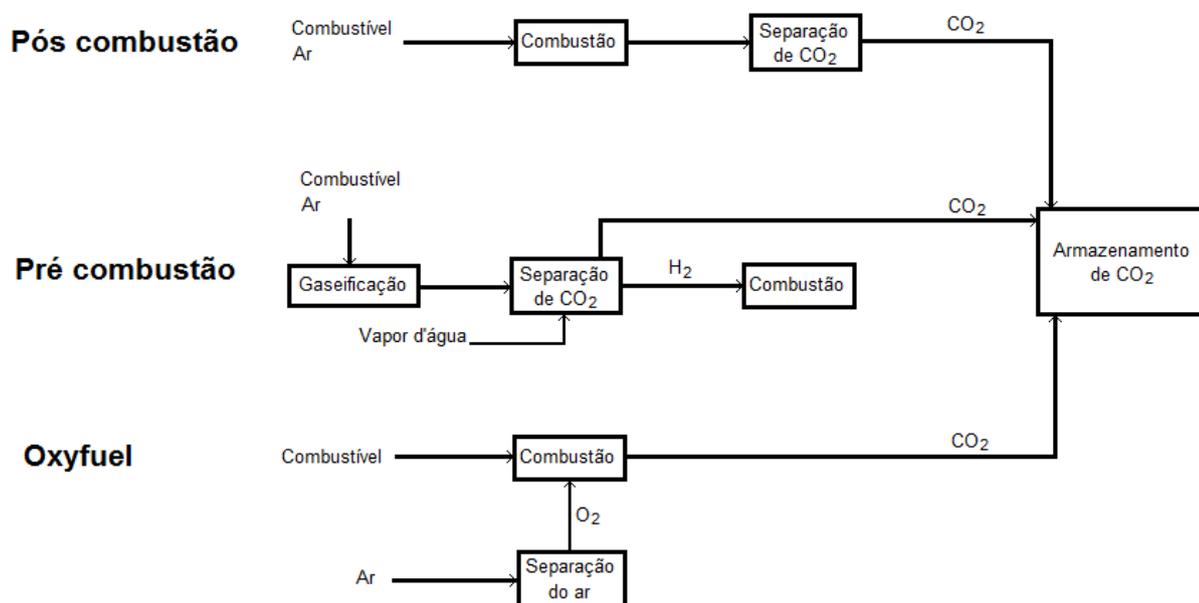


Figura 3: Processos para a captura e armazenamento de CO_2

Vários estudos já foram feitos para implementar tais sistemas em turbinas a gás. No estudo de Bolland, Jordala e Kvamsdal (2009), foi realizada uma comparação quantitativa entre nove ciclos de turbina a gás que utilizam diferentes métodos de captura de CO_2 . Seis variações do método oxy-fuel, dois utilizando o método de pré-combustão e um de pós-combustão. Nestes estudos foram encontrados níveis de captura de CO_2 que chegaram a níveis muito próximos a 100%, reduzindo assim, a emissão de CO_2 à praticamente zero.

2.3. Recirculação de gases de escape (EGR)

Como neste estudo pretende-se utilizar o propano como combustível, a alternativa mais adequada para captura de CO₂ seria os métodos de pós-combustão, pois não requerem nenhuma alteração no processo já instalado.

A tecnologia de separação e purificação de CO₂ por absorção é, como já tratado, um processo de pós-combustão. Ele é 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 (Absorber) e no outro a dessorção (Stripper) e separação do CO₂ (Figura 4).

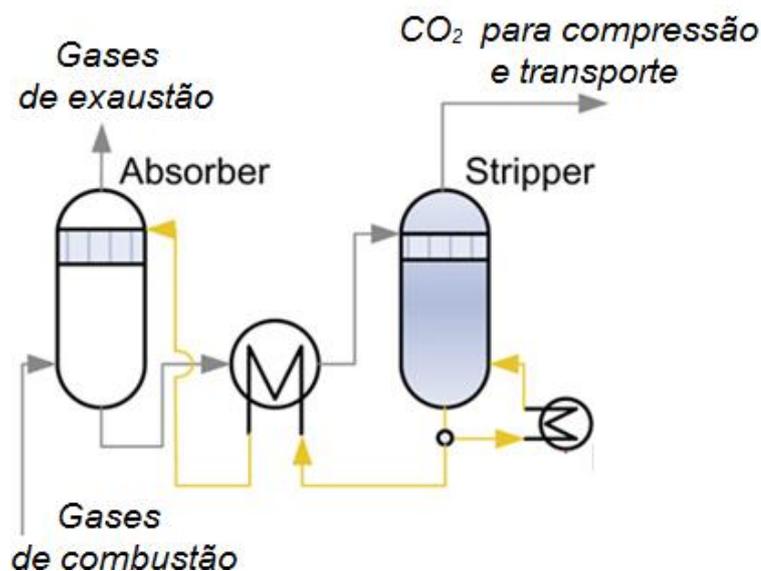
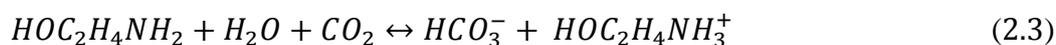
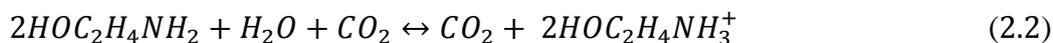
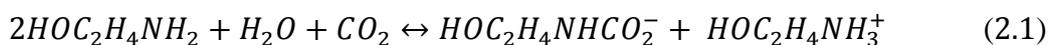


Figura 4: Processo de separação de CO₂ com MEA

O processo de absorção é representado pelas equações (2.1), (2.2) e (2.3), quando a MEA (monoetanolamina) é utilizado como absorvente:



Para melhorar os processos de CCS, diminuindo as perdas de eficiência nas plantas de captura de CO₂ e diminuindo o tamanho delas, podem-se aumentar as concentrações de CO₂ 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 CO₂, aumentando assim a eficiência da captura. Entre elas está o processo de recirculação de gases de escape. A utilização do EGR implicou num aumento na concentração molar de CO₂ de 3,8% para no mínimo 10%, e apresentou a melhor eficiência elétrica entre as quatro alternativas. A eficiência elétrica foi avaliada no caso, considerando o uso da separação por absorção química, utilizando uma base de amina. Um esquema desta análise pode ser vista na Figura 5:

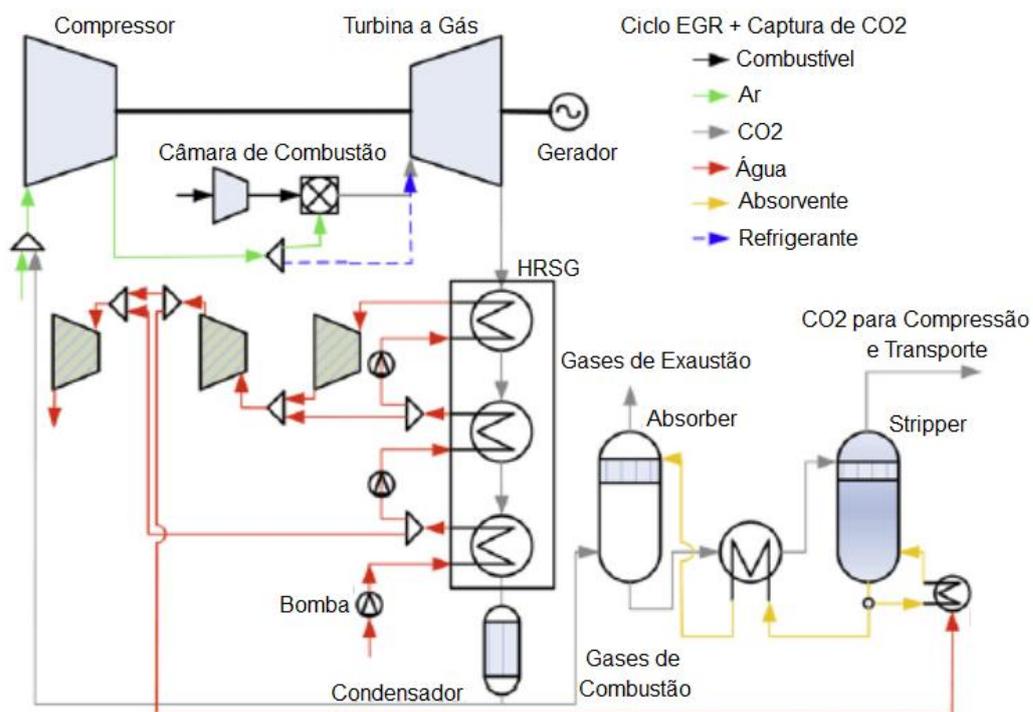


Figura 5: Esquema de turbina a gás utilizando EGR e processo de captura pós-combustão.

Este ciclo foi feito utilizando o HRSG (*Heat Recovery Steam Generator*), ou recuperador de calor para geração de vapor, que utiliza o calor dos gases de escape para aquecer a água que alimentará outras turbinas. Segundo Berstad, Ditaranto e Hailong (2010), o nível de recirculação de gases de escape não pode exceder 60%, na

qual a combustão é realizada estequiometricamente. Porém a concentração de oxigênio presente no oxidante deve ser levada em conta, e estudos mostraram que taxas de EGR acima de 35% são difíceis de serem obtidas, por reduzir as taxas de reações, e reduzir a temperatura de chama. Por outro lado baixas concentrações de CO_2 são benéficas para diminuir a emissão de óxidos de nitrogênio, que dependem do O_2 e da temperatura de chama para serem formados. Numa taxa de 35% de EGR as emissões de tais óxidos são reduzidas em mais de 50%. Neste mesmo artigo, o autor indica uma diminuição do fluxo mássico na entrada da turbina, devido, provavelmente, a uma maior temperatura dos gases de recirculação (provenientes do EGR), 40°C , do que do ar, 15°C . Uma menor massa seria necessária quando parte do ar frio fosse substituída por ar quente (ver Figura 6). Mas isso não levaria a nenhuma mudança no maquinário para a utilização.

Para diminuir os problemas causados pela recirculação de gases de combustão, como estabilidade de chama e emissões de CO , quando utilizado CH_4 como combustível, pode-se utilizar espécies reativas, como o hidrogênio ou gás sintético, não comprometendo a eficiência na geração de energia, como pode ser encontrado nos estudos feitos por Clemens, Griffin, Jansohn, Mantzaras e Marechal (2011).

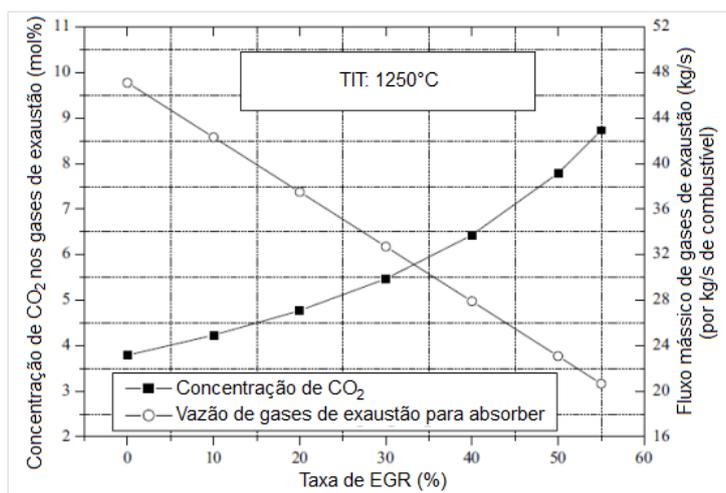


Figura 6: Concentração de CO_2 com aumento da taxa de EGR.

2.4. “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 é apresentado na Figura 7.

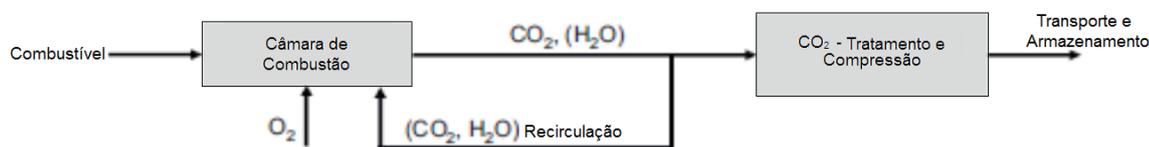


Figura 7: Princípio da combustão “oxyfuel”.

O processamento de combustível depende da sua fonte. Para o caso de gás (como o propano em questão), processos mínimos são requeridos além da compressão deste para a pressão de linha requerida da câmara. Para combustíveis sólidos (carvão, coque, biomassa), é necessário convertê-lo primeiramente em gás de síntese em um gaseificador através do uso de oxigênio. Este gás passa, então, por um sistema de lavagem, onde impurezas são retiradas, como espécies de enxofre, cinzas, amônia, etc., e é comprimido para a câmara de combustão.

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” trabalham com temperaturas mais elevadas do que os sistemas convencionais de combustão, pois ocorre uma combustão somente com o O_2 . Para diminuir esta temperatura, uma recirculação de gases é utilizada, sendo composta basicamente por H_2O e CO_2 , o que promove uma diluição do O_2 , diminuindo assim, a temperatura dos gases na combustão.

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% CO_2 (em massa), segundo Anderson, MacAdam e Viteri (2008). Uma planta de

“oxyfuel” para geração de energia com este sistema pode ser representada pela Figura 8:

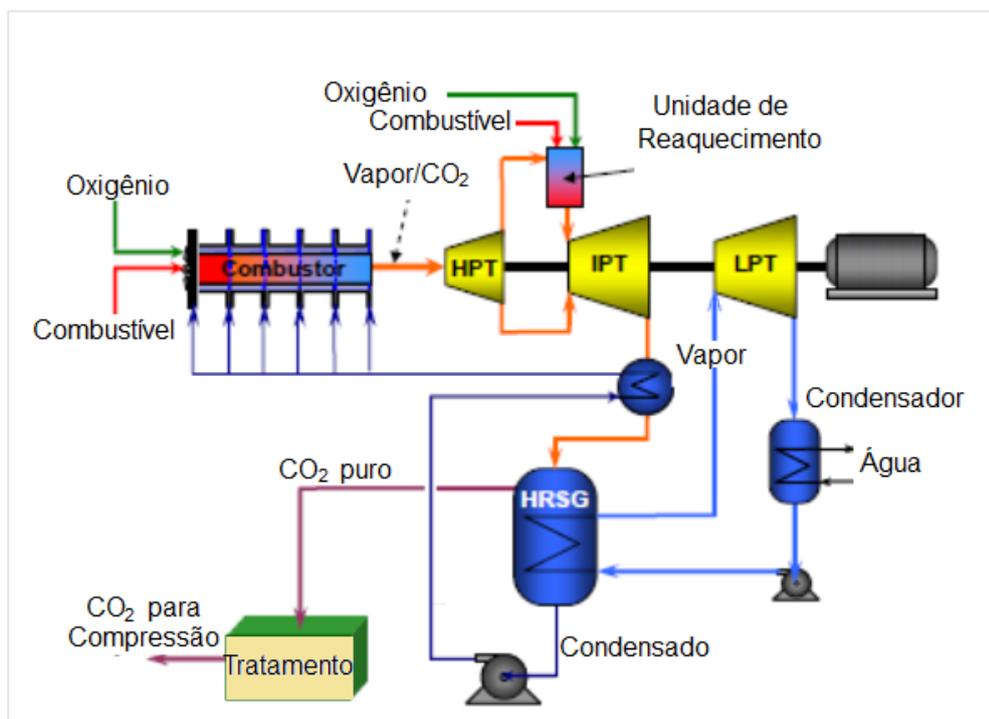


Figura 8 Planta “oxyfuel” de geração de energia

Outra vantagem de se utilizar o “oxyfuel”, é a alta redução das espécies NO_x , justamente pela ausência do nitrogênio no oxidante. Tanto as formações de NO_x , causadas pela alta temperatura ou pela presença no combustível, foram reduzidas neste processo (KOBAYASHI, et al., 2005).

2.5. 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.

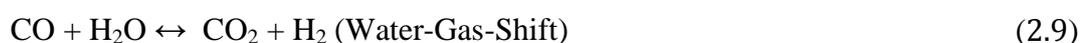
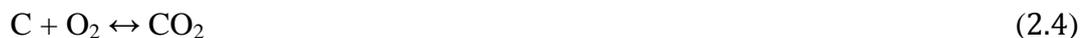
O gás de síntese foi primeiramente produzido como um produto intermediário do processamento da biomassa, que apesar de um baixo valor calorífico, está se tornando cada vez mais atraente como alternativa para a indústria de energia. Hoje em dia, grande parte deste combustível é produzida principalmente 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% H₂ 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 NO_x e CO.

A gaseificação vem se tornando uma alternativa muito eficiente para a produção de energia. Um processo que está sendo muito desenvolvido no momento é o IGCC ou Ciclo Combinado com Gaseificação Integrada (Integrated Gasification Combined Cycle – IGCC), que combina duas tecnologias: a geração de energia em ciclo combinado e a gaseificação de combustíveis sólidos ou líquidos. O ciclo combinado se destaca por sua alta eficiência, chegando a valores de 59%, contra 40% de termelétricas a gás em ciclo simples (HOFFMANN, 2010).

Além do aproveitamento da alta eficiência da tecnologia do ciclo combinado, tem-se a utilização de combustíveis com reservas ainda consideráveis nos principais

mercados consumidores, e com preço baixo e estável. A maioria das plantas instaladas utiliza oxigênio como oxidante, o que leva à necessidade de adição de uma unidade de separação de ar. As reações de gaseificação são as seguintes:



O grande interesse em IGCC se dá por causa da sua maior capacidade para adicionar sistemas de captura e seqüestro de carbono (Carbon Capture and Storage – CCS), já que ele, por si só, como alternativa de geração de energia, tem um custo muito mais elevado devido a sua complexidade.

Para combinar um Ciclo Combinado com Gaseificação Integrada a um processo de CCS, a planta deverá conter os seguintes itens:

- A unidade para a reação Water-Gas-Shift (WGS), onde CO reage com H₂O, gerando H₂ e CO₂.
- A unidade de remoção de CO₂.

Em plantas IGCC com captura de CO₂, após o processo de remoção do CO₂, o gás combustível contém quase exclusivamente H₂. Embora a realização da captura de carbono em termelétricas necessita instalações adicionais de separação de gás, que provocam um aumento dos custos e do consumo interno de energia da planta, o IGCC é um processo de conversão em que a remoção de CO₂ exige menos energia que em termelétricas convencionais.

3. Metodologia

Este trabalho tem como objetivo a análise numérica de uma câmara de combustão, utilizando as tecnologias apresentadas acima através da ferramenta de CFD FLUENT®:

- Recirculação de gases de escape: utilizando parte dos gases de exaustão como oxidante na câmara;
- “oxyfuel”: uso de oxigênio como oxidante;
- Hidrogênio: utilizando o produto final de um IGCC, ou seja, hidrogênio como combustível;
- Gás de síntese.

A análise numérica possibilitará avaliar perfis de temperatura durante o processo de combustão e as concentrações de CO₂ na saída, que deve apresentar um aumento para posterior utilização de um processo de CCS, e para o caso do gás de síntese avaliar a combustão com hidrogênio puro na câmara.

Primeiramente uma revisão bibliográfica foi feita nos temas de captura e armazenamento de carbono, visando às aplicações já existentes em turbinas e micro turbinas a gás, e a utilização da recirculação de gases de escape para auxiliar tais processos.

Depois de verificar o interesse nesse assunto, os modelos que serão adotados neste trabalho para a simulação numérica serão explicados, como os modelos de turbulência, de reação química, de trocas de calor, assim como os fundamentos de mecânica dos fluídos e apresentação das equações de transporte utilizadas como base do projeto.

Para realizar a simulação numérica, uma malha tridimensional da câmara de combustão foi aproveitada de uma análise desenvolvida pelo Professor Carlos Alberto Gurgel Veras do departamento de engenharia mecânica da Universidade de Brasília (UnB). Esta malha representa o domínio computacional, no qual as equações de transporte serão resolvidas pelo programa computacional. Primeiramente uma geometria em CAD da câmara foi desenvolvida e no programa GAMBIT® da Ansys,

foi realizada uma malha que dividiu essa geometria em vários elementos de menor tamanho a ser exportada para o programa FLUENT®.

A câmara de combustão em questão tem o mesmo perfil da utilizada no trabalho de Heitor (1985), e foi utilizada neste trabalho por haver dados experimentais que possam comprovar as simulações numéricas do software FLUENT®. Esta câmara de combustão será, nos próximos capítulos, melhor detalhada.

Uma estratégia para analisar numericamente o escoamento reativo na câmara de combustão com EGR seria, inicialmente, adotar grandes valores de CO_2 como concentrações de entrada na câmara, que representaria uma alta taxa de EGR (aproximadamente 40%). Esse alto valor de CO_2 provoca uma diminuição da concentração de O_2 , porque os gases estão a uma temperatura maior que o ar, então uma menor quantidade de gases é necessária para atingir a temperatura ideal na entrada da turbina. Este valor de concentração do oxigênio pode ser aproximado por 16% (mol), analisado o trabalho de Berstad, Ditaranto e Hailong (2010), pois ocorrendo uma reação com valores abaixo desse, a combustão apresenta grandes concentrações de hidrocarbonetos ainda não oxidados e de CO. Este valor seria então aumentado gradativamente até se obter temperaturas adequadas de chama, e uma melhor combustão.

Para analisar a câmara de combustão utilizando o “oxyfuel”, uma estratégia inicial seria 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 maneira seria seguir a metodologia apresentada no trabalho de Gobbato, Lazzaretto, Masi e Toffolo (2010), no qual se realiza reações na câmara com hidrogênio puro como combustível.

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 com uma única reação global e tratamento estatístico das reações turbulentas feitas por funções do tipo β -PDF. Estes modelos serão mais bem detalhados na próxima etapa do projeto.

4. 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 capítulo 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.

4.1. Equações de Conservação

Um problema de escoamento deve obedecer às seguintes equações de conservação:

- Conservação da massa;
- Conservação da quantidade de movimento (segunda lei de Newton);
- Conservação de energia: Taxa de variação da energia é 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);
- Conservação das espécies químicas.

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

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \text{div}(\rho \phi \vec{u}) = \text{div}(\Gamma \text{div} \phi) + S_{\phi} \quad (4.1)$$

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).

4.2. 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.

Existem três principais métodos de solução numérica das equações, que possuem diferenças na forma de discretização do problema:

- diferenças finitas
- elementos finitos
- método dos volumes finitos.

O método dos volumes finitos é aplicado na Fluido Dinâmica Computacional, no qual a geometria do problema é dividida em um grande número 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 (bidimensionais ou unidimensionais – Figura 9) que dividem a geometria. Estas equações são, então, discretizadas resultando em um sistema de equações algébricas que é, então, resolvido por um método numérico convenientemente escolhido.

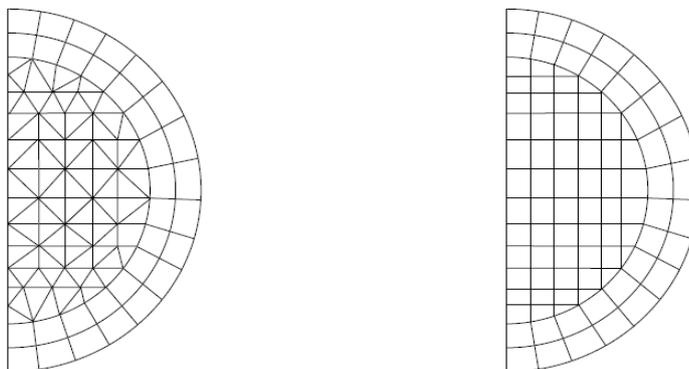


Figura 9: Volumes finitos para malha bidimensional.

4.3. Modelos de turbulência

O escoamento reativo turbulento na câmara de combustão pode ser descrito pelo modelo de turbulência RANS (*Reynolds-Averaged Navier-Stokes*).

A conservação de massa é dada pela seguinte expressão:

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{u}_i) = 0 \quad (4.2)$$

Onde $\bar{\rho}$ é a densidade média no tempo da mistura, t é o tempo e \tilde{u}_i é o vetor média de Favre de velocidades.

As equações de Navier-Stokes com médias de Reynolds (RANS) em um tensor cartesiano são representadas por:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{u}_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j) = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mu \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} \right) + \frac{\partial}{\partial x_j} (-\overline{\rho u''_i u''_j}) \quad (4.3)$$

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

$\tau_{ij}^t = -\overline{\rho u''_i u''_j}$, 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, devido ao swirler na entrada 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 as tensões de Reynolds, resultando na seguinte equação:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j) + \frac{\partial}{\partial x_k} (\bar{\rho} \tilde{u}_k u_i'' u_j'') \\ = \frac{\partial}{\partial x_k} (-T_{kij}) + \frac{\partial}{\partial x_m} \left(\mu \frac{\partial (u_i'' u_j'')}{\partial x_m} \right) + P_{ij} + \Pi_{ij} - \varepsilon_{ij} \end{aligned} \quad (4.4)$$

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.

O fluxo tensão de Reynolds é modelado baseando-se na aproximação do gradiente de difusão:

$$\frac{\partial}{\partial x_k} (-T_{kij}) = \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\frac{\mu_t}{\sigma_t} \frac{\partial (\overline{u'_i u'_j})}{\partial x_k} \right) \quad (4.5)$$

Onde μ_t é a viscosidade turbulenta e $\sigma_t=1,0$. A viscosidade turbulenta é relacionada com a energia cinética turbulenta κ e taxa de dissipação ε :

$$\mu_t = C_\mu \rho \frac{\kappa^2}{\varepsilon} \quad (4.6)$$

O valor padrão de $C_\mu = 0,09$ é utilizado. A energia cinética de turbulência κ é metade do traço do tensor tensão turbulenta.

A taxa de dissipação ε é modelada com a seguinte equação de transporte:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \varepsilon) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\tilde{u}_i \varepsilon) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_e} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_i} \right] + C_{1\varepsilon} \frac{1}{2} \frac{\varepsilon}{\kappa} P_{ii} - C_{2\varepsilon} \bar{\rho} \frac{\varepsilon^2}{\kappa} \quad (4.7)$$

Onde $C_{1\varepsilon} = 1,44$, $C_{2\varepsilon} = 1,92$ e $\sigma_e = 1,3$.

A taxa de produção de turbulência, τ_{ij}^t é calculada pela equação:

$$P_{ij} = \left(\tau_{im}^t \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_m} + \tau_{im}^t \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_m} \right) \quad (4.8)$$

Sobre a suposição de turbulência homogenia, o tensor gradiente velocidade-pressão Π_{ij} é reduzido no tensor pressão-deformação, Φ_{ij} , definido por:

$$\Phi_{ij} = \frac{p'}{\rho} \left(\frac{\partial u'_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u'_j}{\partial x_i} \right) \quad (4.9)$$

O termo pressão-deformação Φ_{ij} é decomposto em três componentes:

$$\Phi_{ij} = \Phi_{ij,1} + \Phi_{ij,2} + \Phi_{ij,3} \quad (4.10)$$

Onde $\phi_{ij,1}$ é conhecido retorno da isotropia, $\phi_{ij,2}$ pressão-deformação e $\phi_{ij,3}$ é o reflexão da parede.

$$\phi_{ij,1} = C_1 \rho \frac{\varepsilon}{\kappa} \left[u'_i u'_j - \frac{2}{3} \delta_{ij} \kappa \right] \quad (4.11)$$

Com $C_1 = 1,8$.

$$\phi_{ij,1} = -C_2 \left[(P_{ij} - C_{ij}) - \frac{2}{3} \delta_{ij} \left(\frac{1}{2} P_{kk} - \frac{1}{2} C_{kk} \right) \right] \quad (4.12)$$

Com $C_2 = 0,6$ e $C_{ij} = \frac{\partial y}{\partial x_k} (\bar{\rho} \widetilde{u}_k u''_i u''_j)$.

O termo de reflexão de parede considera a redistribuição de tenões normais próximas a parede. Este termo é modelado assim:

$$\begin{aligned} \phi_{ij,w} = C'_1 \frac{\varepsilon}{\kappa} \left[u''_k u''_m n_k n_m \delta_{ij} - \frac{3}{2} u''_i u''_k n_j n_k - \frac{3}{2} u''_j u''_k n_i n_k \right] \frac{C_l \kappa^{\frac{3}{2}}}{\varepsilon d} \\ + C'_2 \left[\phi_{km,2} n_k n_m \delta_{ij} - \frac{3}{2} \phi_{ik,2} n_j n_k - \frac{3}{2} \phi_{jk,2} n_i n_k \right] \frac{C_l \kappa^{\frac{3}{2}}}{\varepsilon d} \end{aligned} \quad (4.13)$$

Onde $C'_1 = 0,5$, $C'_2 = 0,3$, n_k é o componente x_k normal a parede, d é a distância normal a parede, e $C_l = \frac{C_\mu^{\frac{3}{4}}}{\kappa}$ e $\kappa = 0,4187$.

Para evitar um refinamento da malha nas fronteiras sólidas, as chamadas funções de parede são utilizadas.

4.4. Modelo de combustão turbulenta

A combustão é modelada a partir de um modelo termoquímico baseado no modelo de escalar conservado (Malalasekera, 2007). Neste modelo, a fração de mistura é a variável transportada.

$$1\text{kg de combustível} + s\text{ kg de oxidante} \rightarrow (1 + s)\text{kg de produtos} \quad (4.14)$$

A partir de uma equação global genérica (4.14) define-se a fração e mistura f , como:

$$f = \frac{\varphi - \varphi_0}{\varphi_1 - \varphi_0} = \frac{(sY_f - Y_{ox}) - (sY_f - Y_{ox})_0}{(sY_f - Y_f)_1 - (sY_f - Y_{ox})_0} \quad (4.15)$$

Devido à sua definição, a equação de transporte para a fração de mistura média, f , não apresenta termo de fonte ou sorvedouro, sendo uma das principais utilidades deste modelo, e, assim, pode ser escrita como (Turns, 2000):

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}f) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}f) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu_t}{\sigma_t} \frac{\partial f}{\partial x_j} \right) \quad (4.16)$$

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).

4.5. Geração de Malhas

A geometria da câmara de combustão da micro turbina utilizada no estudo de Heitor (1985), a qual será avaliada inicialmente neste trabalho, encontra-se representada na Figura 10:

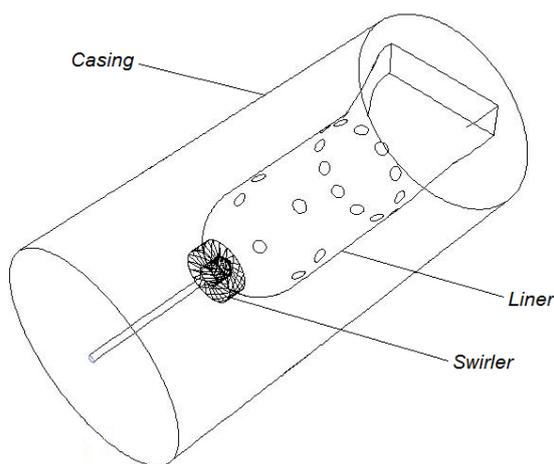


Figura 10: Geometria da câmara de combustão

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 dividido 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 (GAMBIT - Ansys)

A malha tridimensional da câmara de combustão da micro turbina utilizada no estudo de Heitor (1985) encontra-se representada na Figura 12. Ela foi gerada com cerca de 1.300.000,0 elementos, de forma estruturada, utilizando paralelepípedos retangulares. A malha foi desenvolvida desta maneira por ter sido construída em diversas partes. Pode-se perceber que foi adotado um maior refinamento da malha nas regiões do Swirler e dos furos de diluição, por representarem locais com maiores turbulências e velocidades (Figura 12 e Figura 13).

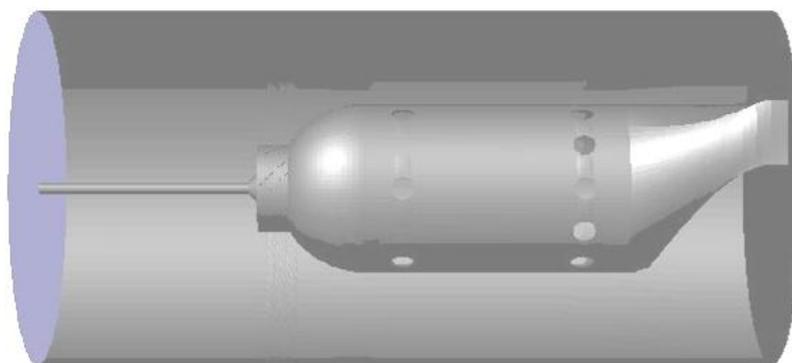


Figura 11: Malha 3D da câmara de combustão.

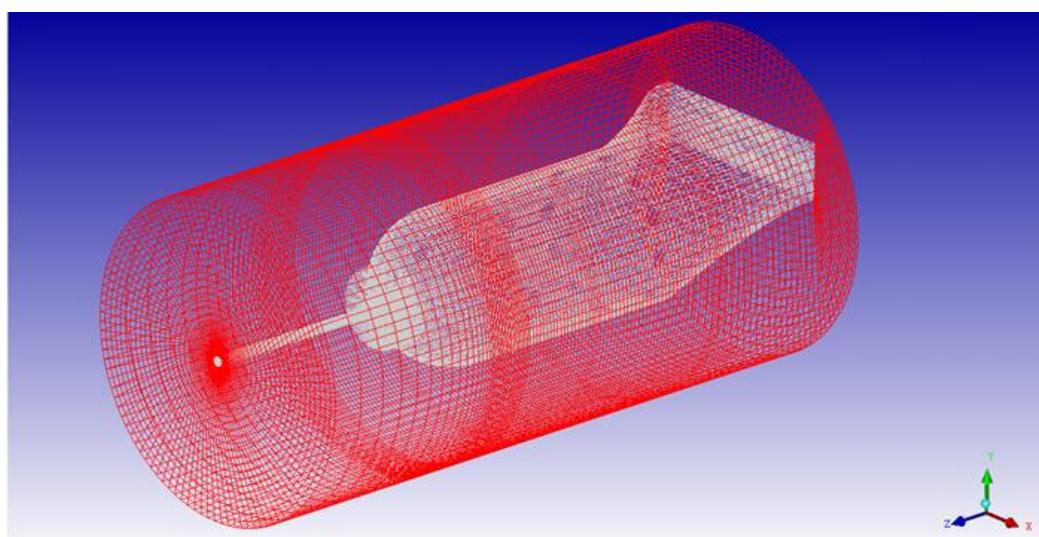


Figura 12: Malha tridimensional com os refinamentos nas diferentes partes.

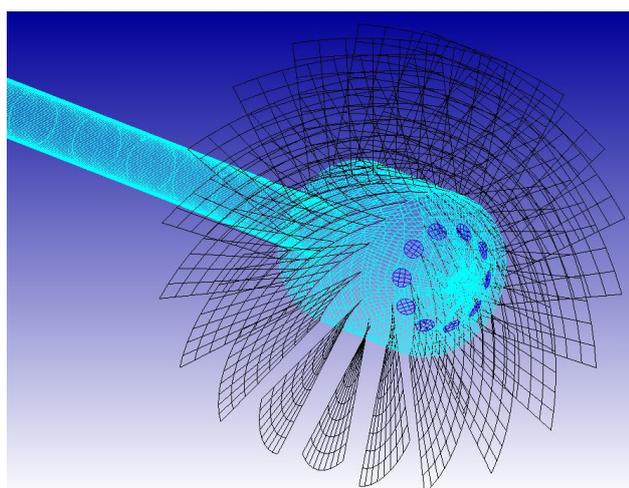


Figura 13: Detalhe da malha no *Swirler* e nos bicos injetores de combustível.

5. 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 para os seguintes casos:

- Condição Padrão, utilizando o propano como combustível e ar atmosférico como oxidante;
- Utilização de Recirculação de Gases de Escape para melhorar os processos de captura de carbono pós-combustão;
- Utilização do processo “*oxyfuel*” (oxi-combustão), com uma diluição utilizando CO₂, formando ar sintético como oxidante, também melhorando os processos de pós-captura de CO₂.
- Utilização do Hidrogênio como combustível, analisando a combustão após um processo de captura de carbono pré-combustão. (gaseificação e posterior captura de CO₂, tendo como produto final o H₂ como combustível.)
- Utilização do Gás de Síntese como combustível, produto da gaseificação sem um processo de pré-captura de CO₂, visando uma posterior captura.

5.1. Condições de contorno

As simulações realizadas neste trabalho possuem as seguintes condições de contorno, válidas para todos os casos apresentados neste capítulo:

Tabela 1: Condição de contorno das simulações

Posição	Entrada de oxidante	Entrada de Combustível
Energia Cinética Turbulenta (k)	0,18 m ² /s ²	25 m ² /s ²
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

As posições referidas na Tabela 1 são esquematizadas na geometria, na Figura 14:

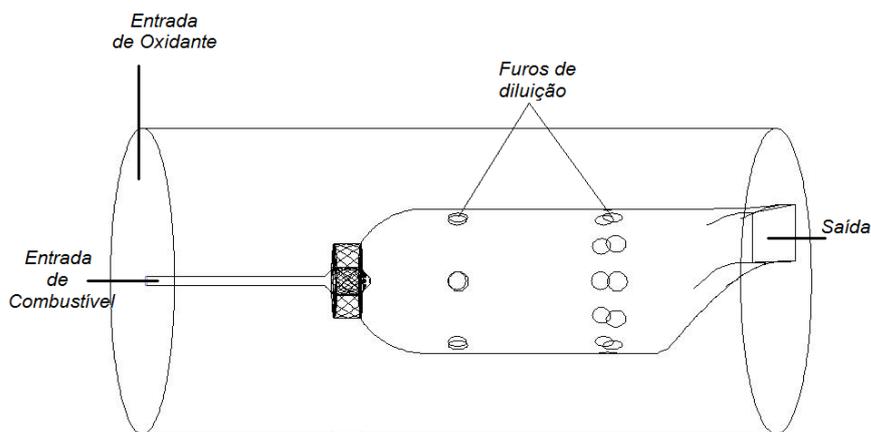


Figura 14: Posição dos fluxos de massa na câmara

Além dessas condições de contorno apresentadas, foi considerado neste problema que as paredes externas do volume são todas adiabáticas.

5.2. Análise da câmara em condição padrão

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

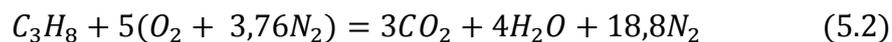
Tabela 2: Condição de contorno em condição padrão

	Espécie	Entrada de oxidante	Entrada de combustível
Vazão mássica (kg/s)	-	0,085	0,00163
Fração volumétrica	N ₂	0,79	-
	O ₂	0,21	-
	C ₃ H ₈	-	1,00
Temperatura (°C)	-	27	27

A taxa de equivalência ϕ utilizado foi de 0,3, e é dado pela seguinte relação:

$$\phi = \frac{\left(\frac{m_{fuel}}{m_{oxi}}\right)}{\left(\frac{m_{fuel}}{m_{oxi}}\right)_{est}} \quad (5.1)$$

A relação estequiométrica é dada pela reação:



Utilizando esta taxa de equivalência, calculou-se que o excesso de ar utilizado nos experimentos foi de 235%.

Para essas condições têm-se os seguintes resultados das frações de misturas:

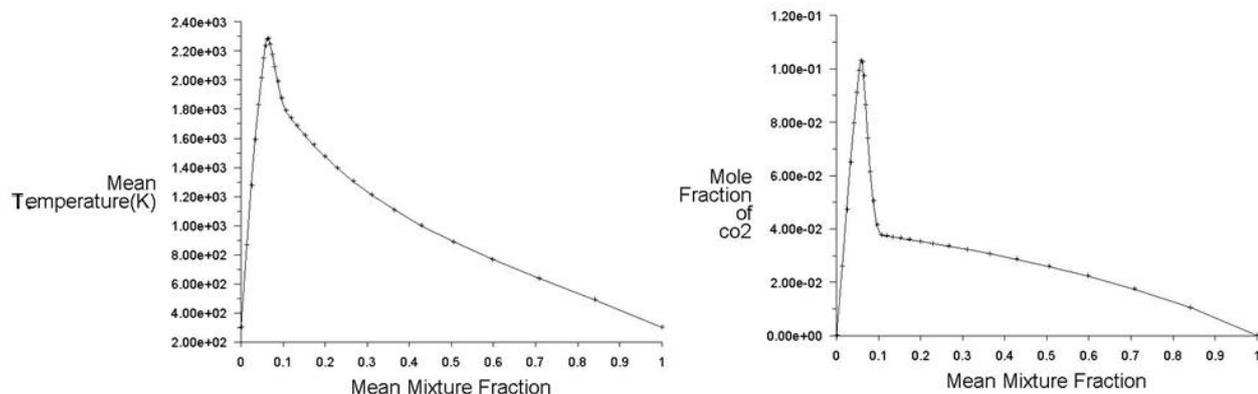


Figura 15: Gráficos de frações de misturas para a condição padrão.

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. Este valor pode ser calculado da seguinte forma:

$$f = \frac{Y_{ox,0}}{s \cdot Y_{f,1} + Y_{ox,0}} \quad (5.3)$$

Onde s é a relação na base mássica de oxidante e combustível.

$Y_{ox,0}$ é fração mássica de oxidante na posição 0.

$Y_{f,1}$ é a fração mássica de combustível na posição 1.

Uma comparação entre os valores fornecidos pelo Software Fluent® e a temperatura adiabática, analiticamente calculada, foi realizada com efeito de comprovação dos valores numéricos.

A temperatura adiabática de chama foi calculada da seguinte forma:

$$\dot{m}_f \cdot PCI = \dot{m}_G \cdot c_{p,G} \cdot (T_G - T_{ox}) \quad (5.4)$$

Onde:

\dot{m}_f : taxa de consumo de combustível (kg/s)

PCI : Poder calorífico inferior (kJ/kg)

\dot{m}_G : taxa de produção de gases de combustão (kg/s)

$c_{p,G}$: Calor específico dos gases de combustão (kJ/kg.K)

T_G : temperatura de saída dos gases de combustão (Temperatura Adiabática de chama K)

T_{ox} : Temperatura de entrada do ar de combustão (K)

A temperatura adiabática de chama é um estado hipotético, pois nenhum processo real pode ser adiabático, ainda mais em altas temperaturas, condições geralmente produzidas em combustão. Além disso, em altas temperaturas a dissociação pode ocorrer, podendo ser o calor desprendido menor que o calculado (Wyllen et. al.).

Através dos cálculos obteve-se a temperatura adiabática de chama calculada 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.

A temperatura média dos gases na saída da câmara, aproximadamente 790°C, se aproxima 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 em simulação.

Para essa primeira simulação têm-se os seguintes resultados da temperatura e composição dos gases de combustão:

Temperatura dos gases de combustão = 788,5 °C

Tabela 3: Composição dos gases de combustão para condição padrão

Espécie	N ₂	O ₂	CO	CO ₂	H ₂ O
Fração volumétrica	0,770	0,144	0,001	0,036	0,049

As figuras posteriormente representadas têm como plano de referência um plano central a câmara de combustão com normal no eixo x, de acordo com o eixo cartesiano representado na Figura 12. Na Figura 16 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 até a saída dos

gases quentes. Uma elevada fração mássica de CO_2 é observada nestas regiões de elevadas temperaturas (Figura 16).

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.

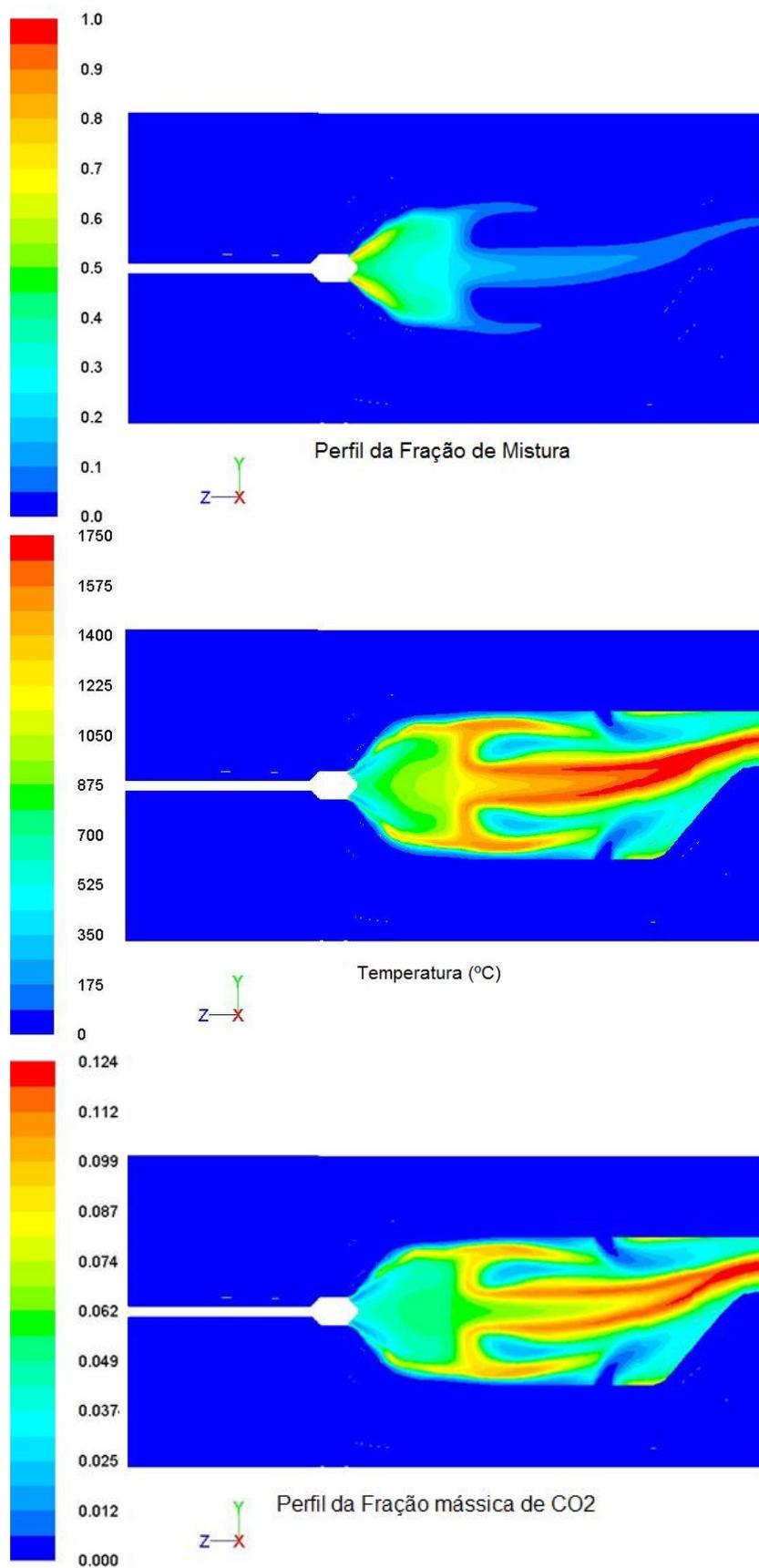


Figura 16: Perfis de fração de mistura, temperatura e da espécie CO₂ para condição padrão.

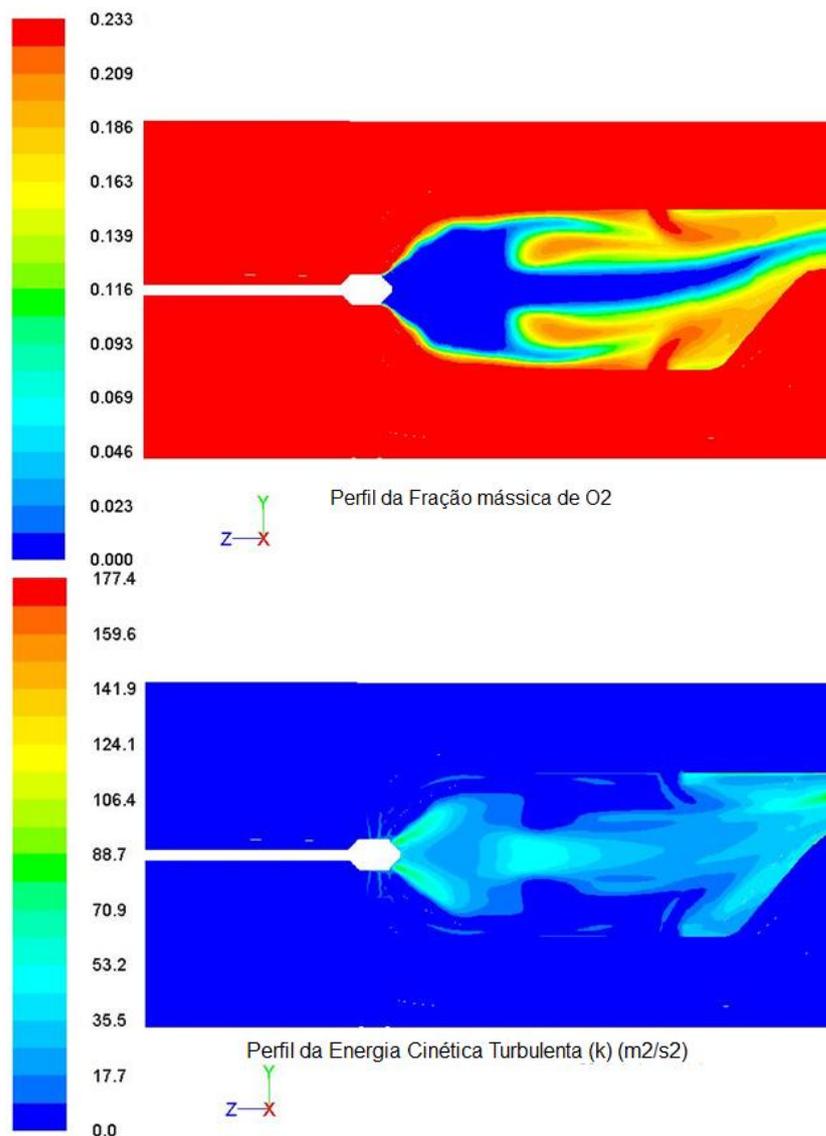


Figura 17: Perfis da espécie O₂ e da energia cinética de turbulência para condição padrão.

A distribuição de velocidades no plano central da câmara de combustão é mostrado na Figura 18. Nesta pode-se observar a ocorrência da zona de recirculação logo a frente do *swirler*, assim como na figura, a qual mostra o perfil da velocidade no eixo z, sendo negativo no sentido da saída da câmara e positivo nas zonas de recirculação.

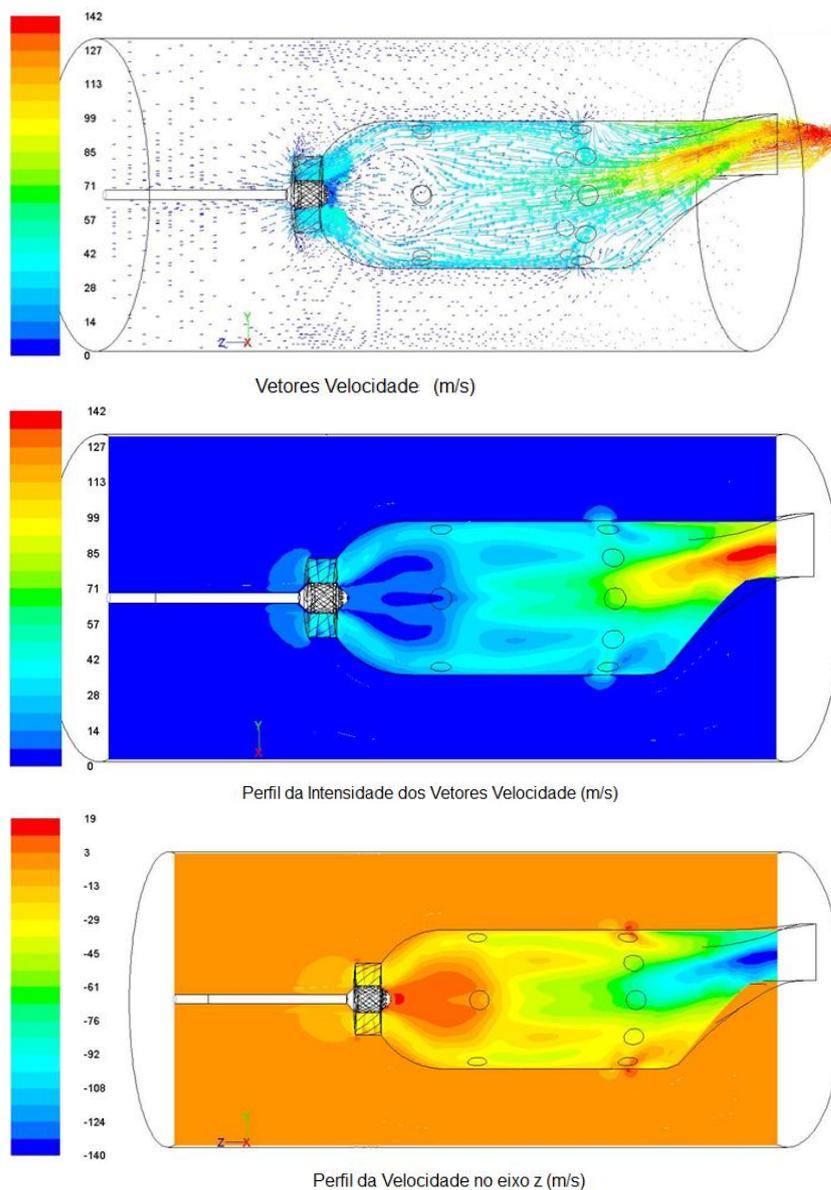


Figura 18: Vetores velocidade, perfil da velocidade e das velocidades em z para condição padrão.

A Figura 19 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.

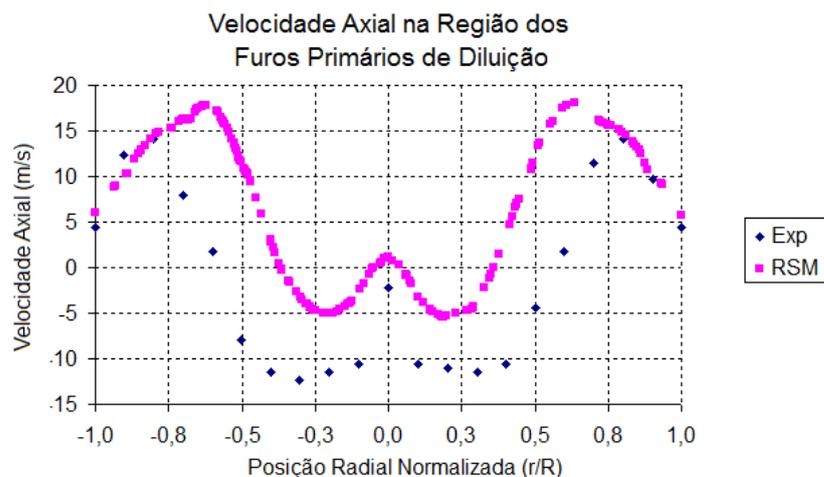


Figura 19: Velocidade axial no plano dos primeiros furos de diluição ($z=167\text{mm}$) – Comparação com dados experimentais.

As velocidades médias na direção y , no mesmo plano, são mostradas na Figura 20. 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 observa-se com o perfil de temperatura obtido na mesma referência mostrado na Figura 21, e obtido na simulação, Figura 16. Pode-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.

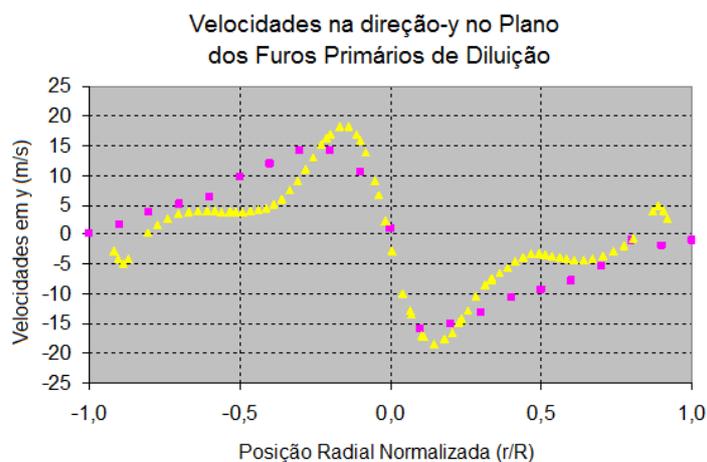


Figura 20: Velocidade em y no plano dos primeiros furos de diluição ($z=167\text{mm}$) – Comparação com dados experimentais.

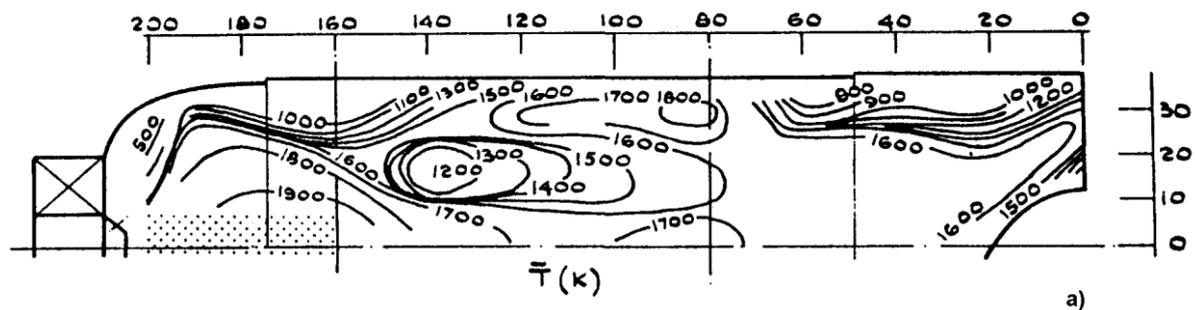


Figura 21: Perfil de Temperatura (K) – Dados experimentais. (Heitor, 1985)

5.3. Recirculação de 40% dos gases de escape

Como uma análise inicial, será utilizada a recirculação dos gases de combustão diretamente após o acionamento da turbina como mostra a seguinte figura:

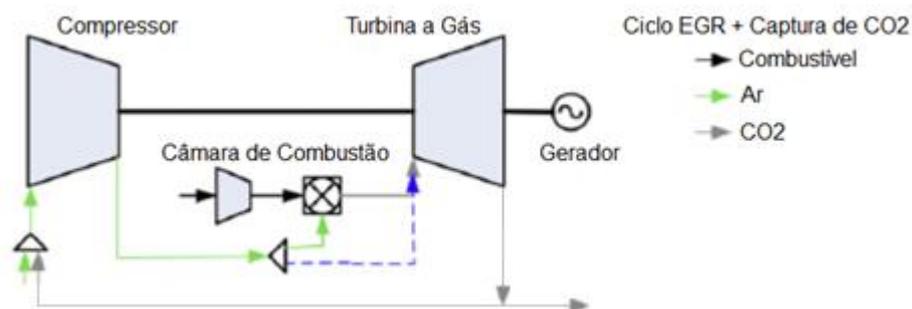


Figura 22: Esquema utilizado para a simulação do EGR

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.

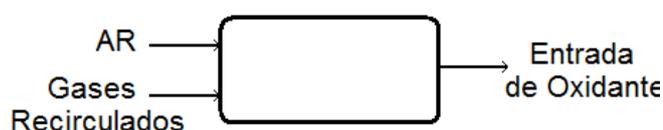


Figura 23: Volume de controle para a mistura.

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. A recirculação de gases terá uma taxa de 40%, sendo um dado inicial, levando em conta os trabalhos de referência.

Aplicando-se a primeira lei da termodinâmica, tem-se:

$$\sum \dot{m}_e = \sum \dot{m}_s \quad (5.5)$$

$$\dot{Q}_{VC} + \sum \dot{m}_e h_e = \sum \dot{m}_s h_s + \dot{W}_{VC} \quad (5.6)$$

Pode-se considerar o trabalho no volume de controle nulo, assim como a quantidade de geração de calor neste volume.

Para o escoamento adiabático:

$$\dot{Q}_{VC} = 0 \quad (5.7)$$

$$\dot{W}_{VC} = 0 \quad (5.8)$$

$$T_s = \frac{\dot{m}_{EGR} c_{p_{EGR}} T_{EGR} + \dot{m}_{Ar} c_{p_{Ar}} T_{Ar}}{\dot{m}_{tot} c_{p_{tot}}} \quad (5.9)$$

$$c_{p_{tot}} = \frac{\dot{m}_{EGR} c_{p_{EGR}} + \dot{m}_{Ar} c_{p_{Ar}}}{\dot{m}_{tot}} \quad (5.10)$$

Para essa configuração tem-se a seguinte condição de contorno:

Tabela 4: Condições de contorno para o EGR

	Espécie	Entrada de oxidante	Entrada de combustível
Vazão mássica (kg/s)	-	0,085	0,00163
Fração volumétrica	N ₂	0,782	-
	O ₂	0,183	-
	CO	-	-
	CO ₂	0,015	-
	H ₂ O	0,020	-
	C ₃ H ₈	-	1,00
Temperatura (°C)	-	69	27

Os seguintes resultados foram encontrados:

Temperatura dos gases de combustão = 861,2 °C

Tabela 5: Composição dos gases de combustão para o EGR.

Espécie	N ₂	O ₂	CO	CO ₂	H ₂ O
Fração volumétrica	0,761	0,114	-	0,053	0,071

Evidenciando um aumento de mais de 40% de CO₂ nos gases de combustão em comparação a encontrada no caso em que não se utiliza a recirculação.

A temperatura apresentou um aumento significativo, cerca de 70°C, causado principalmente pela temperatura maior dos gases na entrada do oxidante. Esta maior temperatura ainda estaria adequada aos projetos atuais de turbinas a gás.

A partir da composição e temperatura dos gases, têm-se os gráficos de fração de mistura, Figura 24. Como a reação global neste caso, é a mesma utilizada na simulação anterior, Reação (5.2), foram encontradas poucas alterações nos perfis de temperatura, fração de mistura de fração mássica de CO₂ e O₂, Figura 24 e Figura 25.

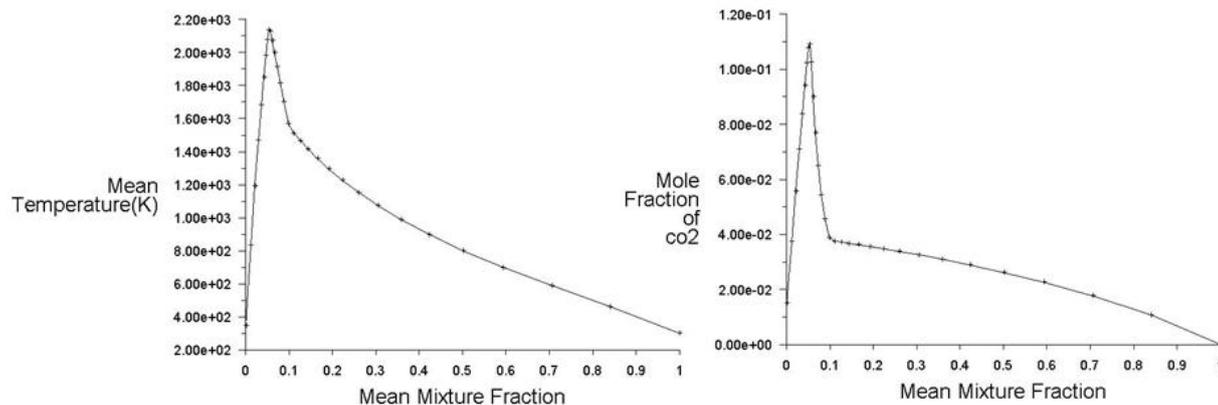


Figura 24: Gráficos de frações de misturas para o EGR.

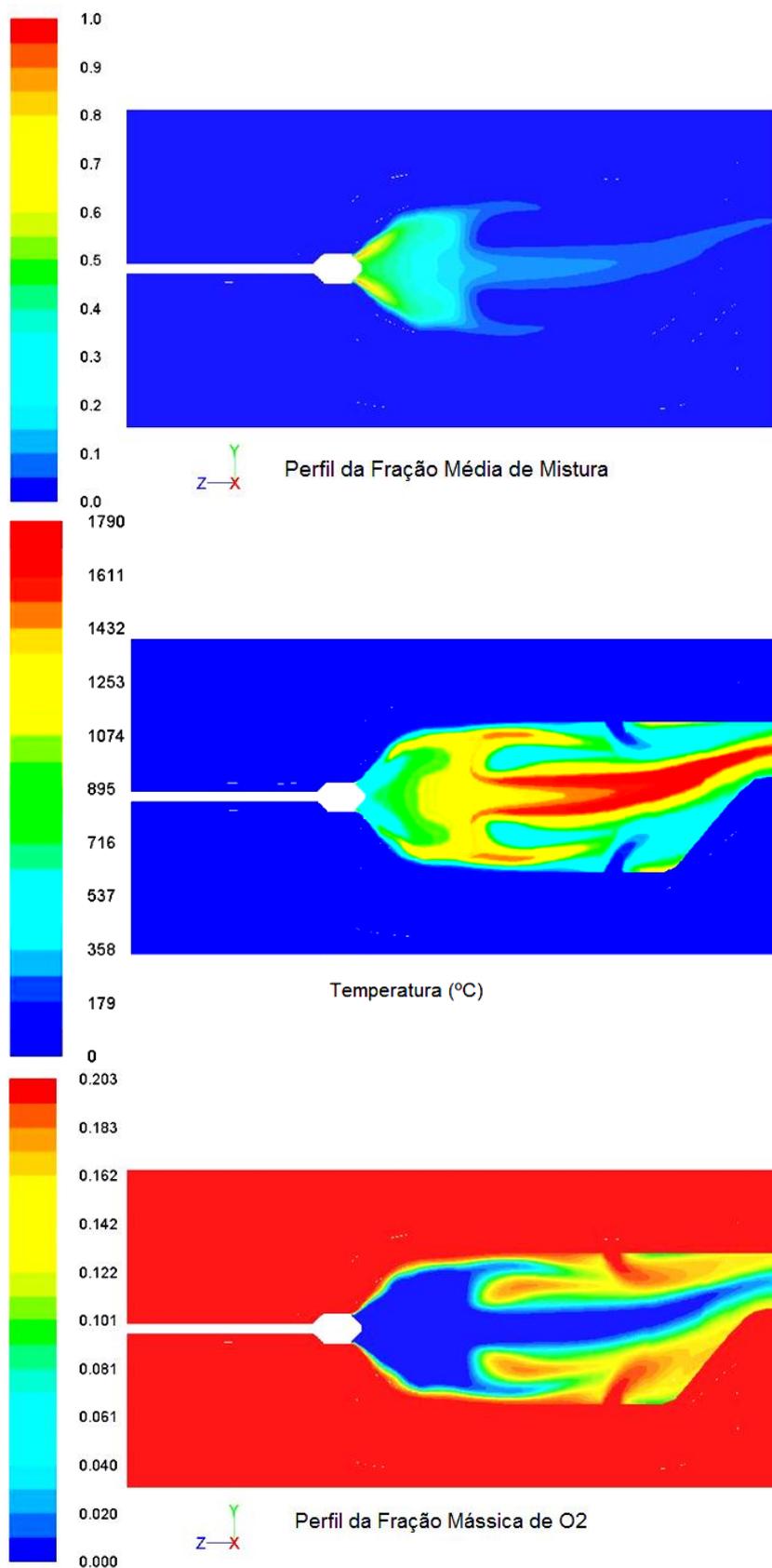


Figura 25: Perfis de fração de mistura, temperatura e da espécie O_2 para o EGR.

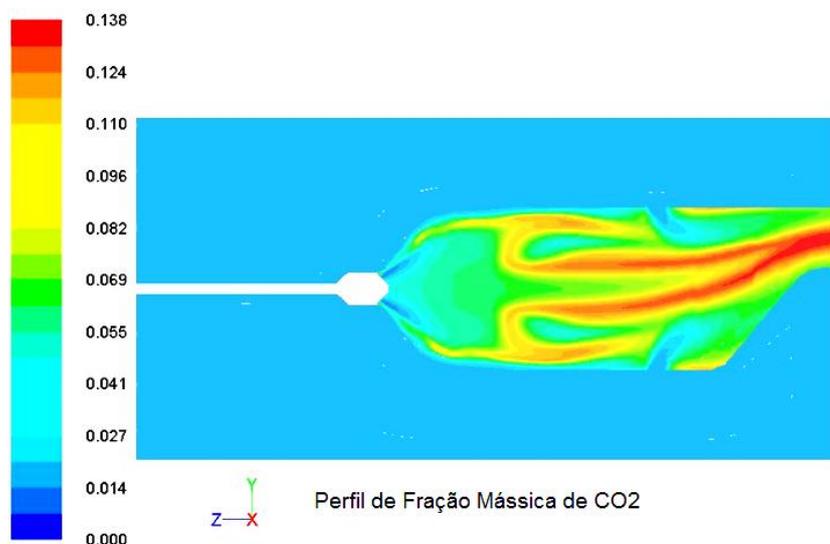


Figura 26: Perfil da espécie CO₂ para o EGR

O perfil de temperatura é equivalente ao encontrado no caso anterior, apresentando somente um aumento das temperaturas, e o perfil de CO₂ apresenta um claro aumento das concentrações dessa espécie.

Este aumento nas concentrações finais de CO₂ nos gases de combustão pode auxiliar uma futura captura e armazenamento, como visto na literatura

5.4. Simulação com “oxyfuel”

Para analisar a câmara de combustão utilizando o “oxyfuel” (ou oxicomustão), a estratégia utilizada foi realizar a oxidação do combustível com uma quantidade de O₂ estequiométrica da reação:

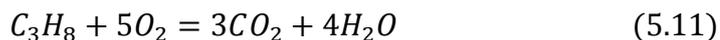


Tabela 6: Condições de contorno para “oxyfuel” – Relação Estequiométrica.

	Espécie	Entrada de oxidante	Entrada de combustível
Vazão mássica (kg/s)	-	0,0059	0,00163
Fração volumétrica	CO ₂	-	-
	O ₂	1,0	-
	C ₃ H ₈	-	1,0
Temperatura (°C)	-	27	27

Os seguintes resultados para as frações de mistura foram encontrados:

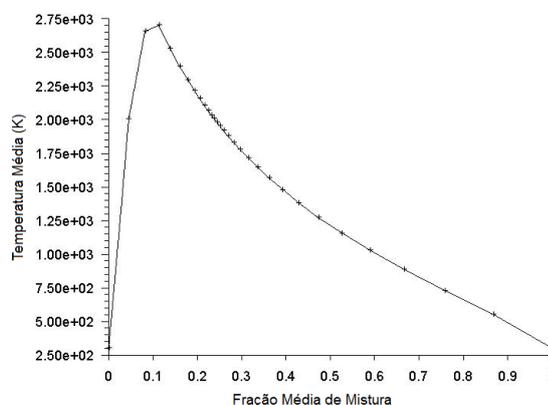


Figura 27: Gráfico da fração média de mistura para o “oxyfuel” - Relação estequiométrica.

Temperatura dos gases de combustão = 1223 °C

Tabela 7: Composição dos gases de combustão para “oxyfuel” – Relação Estequiométrica.

Espécie	N ₂	O ₂	CO	CO ₂	H ₂ O
Fração volumétrica	-	0,914	-	0,06	0,033

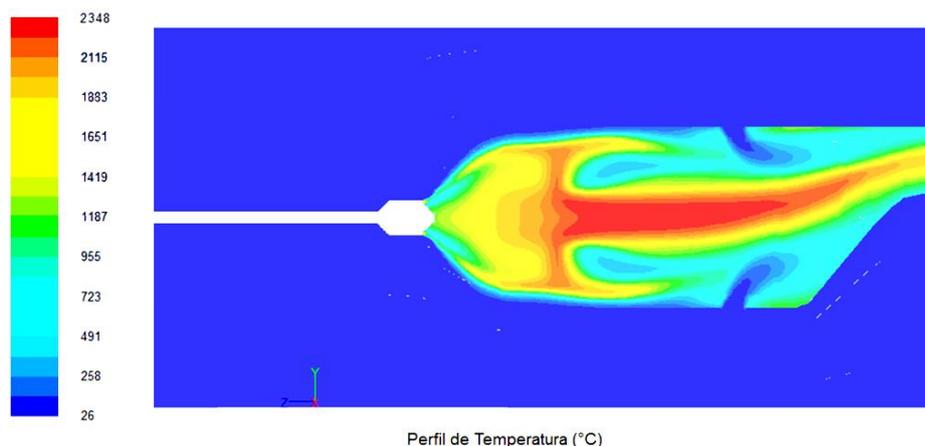


Figura 28: Perfil de temperatura para “oxyfuel” – Relação Estequiométrica.

Analisando o perfil de temperatura, observa-se um escoamento reativo próximo ao apresentado nas simulações anteriores. Este dado pode ser uma base para uma estabilidade deste tipo de chama utilizando este novo tipo de oxidante.

Pelo perfil de temperaturas, observam-se temperaturas extremamente elevadas no interior da câmara, próximas a 2350°C ($f=1,2$). Isto ocorre devido à falta de excesso de nitrogênio para diluição dos gases, e conseqüente redução da temperatura. Além disso, observou-se uma concentração elevada de O_2 na saída dos gases, mesmo utilizando concentração estequiométrica deste. Este fato pode ser explicado pela geometria da câmara de combustão, com uma segunda zona de diluição, neste caso formado somente por O_2 .

Para evitar estas temperaturas muito elevadas e aumentar a concentração final de CO_2 , a estratégia utilizada foi simular uma recirculação de gases, utilizando uma fração volumétrica de CO_2 no oxidante igual à fração de N_2 no ar atmosférico, da seguinte forma:



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 .

Um estudo deve ser realizado para observar se a alteração de gás nitrogênio para CO_2 como diluidor altera de alguma forma o escoamento reativo na câmara, devido ao fato destes dois gases possuírem propriedades diferentes.

5.4.1. Análise da diferença entre as propriedades do N_2 e do CO_2 :

Curva comparativa entre os calores específico do N_2 e do CO_2 em razão da temperatura:

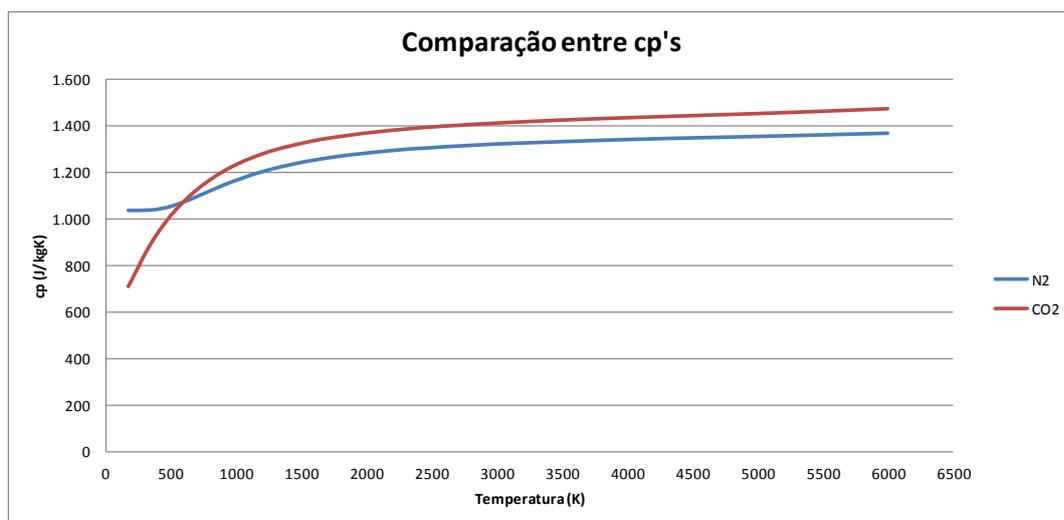


Figura 29: Curva comparativa entre os calores específico do N_2 e do CO_2 .

Analisando-se a curva, pode-se observar que o calor específico do CO_2 torna-se maior que o do N_2 a partir dos 600K, isso causaria uma diminuição da temperatura dos gases de exaustão nessa nova configuração, em relação aos casos anteriores.

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 8: Condições de contorno para “oxyfuel”.

	Espécie	Entrada de oxidante	Entrada de combustível
Vazão mássica (kg/s)	-	0,085	0,00163
Fração volumétrica	CO ₂	0,79	-
	O ₂	0,21	-
	C ₃ H ₈	-	1,00
Temperatura (°C)	-	109	27

Os seguintes resultados para as frações médias de misturas foram encontrados:

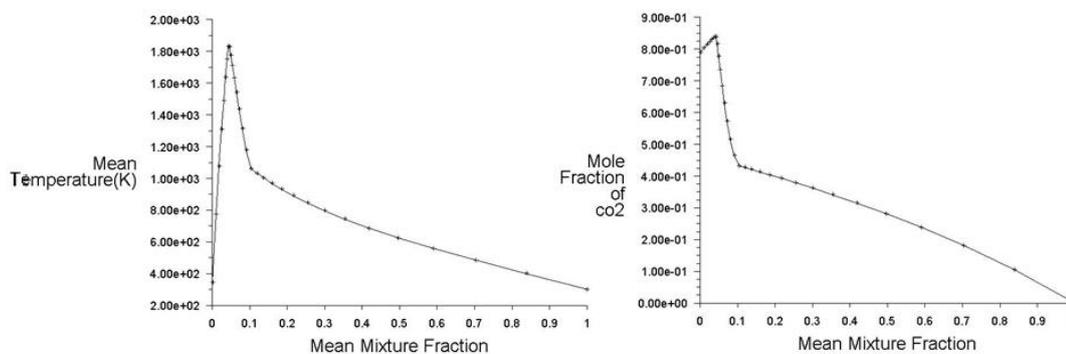


Figura 30: Gráficos da fração de mistura para “oxyfuel”.

Temperatura dos gases de combustão = 805,2 °C

Temperatura adiabática de chama calculada = 785°C

Tabela 9: Composição dos gases de combustão para “oxyfuel”.

Espécie	N ₂	O ₂	CO	CO ₂	H ₂ O
Fração volumétrica	-	0,11	0,003	0,808	0,079

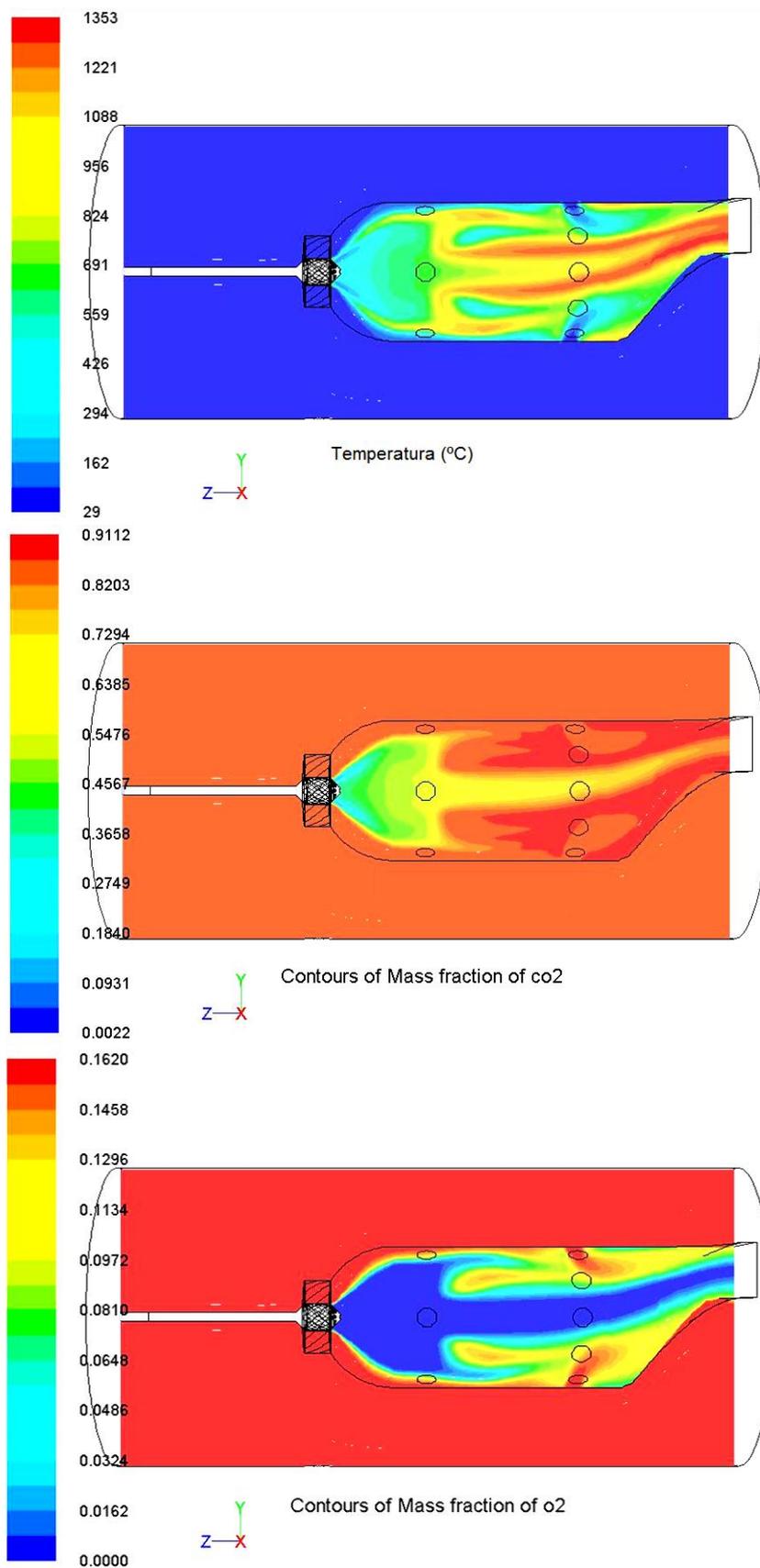


Figura 31: Perfis de temperatura e das espécie CO₂ e O₂ para “oxyfuel”.

Através da Figura 31 observa-se que as temperaturas ao longo da câmara apresentaram uma acentuada redução, se comparada com a combustão com ar (Figura 16). Como já havia sido previsto na análise anterior. A temperatura máxima na câmara ficou próxima dos 1350°C, tendo um significativo decréscimo da condição anterior. Além disso pode-se comprovar as temperaturas finais encontrada nos gases de exaustão e a temperatura adiabática de chama calculada.

As concentrações finais de CO₂, 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.

Apesar do resultados satisfatórios obtidos, deve-se analisar a viabilidade econômica de um projeto utilizando o “oxyfuel”. O custo da captura de CO₂ deve ser reduzido ao encontrado em outros processos, porém o custo adicional de uma unidade de separação de ar pode tornar este processo mais custoso do que outros já existentes.

5.5. Hidrogênio

A utilização do gás de síntese seria uma outra possibilidade para implementar processos de captura de CO_2 em processos envolvendo turbinas a gás. Uma primeira avaliação foi verificar se a utilização do hidrogênio como combustível de uma câmara de combustão seria ainda viável. O H_2 no caso, pode ser obtido de um processo de captura de CO_2 do tipo pré-combustão, comentado no capítulo anterior.

Os seguintes dados foram utilizados como condição de contorno deste novo escoamento reativo:

Tabela 10: Condições de contorno para combustão do Hidrogênio.

	Espécie	Entrada de oxidante	Entrada de combustível
Vazão mássica (kg/s)	-	0,171	0,004
Fração volumétrica	N_2	0,79	-
	O_2	0,21	-
	H_2	-	1
Temperatura ($^{\circ}\text{C}$)	-	27	27

Os seguintes resultados para a Fração média de mistura foram encontrados:

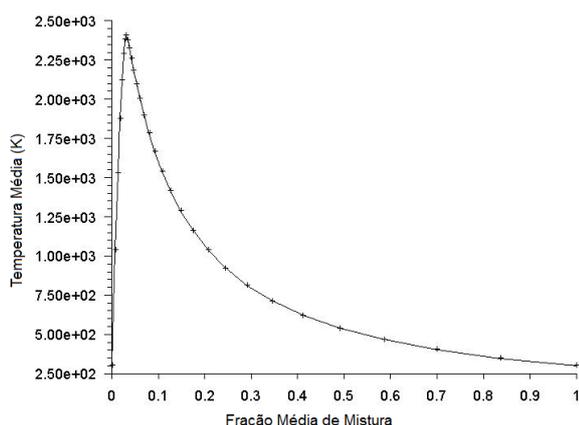


Figura 32: Fração média de mistura para o hidrogênio.

Temperatura dos gases de combustão = 1173°C

Temperatura adiabática de chama calculada: 1632°C

Tabela 11: Composição dos gases de combustão para o hidrogênio.

Espécie	N2	O2	CO	CO2	H2O
Fração volumétrica	0,75	0,12	-	-	0,13

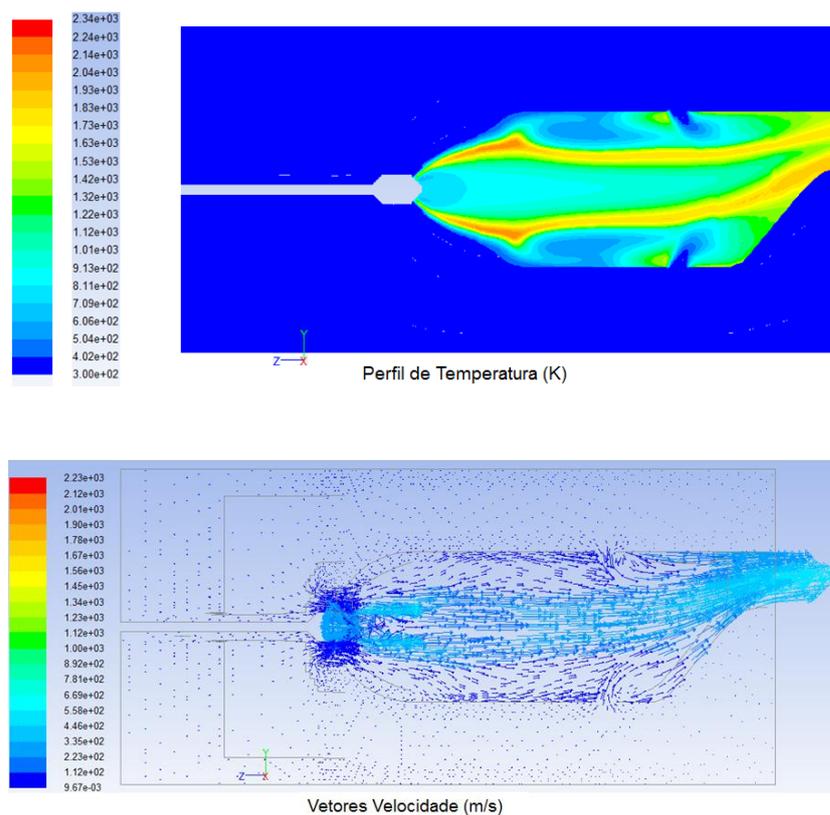


Figura 33: Perfil de temperatura e vetores velocidade para o hidrogênio

Observa-se neste caso um comportamento diferente do escoamento. Ocorreram elevadas temperaturas ao final da câmara e não no centro do escoamento, como visto nas simulações anteriores. Este fato deve-se a vetores de velocidade com intensidade elevada no interior da câmara, como visto na Figura 33, resultado da maior vazão de combustível utilizada para este caso.

5.6. 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 12: Condições de contorno para combustão do Gás de Síntese.

	Espécie	Entrada de oxidante	Entrada de combustível
Vazão mássica (kg/s)	-	0,085	0,006
Fração volumétrica	CO_2	0,79	0,3
	O_2	0,21	-
	H_2	-	0,35
	CO	-	0,35
Temperatura ($^{\circ}\text{C}$)	-	27	27

Os seguintes resultados foram encontrados:

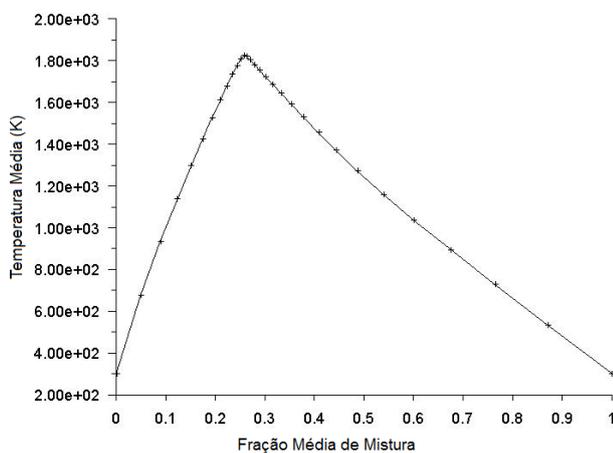


Figura 34: Fração média de mistura pela temperatura para combustão do Gás de Síntese.

Temperatura dos gases de combustão = $652,2^{\circ}\text{C}$

Tabela 13: Composição dos gases de combustão para o Gás de Síntese.

Espécie	N2	O2	CO	CO2	H2O
Concentração volumétrica	-	0,121	-	0,825	0,054

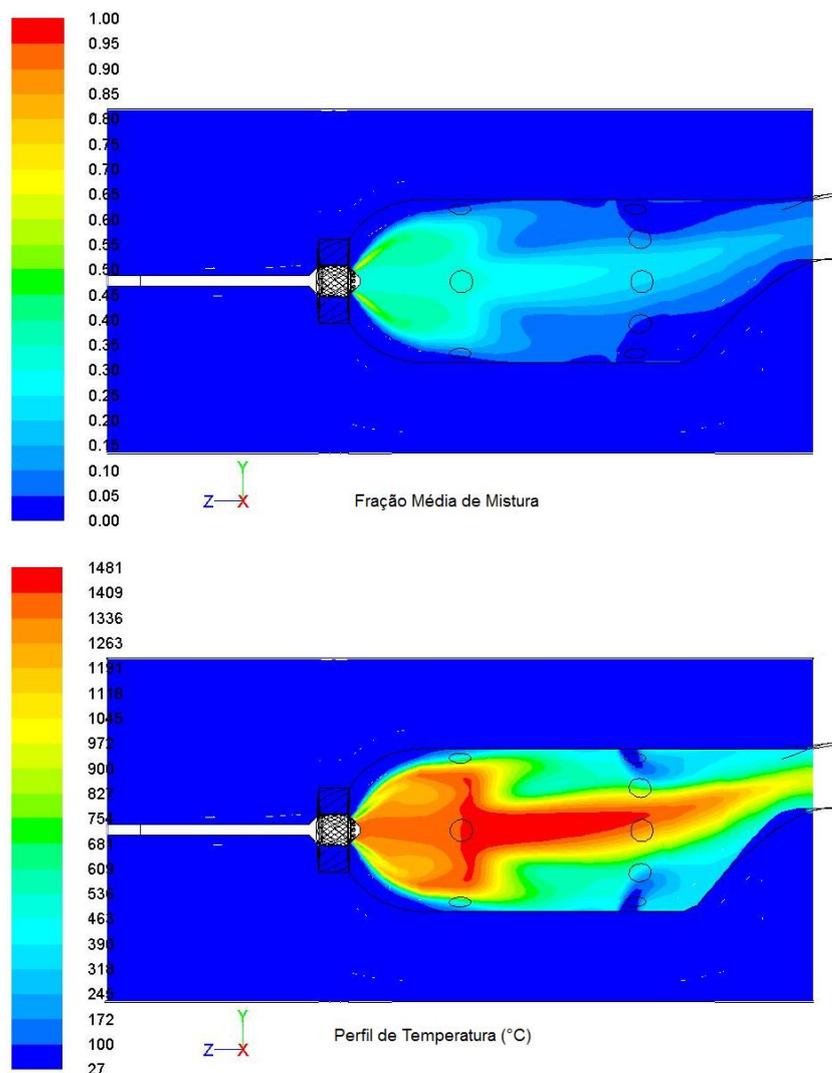


Figura 35: Perfil de temperatura e fração média de mistura para o Gás de Síntese.

Pode-se observar pelo perfil de temperatura (Figura 35) 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 36, 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 as simulações anteriores.

Frações volumétricas de CO_2 na ordem de 80% nos gases de combustão são observados na Tabela 13: Composição dos gases de combustão. Esta elevada concentração tornaria um futuro processo de captura CO_2 muito eficiente e ao mesmo tempo economico.

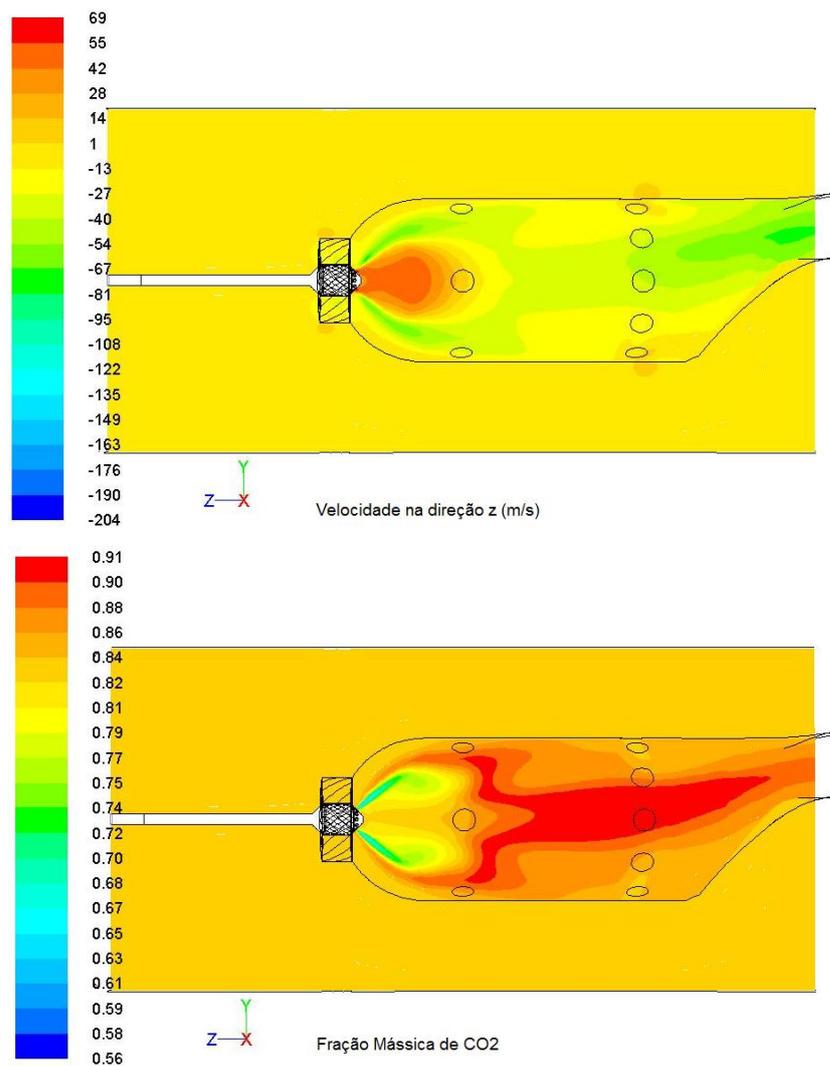


Figura 36: Velocidade na direção z e fração mássica de CO_2 para o Gás de Síntese.

6. 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 úteis na redução de emissão de um dos principais gases do efeito estufa, o dióxido de carbono.

A partir da revisão da literatura foram analisados os diferentes tipos de processos inseridos na tecnologia CCS. Este estudo possibilitou avaliar quais métodos poderiam ser utilizados para câmaras de combustão de turbinas a gás, que possibilitassem a redução da emissão de CO₂ e seu futuro aproveitamento. A recirculação de gases de escape, a utilização da oxi-combustão (oxy-fuel) e a utilização do gás de síntese podem auxiliar nestes processos de CCS.

A análise da utilização destes métodos foi realizada através da fluido dinâmica computacional com o escoamento reativo de uma câmara de combustão, originalmente constituída para trabalhar com GLP, como objeto de estudo. Para modelar numericamente os diferentes processos que auxiliam o CCS, foram utilizados modelos encontrados na literatura que se aproximassem do problema proposto. As simulações foram realizadas através do método dos volumes finitos com uma malha tridimensional da câmara. 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.

Primeiramente realizou-se uma validação dos resultados da simulação, da câmara de combustão 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.

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 conseqüências 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 pode ser utilizados. Algumas sugestões para aperfeiçoamento e continuação do presente trabalho são apresentados a seguir:

- Consideração da radiação no interior da câmara;
- Consideração da condução de calor na parede do *liner*, entre o *liner* e o oxidante;
- Estudo de modelos de combustão e aplicação destes modelos com mecanismos de reações detalhados como observados na literatura.

7. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

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.; WEDOŁOWSKI, 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 combustor: 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.

HEITOR, M. F. T. V.; Experiments in turbulent reacting flows. Doctoral Thesis. London University, 1985.

HOFFMANN, B. S. O ciclo combinado com gaseificação integrada e a captura de CO₂: uma solução para mitigar as emissões de CO₂ em Termelétricas a carvão em larga escala no curto prazo?, 2010.

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*, Contribution of Working Group I to the **Fourth Assessment Report** of the Intergovernmental Panel on Climate Change, Cambridge University Press, ISBN 978-0-521-88009-1(pb: 978-0-521-70596-7).

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.

SOARES, C.; Gas Turbines, a handbook of air, land, and sea applications. Elsevier. 2008

URNS, S. R., 2000, “An introduction to combustion: concepts and applications”, McGraw-Hill series in mechanical engineering, Singapore.

VAN WYLEN, G. J.; SONNTAG, R. E.; BORGNAKKE, C. Fundamentos da termodinâmica. Tradução da 6ª Edição Americana, Editora Edgard Blücher, 2003.