

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE PERNAMBUCO**  
**CENTRO DE TECNOLOGIA E GEOCIÊNCIAS**  
**PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA**

P

P

E

Q

PPEQ - Programa de Pós-graduação em  
Engenharia Química

CEP. 50740-521 – Cidade Universitária  
Recife – PE

Telefax: 0 – xx – 81 - 21267289



**ESTUDO FLUIDODINÂMICO COMPUTACIONAL  
DE UM FORNO PILOTO ROTATIVO CONTÍNUO  
A GÁS NATURAL PARA PRODUÇÃO DE  
GESSO BETA**

***Danilo Emídio de Souza Cavalcanti***

**Recife/PE**

**Fevereiro/2013**

**ESTUDO FLUIDODINÂMICO COMPUTACIONAL DE UM FORNO PILOTO  
ROTATIVO CONTÍNUO A GÁS NATURAL PARA PRODUÇÃO DE GESSO BETA**

**Danilo Emídio de Souza Cavalcanti**

**Recife**

**2013**

# **ESTUDO FLUIDODINÂMICO COMPUTACIONAL DE UM FORNO PILOTO ROTATIVO CONTÍNUO A GÁS NATURAL PARA PRODUÇÃO DE GESSO BETA**

**Danilo Emídio de Souza Cavalcanti**

**Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química da Universidade Federal de Pernambuco.**

Área de concentração: Processos Químicos Industriais

Orientador: Prof. Dr. Mohand Benachour.

Co-orientador: Prof. Dr. Abrahão Severo Ribeiro.

**RECIFE – PE**

**FEVEREIRO, 2013**

Catálogo na fonte  
Bibliotecária: Rosineide Mesquita Gonçalves Luz / CRB4-1361 (BCTG)

C376e Cavalcanti, Danilo Emídio de Souza.  
Estudo fluidodinâmico computacional de um forno piloto rotativo contínuo a gás natural para produção de gesso beta / Danilo Emídio de Souza Cavalcanti – Recife: O Autor, 2013.  
87f., il., figs., gráfs., tabs.

Orientador: Prof. Dr. Mohand Benachour.  
Co-orientador: Prof. Dr. Abrahão Severo Ribeiro.  
Dissertação (Mestrado) – Universidade Federal de Pernambuco.  
CTG. Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química, 2013.  
Inclui Referências e Anexo.

1. Engenharia Química. 2. Gás Natural. 3. Combustão. 4. Forno Rotativo Contínuo. 5. Gesso. 6. *CFD*. I. Benachour, Mohand (Orientador). II. Ribeiro, Abrahão Severo (Co-orientador) III. Título.

660.2 CDD (22.ed) UFPE/BCTG-2013 / 190

# **ESTUDO FLUIDODINÂMICO COMPUTACIONAL DE UM FORNO PILOTO ROTATIVO CONTÍNUO A GÁS NATURAL PARA PRODUÇÃO DE GESSO BETA**

**Linha de Pesquisa: Processos Químicos Industriais**

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química da Universidade Federal de Pernambuco, defendida e aprovada em 27 de fevereiro de 2013 pela banca examinadora constituída pelos seguintes membros:

---

Prof. Dr. Mohand Benachour - UFPE

---

Profa. Dra. Daniele Castro Pessoa de Melo – Faculdade Estácio

---

Prof. Dr. Abrahão Severo Ribeiro-IFPE

---

Prof. Dr. José Marcos Francisco da Silva – DEQ/UFPE

---

Prof. Dr. Inaldo Amorim da Silva- IFPE

“Saber muito não lhe torna inteligente. A inteligência se traduz na forma que você recolhe, julga, maneja e, sobretudo, onde e como aplica esta informação”

Carl Sagan.

## AGRADECIMENTOS

Agradeço a Márcia Cristina, minha mãe, pelo apoio incondicional desde minha existência e principalmente nos momentos em que eu mais precisei, sendo parte fundamental nessa conquista.

Agradeço a minha avó, que acreditou que a educação era algo essencial na minha vida, e lutou muito para que eu chegasse até aqui.

Agradeço aos familiares, principalmente minhas tias e primos, que me apoiaram sempre.

Ao professor Mohand Benachour, que sempre foi o apoio desse projeto, além de excelente orientador, uma grande pessoa.

Aos professores Daniele de Castro e Abrahão Ribeiro, que além de parceiros de pesquisa, são pessoas que tenho grande amizade.

Ao grupo LPC-Gesso, com Rafael e Pedro que trabalharam bastante nos projetos do grupo.

Aos meus amigos e colegas de universidade, principalmente os alunos da pós-graduação, que batalhamos juntos pelo mesmo objetivo.

Aos professores e funcionários do Departamento de Engenharia Química da UFPE.

Enfim, a todos aqueles que um dia imaginaram que isso iria acontecer e forneceram algum tipo de ajuda ou apoio, mesmo que mínimo, mas bastante importante na minha vida.

## RESUMO

O Nordeste brasileiro se apresenta como um dos mais importantes produtores de gesso e seus derivados do País. O processo de produção do gesso beta é determinado pela desidratação do minério de gipsita, sendo principalmente realizada em fornos rotativos tubulares. A operação de calcinação, na qual a gipsita se transforma em gesso beta pela ação do calor, é função direta das condições de composição do material sólido (gipsita), da natureza do combustível (gás natural, GLP, lenha, etc.), além da temperatura e pressão do forno. Porém esses fornos apresentam um difícil controle de suas variáveis, sendo um limitante do produto final obtido.

A Fluidodinâmica Computacional (CFD) pode ser descrita de forma generalizada como a simulação numérica de todos aqueles processos físicos e/ou físico-químicos que apresentam escoamento. Utilizando as equações fundamentais dos fenômenos de transporte: balanço de massa, energia e quantidade de movimento, são criados modelos matemáticos, e a partir deles, são desenvolvidos modelos computacionais para a execução de simulações numéricas, obtendo-se assim projeções para a solução do problema.

O presente trabalho aborda a simulação de um forno rotativo contínuo para a produção de gesso utilizando gás natural como combustível através da fluidodinâmica computacional utilizando um software comercial ANSYS CFX. Para isso, foram utilizados modelos de combustão (*Eddy Dissipation e Finite Rate Chemistry*) modelos de radiação (*P1, Discrete Transfer e Rosseland*) e modelos de turbulência ( $\kappa$ - $\epsilon$ , *RNG  $\kappa$ - $\epsilon$  e SST*) com objetivo de identificar a melhor das combinações. Os resultados dessas simulações foram comparados e validados com os dados da evolução da temperatura do gás ao longo do forno rotativo. Esta escolha se deve ao fato de buscar um modelo que além de se adequar aos resultados experimentais, possa oferecer dados de variáveis físicas e/ou químicas que são de difícil obtenção experimental. Outro ponto analisado foi à comparação dos valores das temperaturas de chama obtidas através das simulações, com a temperatura de chama teórica adiabática (TTCA), com intuito de descobrir qual modelagem melhor representa os dados teóricos de chama.

Foi possível obter um modelo bastante representativo, principalmente na região mais próxima da chama, obtendo-se estimativas da densidade, pressão, velocidade e frações molares de H<sub>2</sub>O, CO<sub>2</sub> e NO. Verificou-se também, para a modelagem com melhor aproximação em relação à Temperatura Teórica de Chama Adiabática, a forma como sua temperatura varia em relação à variação do excesso de ar.

**PALAVRAS-CHAVE:** Gás Natural, Combustão, Forno Rotativo Contínuo, Gesso, CFD.

## ABSTRACT

The Brazilian Northeast is presented as one of the most important producers of gypsum and its derivatives in Brazil. The production process of gypsum is determined by the dehydration of gypsum ore, which usually carried out in rotary kilns tubular. The operation of calcination, in which the gypsum is transformed into gypsum by the action of heat, is a direct function of the temperature, pressure and composition of the material used in the process. These furnaces have a difficult control in its variables, which one limiting the final product.

The Computational Fluid Dynamics (CFD) can be described in a general way as the numerical simulation of all those physical process and / or physic-chemical - runoff of the fluid. Using the fundamental equations of transport phenomena, as the mass balance, energy and momentum are created by mathematical models, and from them, usually an ordinary system or partial differential equations, a computational model is developed to perform numerical simulations, yielding so the projections for the solution of the problem.

This paper discusses the simulation of a continuous rotary kiln for the production of gypsum using natural gas as fuel by using computational fluid dynamics software commercial ANSYS CFX. For this, we used combustion models (*Eddy Dissipation* and *Finite Rate Chemistry*) radiation models (*P1*, *Discrete Transfer* and *Rosseland*) and turbulence models ( $\kappa$ - $\varepsilon$ , *RNG  $\kappa$ - $\varepsilon$*  and *SST*) in order to better identify those combinations. The results of these simulations were compared and validated with the data of the temperature of gas along the rotary kiln. This choice is due to the fact of seeking a model that not only fit the experimental results, but which can provide variable data physical and / or chemical properties that are difficult to obtain experimentally. Another point discussed was the comparison of flame temperature values obtained through the simulations with theoretical adiabatic flame temperature (TTCA), in order to find out which best represents the theoretical data modeling.

It was possible to obtain a representative model, mainly in the region closer to the flame, thus obtaining estimates of density, speed, pressure and molar fractions of H<sub>2</sub>O, CO<sub>2</sub> and NO. It was also, for the best modeling approach in relation to Theoretical Adiabatic flame Temperature, how its temperature varies in relation to the variation of excess air.

**KEYWORDS:** Natural Gas, Combustion, Rotary Continuous Kilns, Gypsum, CFD.

## SUMÁRIO

LISTA DE FIGURAS.....	xi
LISTA DE TABELAS.....	xiii
LISTA DE SÍMBOLOS.....	xiii
1. INTRODUÇÃO .....	1
2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA.....	4
2.1 GESSO .....	4
2.1.1 HISTÓRIA DO GESSO .....	4
2.1.2 GIPSITA.....	5
2.1.3 OBTENÇÃO DO GESSO.....	6
2.1.4 PRINCIPAIS FORNOS UTILIZADOS NO POLO GESSEIRO DO ARARIPE .....	8
2.1.4.1 FORNO ROTATIVO DE CONTATO DIRETO.....	10
2.1.5 GÁS NATURAL .....	11
2.1.5.1 PROPRIEDADES DO GÁS NATURAL.....	11
2.1.5.2 COMPOSIÇÃO DO GÁS NATURAL .....	12
2.2 COMBUSTÃO.....	14
2.3 FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL.....	17
2.3.1 MÉTODOS NUMÉRICOS .....	17
2.3.2 CFD .....	19
2.3.3 PROCESSO DE MODELAGEM .....	20
2.3.3.1 GERAÇÃO DA GEOMETRIA.....	21
2.3.3.2 GERAÇÃO DA MALHA.....	21
2.3.3.3 PRÉ-PROCESSAMENTO.....	22
2.3.3.4 SOLUÇÃO NUMÉRICA.....	22
2.3.3.5 PÓS-PROCESSAMENTO.....	22
2.3.4 MODELAGEM MATEMÁTICA.....	23
2.3.4.1 MODELOS DE COMBUSTÃO.....	25

2.3.4.1.1 EDDY DISSIPATION.....	25
2.3.4.1.2 FINITE RATE CHEMISTRY.....	26
2.3.4.2 MODELOS DE TURBULÊNCIA.....	26
2.3.4.2.1 K- $\epsilon$ .....	26
2.3.4.2.2 SST.....	28
2.3.4.2.3 RNG K- $\epsilon$ .....	29
2.3.4.3 MODELOS DE RADIAÇÃO.....	31
2.3.4.3.1 P1 METHOD.....	32
2.3.4.3.2 DISCRETE TRANSFER.....	33
2.3.4.3.3 ROSSELAND.....	34
2.4 TEMPERATURA TEÓRICA DE CHAMA ADIABÁTICA .....	35
3. MATERIAS E MÉTODOS.....	36
3.1 EQUIPAMENTOS E MATERIAIS.....	36
3.1.1 FORNO PILOTO ROTATIVO CONTÍNUO.....	36
3.1.2 SISTEMAS AUXILIARES.....	37
3.1.2.1 SISTEMA DE COMBUSTÃO.....	37
3.1.2.2 SISTEMA DE EXAUSTÃO E CONTROLE DE PARTICULADOS.....	38
3.1.3 DESCRIÇÃO DOS EXPERIMENTOS.....	39
3.2 SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL.....	41
3.2.1 GERAÇÃO DA GEOMETRIA.....	41
3.2.2 GERAÇÃO DA MALHA.....	42
3.2.3 CONDIÇÕES APLICADAS NAS SIMULAÇÕES.....	42
4. RESULTADOS E DISCUSSÃO .....	44
4.1 ESTUDO EXPERIMENTAL .....	44
4.2 ESTUDO NUMÉRICO .....	44
4.3 COMPARAÇÃO COM VALORES TEÓRICOS.....	70
5. CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS.....	73

6. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS .....	75
7. ANEXOS.....	83

## LISTA DE FIGURAS

Figura 1: Tempo de Re-hidratação de um Gesso Anidro;

Figura 2: Forno marmitta rotativa utilizando lenha como combustível;

Figura 3: Forno rotativo de contato direto utilizando BPF como combustível;

Figura 4: Chama Pré-Misturada;

Figura 5: Chama Não Pré-Misturada;

Figura 6: Célula em torno de um ponto;

Figura 7: Malha estruturada(a), não estruturada(b) e híbrida(c);

Figura 8: Forno rotativo piloto para calcinação da gipsita – DEQ/UFPE;

Figura 9: Sistema de alimentação do ar de combustão e queimador;

Figura 10: Sistema de controle do forno através de *software* supervisorio;

Figura 11: Esquema do Forno rotativo piloto para calcinação da gipsita – DEQ/UFPE;

Figura 12: Geometria da Região do Domínio gerada no Design Modeler;

Figura 13: Malha gerada no CFX-Mesh;

Figura 14: Campo de Temperatura no plano YZ do Forno Rotativo Contínuo (S1.1.1);

Figura 15: Gráfico Temperatura X Comprimento Relativo utilizando a combinação de modelos S1.1.1;

Figura 16: Campo de Temperatura no eixo YZ do Forno Rotativo Contínuo (S1.1.2);

Figura 17: Gráfico Temperatura X Comprimento Relativo utilizando a combinação de modelos S1.1.2;

Figura 18: Campo de Temperatura no eixo YZ do Forno Rotativo Contínuo (S1.1.3);

Figura 19: Gráfico Temperatura X Comprimento Relativo utilizando a combinação de modelos S1.1.3;

Figura 20: Campo de Temperatura no eixo YZ do Forno Rotativo Contínuo (S1.2.1);

Figura 21: Gráfico Temperatura X Comprimento Relativo utilizando a combinação de modelos S1.2.1;

Figura 22: Campo de Temperatura no eixo YZ do Forno Rotativo Contínuo (S1.2.2);

Figura 23: Gráfico Temperatura X Comprimento Relativo utilizando a combinação de modelos S1.2.2;

Figura 24: Campo de Temperatura no eixo YZ do Forno Rotativo Contínuo (S1.2.3);

Figura 25: Gráfico Temperatura X Comprimento Relativo utilizando a combinação de modelos S1.2.3;

Figura 26: Gráfico Temperatura X Comprimento Relativo utilizando o modelo  $\kappa$ - $\epsilon$ ;

Figura 27: Gráfico Temperatura X Comprimento Relativo utilizando o modelo  $\kappa$ - $\epsilon$  (Destacado);

Figura 28: Campo de Temperatura no eixo YZ do Forno Rotativo Contínuo (S2.1.1);

Figura 29: Gráfico Temperatura X Comprimento Relativo utilizando a combinação de modelos S2.1.1;

Figura 30: Campo de Temperatura no eixo YZ do Forno Rotativo Contínuo (S2.1.2);

Figura 31: Gráfico Temperatura X Comprimento Relativo utilizando a combinação de modelos S2.1.2;

Figura 32: Campo de Temperatura no eixo YZ do Forno Rotativo Contínuo (S2.1.3);

Figura 33: Gráfico Temperatura X Comprimento Relativo utilizando a combinação de modelos S2.1.3;

Figura 34: Campo de Temperatura no eixo YZ do Forno Rotativo Contínuo (S2.2.1);

Figura 35: Gráfico Temperatura X Comprimento Relativo utilizando a combinação de modelos S2.2.1;

Figura 36: Campo de Temperatura no plano XZ do Forno Rotativo Contínuo (S2.2.2);

Figura 37: Gráfico Temperatura X Comprimento Relativo utilizando a combinação de modelos S2.2.2;

Figura 38: Campo de Temperatura no eixo YZ do Forno Rotativo Contínuo (S2.2.3);

Figura 39: Gráfico Temperatura X Comprimento Relativo utilizando a combinação de modelos S2.2.3;

Figura 40: Gráfico Temperatura X Comprimento Relativo utilizando o modelo SST;

Figura 41: Gráfico Temperatura X Comprimento Relativo utilizando o modelo SST (Destacado);

Figura 42: Campo de Temperatura no eixo YZ do Forno Rotativo Contínuo (S3.1.1);

Figura 43: Gráfico Temperatura X Comprimento Relativo utilizando a combinação de modelos S3.1.1;

Figura 44: Campo de Temperatura no eixo YZ do Forno Rotativo Contínuo (S3.1.2);

Figura 45: Gráfico Temperatura X Comprimento Relativo utilizando a combinação de modelos S3.1.2;

Figura 46: Campo de Temperatura no eixo YZ do Forno Rotativo Contínuo (S3.1.3);

Figura 47: Gráfico Temperatura X Comprimento Relativo utilizando a combinação de modelos S3.1.3;

Figura 48: Campo de Temperatura no eixo YZ do Forno Rotativo Contínuo (S3.2.1);

Figura 49: Gráfico Temperatura X Comprimento Relativo utilizando a combinação de modelos S3.2.1;

Figura 50: Campo de Temperatura no eixo YZ do Forno Rotativo Contínuo (S3.2.2);

Figura 51: Gráfico Temperatura X Comprimento Relativo utilizando a combinação de modelos S3.2.2;

Figura 52: Campo de Temperatura no eixo YZ do Forno Rotativo Contínuo (S3.2.3);

Figura 53: Gráfico Temperatura X Comprimento Relativo utilizando a combinação de modelos S3.2.3;

Figura 54: Gráfico Temperatura X Comprimento Relativo utilizando o modelo RNG  $\kappa$ - $\epsilon$ ;

Figura 55: Gráfico Temperatura X Comprimento Relativo utilizando o modelo RNG  $\kappa$ - $\epsilon$  (Destacado);

Figura 56: Campo de Densidade ao longo do Forno Rotativo Contínuo (Plano YZ);

Figura 57: Campo de Velocidade ao longo do Forno Rotativo Contínuo (Plano YZ);

Figura 58: Campo de Fração Mássica de  $\text{CO}_2$  ao longo do Forno Rotativo Contínuo (Plano YZ);

Figura 59: Campo de Fração Mássica de  $\text{NO}$  ao longo do Forno Rotativo Contínuo (Plano YZ);

Figura 60: Campo de Fração Mássica de  $\text{H}_2\text{O}$  ao longo do Forno Rotativo Contínuo (Plano YZ);

Figura 61: Gráfico Temperatura X Excesso de Ar utilizando o modelo RNG  $\kappa$ - $\epsilon$ ;

Figura 62: Gráfico Temperatura X Excesso de Ar para vários combustíveis com diferentes valores de excesso de Ar.

## LISTA DE TABELAS

Tabela 1: Características térmicas dos principais fornos utilizados no Araripe;

Tabela 2 – Propriedades do gás natural usado neste trabalho ( $T = 20\text{ }^{\circ}\text{C}$  e  $P = 1\text{atm}$ );

Tabela 3 – Composição típica do Gás natural;

Tabela 4 – Composição do gás natural utilizado no presente trabalho;

Tabela 5 – Composição do Ar utilizado no presente trabalho;

Tabela 6 – Valores das constantes empíricas do modelo k- $\epsilon$  padrão;

Tabela 7: Valores Experimentais da Temperatura ao longo do forno;

Tabela 8: Comparativo dos melhores valores simulados com o experimental;

Tabela 9: Valores da Temperatura Teórica de Chama Adiabática em função do Excesso de Ar;

Tabela 10: Comparativo do melhor valor simulado com o teórico;

Tabela 11: Comparativo dos melhores valores simulados com o valor teórico.

Tabela 12: Valores da Temperatura Teórica de Chama Adiabática em função do Excesso de Ar.

Tabela 13: Valores da Temperatura Teórica de Chama Adiabática em função do Excesso de Ar.

## Nomenclatura

### ABREVIATURAS E SIGLAS

- CAD – Desenho por Auxílio de Computador;
- CFD – Fluidodinâmica Computacional;
- DTRM – Modelo de Radiação Discrete Transfer;
- EDM – Eddy Dissipation Model, Modelo de Combustão;
- FRCM – Finite Rate Chemistry Model, Modelo de Combustão;
- GLP – Gás Liquefeito do Petróleo;
- MDF – Método das Diferenças Finitas;
- MEF – Método dos Elementos Finitos;
- MVF – Método dos Volumes Finitos;
- PDF – Função Densidade de Probabilidade;
- P1 Method – Modelo de Radiação;
- RNG – Teoria de Renormalização por Grupos;
- Roseland – Modelo de Radiação;
- SST – Modelo Shear Stress Transfer;
- TTCA – Temperatura Teórica de Chama Adiabática;
- RMS - Root Mean Square;
- Re – nº de Reynolds;
- Da – nº de Damköhler;

### SÍMBOLOS E OPERADORES

- $\nabla$  - Operador Gradiente;
- $\nabla \cdot$  - Operador Divergente;
- $\Delta$  - Diferença de uma Variável;
- $\partial$  - Derivada Parcial;

**LETRAS GREGAS**

$\alpha$  – gesso produzido em pressões maiores que a ambiente;

$\beta$  – gesso produzido à pressão ambiente

$\varepsilon$  – dissipação Turbulenta;

$\kappa$  – energia cinética Turbulenta;

$\lambda$  – condutividade térmica;

$\rho$  – massa específica;

$u$ - coeficiente estequiométrico;

$\phi$  – razão equivalente;

$\mu$  – Viscosidade;

$\mu_{\text{eff}}$  – viscosidade efetiva de turbilhões;

$\mu_t$  – viscosidade turbulenta;

$\sigma$  – constante de Stefan-Bolztmann;

# 1 INTRODUÇÃO

A gipsita, um mineral não metálico de larga ocorrência natural, é um sulfato de cálcio dihidratado contendo 79,0% de sulfato de cálcio e 21,0% de água de cristalização. Calcinação até a perda de 1,5 moléculas de água, constitui-se num hemidrato estável, comercialmente denominado de gesso, cuja característica mais importante é a capacidade de rehidratação em presença de umidade, acompanhada do fenômeno da pega e o retorno à estrutura cristalina da gipsita. (HOLDRIGE, 1975).

Na indústria, de um modo geral, a gipsita é utilizada como carga para papel, na fabricação de tintas, discos, pólvora, botões de fósforos, no acabamento de tecidos de algodão, e como distribuidor e carga de inseticidas. Pode também ser adicionada à água empregada na fabricação de cerveja para aumentar a sua "dureza", no polimento de chapas estanhadas e como *filler* na construção de estradas asfaltadas. A indústria química utiliza a gipsita e a anidrita para obter vários produtos, dentre os quais podem ser citados: ácido sulfúrico, enxofre elementar, cimento, barrilha, cloreto de cálcio, sulfato de amônio e carbonato de cálcio (SOBRINHO, 2001).

O gesso encontra a sua maior aplicação na indústria da construção civil, embora também seja muito utilizado na confecção de moldes para as indústrias cerâmica, metalúrgica e de plásticos; em moldes artísticos, ortopédicos e dentários; como agente desidratante; como aglomerante do giz e na briquetagem do carvão. Por sua resistência ao fogo, se emprega gesso na confecção de portas corta fogo; na mineração de carvão para vedar lâmpadas, engrenagens e áreas onde há perigo de explosão de gases. Isolantes para cobertura de tubulações e caldeiras são confeccionados com uma mistura de gesso e amianto. Isolantes acústicos são obtidos pela adição de material poroso ao gesso (SOBRINHO, 2001).

O minério de gipsita ( $\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ ) da região do Araripe, matéria-prima para a fabricação de gesso, é considerado o de melhor qualidade no mundo, apresentando um teor que varia de 88% a 98% de pureza (BALTAR et al., 2004). No estado de Pernambuco, a cadeia produtiva do Araripe é composta por 28 minas de gipsita em atividade, 80 calcinadoras, 50% das quais integradas verticalmente com fábricas de artefatos de gesso; 230 unidades autônomas produtoras desses artefatos. Estimativas do Sindugesso (Sindicato das Indústrias de Gesso) indicam que em todo Polo essas atividades econômicas geram cerca de 12.000 empregos diretos, sendo 950 na mineração, 3.900 na calcinação e 7.150 na fabricação de pré-moldados e 60.000 empregos indiretos.

Atualmente no Polo Gesseiro do Araripe-PE, a produção de gesso é realizada através de queima direta e indireta, através de fornos calcinadores que utilizam óleo BPF, coque de petróleo, gás natural e lenha, que geralmente é clandestina (SOUZA, 2006). Os processos de obtenção destes produtos, embora na sua maioria tecnicamente viáveis, enfrentam grandes obstáculos no que tange à viabilidade econômica. Cada forno apresenta diferentes características de construção, condições de operação, assim como eficiência térmica para obter a mesma quantidade de gesso. Entretanto, devido ao envolvimento de vários parâmetros de calcinação, o controle é de alta complexidade, muitas vezes gera produtos de qualidade não homogênea. A maioria dos fornos utilizados para produção de gesso é de baixa eficiência térmica e o controle dos principais parâmetros de calcinação, tais como temperatura e tempo de residência, são realizados manualmente. Como consequência, é produzido gesso de qualidade insatisfatória, deixando assim de adquirir competitividade para exportação (SOUZA, 2006).

A Fluidodinâmica Computacional (CFD) pode ser descrita de forma generalizada como a simulação numérica de todos aqueles processos físicos e/ou físico-químicos que apresentam escoamento. Em muitas indústrias, os produtos estão relacionados diretamente com a Dinâmica dos Fluidos e se investe grandes quantidades de recursos para desenvolver novas tecnologias na área, contudo o investimento para a obtenção de resultados experimentais é muito dispendioso, e, devido a isto, vem se investindo muito em modelagem matemática e simulação numérica para obtenção destes resultados (PIAIA, 2009). Esta metodologia é relativamente barata e gera resultados muito satisfatórios. Sua metodologia se baseia nas equações fundamentais dos fenômenos de transporte: balanço de massa, energia e momento. Partindo daí são criados modelos matemáticos, e a partir deles, geralmente um sistema de equações diferenciais parciais ou ordinárias, estas equações, quando submetidas a condições de contorno e iniciais apropriadas, representam, matematicamente, um problema particular (SHAMES, 1973).

Desejando associar alta-eficiência, minimização de impacto ambiental e produtos de melhor qualidade, busca-se encontrar um método eficiente, e que principalmente, seja independente de análises experimentais, caracterizando a originalidade do projeto, que através de uma ferramenta computacional se possa criar modelos matemáticos que representem com precisão o processo de calcinação da gipsita, obtendo vantagens como: menor tempo e custo, e ainda independência com relação à planta do forno rotativo contínuo a gás natural.

De forma geral, este trabalho tem como objetivo, estudar e elaborar um modelo que possa representar o comportamento do forno rotativo piloto, realizando simulações e adotando modelos adequados de hidrodinâmica, transferência de massa, transferência de calor e taxa de reações, utilizando medidas experimentais, como o perfil de temperatura dos gases ao longo do reator, para validar os resultados simulados. Obtendo assim modelos adequados, que possam ser usados na extrapolação de fornos rotativos contínuos na produção de gesso em escala industrial.

O projeto foi realizado no Laboratório de Processos Catalíticos (LPC) do Departamento de Engenharia Química da Universidade Federal de Pernambuco (DEQ/UFPE), onde se encontra o forno piloto de calcinação de gipsita. A parte de simulação computacional foi realizada no CEERMA (Centro de Estudos e Ensaaios em Risco e Modelagem Ambiental) /UFPE, utilizando o software ANSYS CFX 12.0.

## 2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

### 2.1 GESSO

#### 2.1.1 História do Gesso

O gesso constitui um dos mais antigos materiais de construção fabricados pelo homem, como a cal e a terra cota. Sua obtenção consiste simplesmente num aquecimento a uma temperatura não muito elevada, e uma posterior redução a pó, de um mineral relativamente abundante na natureza: a pedra de gesso ou a gipsita. (THOMPSON, 1956). Pesquisas arqueológicas mostraram que o emprego do gesso remonta a 8000 a.C. (ruínas na Síria e na Turquia). As argamassas em gesso e cal serviram de suporte em afrescos decorativos, na realização de pisos e mesmo na fabricação de recipientes (BOLOGNA, 1976). Foram encontrados, também, nas ruínas da cidade de Jericó, de 6000 a.C. traços do emprego de gesso como molde, função que até hoje ele também desempenha. O gesso também foi encontrado nas pirâmides do Egito, sendo aplicado em juntas dos enormes blocos de pedra, e como revestimento interno. Entretanto, o filósofo Theofraste, que viveu entre o IV e III séculos a.C. e que foi discípulo de Platão e Aristóteles, tornou-se conhecido por seu “Tratado de Pedra”, que é o mais antigo e o mais documentado dos autores que se interessaram pelo gesso. Theofraste citou a existência de geseiras em Chipre, na Fenícia e na Síria, e indicava que o gesso era utilizado, como argamassa, para a ornamentação, nos afrescos, nos baixos relevos e na confecção de estátuas (BOLOGNA, 1976).

Na África, foi com um gesso de altíssima resistência que os bárbaros construíram as barragens e os canais, que garantiram, por muitos séculos, a irrigação das palmeiras de Mozabe, assim como, utilizaram o gesso junto aos blocos de terra virgem que ergueram suas habitações. Na França, após a Invasão Romana, iniciou-se o conhecimento dos processos construtivos chamados de pedreiros de gesso. O modelo de construção utilizado constituía-se do emprego do gesso voltado ao aproveitamento das construções em madeira, sendo utilizadas até as épocas Carolíngias e Merovíngias. A cerca dessa época, o gesso foi enormemente utilizado na região parisiense para a fabricação de sarcófagos decorados, e inúmeros exemplares foram encontrados quase intactos. A partir do século XII e por todo o fim da Idade Média, as construções utilizando as argamassas com gesso eram desejadas por oferecerem diversas vantagens. O gesso para estuque e alisamento já era conhecido. Uma carta real mencionava, em 1292, a exploração de 18 jazidas de pedra de gesso na região parisiense. O gesso era, então, empregado na fabricação de argamassas, na colocação de placas de madeira, no fechamento de ambientes e na construção de chaminés monumentais. (ANGELERI, 1982).

A Renascença foi marcada pelo domínio do emprego do gesso para a decoração e, época do barroco, foi largamente chamado de gesso de estuque. Deve-se, em grande parte, a generalização do emprego do gesso na construção civil, na França, a uma lei de Luiz XIV, promulgada em 1667. Em 1768, Lavoisier presenteou a Academia de Ciências Francesa, com o primeiro estudo científico dos fenômenos que são à base da preparação do gesso. No século XIX, os trabalhos de diversos autores, particularmente, os de Van't Hoff e, sobretudo, o de Lê Chatelier, permitiu abordar uma explicação científica para a

desidratação da gipsita. A partir do século XX, em função da evolução industrial, os equipamentos para a fabricação do gesso deixaram de ter um conceito rudimentar e passaram a agregar maior tecnologia, assim como a melhoria tecnológica dos produtos passou a facilitar suas formas de emprego pelo homem (*Syndicat National des Industries du Plâtre*, 1982). Hoje em dia o gesso é um produto de vanguarda e, embora seu uso tenha se generalizado na indústria da construção civil, ainda há muito espaço para crescimento de mercado com os benefícios ecológicos nomeados na introdução deste trabalho.

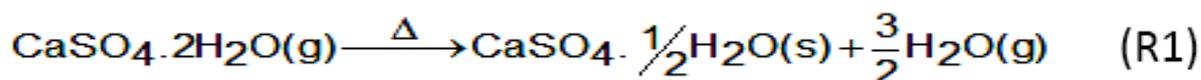
### 2.1.2 Gipsita

O minério de gipsita se origina em bacias sedimentares, por evaporação da fase líquida. Trata-se, pois, conceitualmente, de um evaporito e constitui depósitos em forma de camadas, lentes e bolsões, intercalados em sequências sedimentares, cujas idades geológicas podem variar do Paleozóico ao Cenozóico (SOBRINHO, 2001). A gipsita, mineral abundante na natureza, é um sulfato de cálcio hidratado cuja fórmula química é  $\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ , que geralmente ocorre associado à anidrita, sulfato de cálcio anidro  $\text{CaSO}_4$ , que tem pouca expressão econômica. A gipsita tem dureza 2 na escala de Mohs, densidade 2,35, índice de refração 1,53, é bastante solúvel e sua cor é variável entre incolor, branca, cinza, amarronzada, a depender das impurezas contidas nos cristais. A sua composição química (ou estequiométrica) média apresenta 32,5% de CaO, 46,6% de  $\text{SO}_3$  e 20,9% de  $\text{H}_2\text{O}$ . Trata-se de um mineral muito pouco resistente que, sob a ação do calor, desidrata-se parcialmente, originando um semi-hidrato conhecido comercialmente como gesso ( $\text{CaSO}_4 \cdot \frac{1}{2}\text{H}_2\text{O}$ ). Os termos “gipsita”, “gipso” e “gesso”, são frequentemente usados como sinônimos. Todavia, a denominação gipsita é reconhecidamente a mais adequada ao mineral em estado natural, enquanto gesso é o termo mais apropriado para designar o produto calcinado (SOBRINHO, 2001). O mineral gipsita, geralmente, é encontrado em granulação fina a média, estratificada ou maciça, coloração em tons claros de amarelo e marrom, constituindo as denominadas rochas gipsíferas (SOBRINHO, 2001).

Destas, fazem parte também outros minerais, eventuais e sempre em quantidades subordinadas, entre os quais se incluem anidrita, calcita, dolomita, halita, enxofre, quartzo e argilas. Na realidade são essas rochas que constituem o que se costuma designar de minério de gipsita, sempre que os teores de  $\text{SO}_3$  ou de gipsita presentes satisfazem às exigências do mercado consumidor. Quanto à forma de ocorrência, são conhecidas três variedades de gipsita: como cristais monoclinicos prismáticos ou tabulares constituem a variedade chamada selenita; como agregado de fibras paralelas, mais ou menos longas, é denominada gipsita fibrosa e sob a forma maciça ou compacta de granulação muito fina (a mais frequente e economicamente importante), que quando se apresenta com a cor branca translúcida ou suavemente sombreada é denominada alabastro (SOBRINHO, 2001).

### 2.1.3 Obtenção do Gesso

A calcinação da gipsita produz o gesso, segundo a seguinte reação de desidratação térmica:



O sulfato de cálcio hemihidratado, comercialmente denominado de gesso, tem a propriedade de se tornar plástico e endurecer rapidamente quando misturado com água, podendo ser moldado da forma desejada e dando rigidez e dureza ao produto final, pela recuperação de sua estrutura primitiva. As condições de calcinação irão determinar o tipo de hemidrato produzido (gesso- $\alpha$  ou gesso- $\beta$ ) ou ainda a produção de anidrita (SANTOS, 1996).

A produção do gesso por desidratação térmica da gipsita compreende as seguintes etapas:

Extração da gipsita: A extração da gipsita é efetuada em minas a céu aberto, através do desmonte (com explosivos), obtendo-se o minério em blocos relativamente grandes.

Britagem da gipsita: Consiste na fragmentação dos blocos da gipsita vinda da mineração em britadores e rebritadores até a granulometria adequada aos fornos de calcinação a serem utilizados.

Calcinação ou Desidratação Térmica da Gipsita: A calcinação é a mais importante etapa do processo produtivo do gesso, exigindo condições termodinâmicas e cinéticas bem definidas para cada tipo de produto desejado. A temperatura teórica para que a reação de desidratação da gipsita ocorra é de 106°C, porém a velocidade da reação só será razoável, considerando a produção industrial, para temperaturas superiores.

Mistura: Operação necessária para assegurar a homogeneidade do produto final ou para permitir a produção de gessos aditivados.

Pulverização: Consiste na moagem do gesso após e sua calcinação para obtenção de granulometria final.

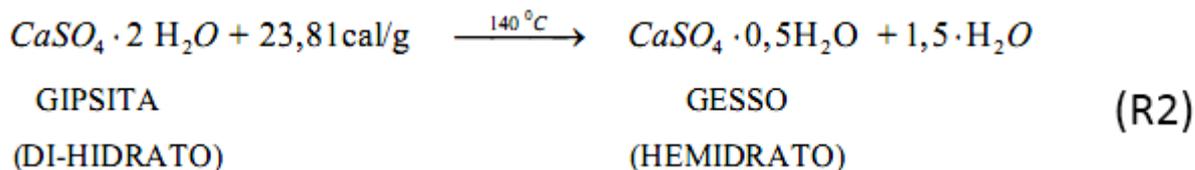
Ensilagem: O gesso, já resfriado, é estocado em silos metálicos fechados para evitar sua alteração e também para obter uma maior homogeneidade na composição final (BENACHOUR, PERES e SANTOS, 2008).

Quando se aquece o minério de gipsita, de 20 °C a 1400 °C distinguem-se cinco fases de reação do sulfato de cálcio di-hidratado:

1 – Na temperatura ambiente o minério é essencialmente sulfato de cálcio di-hidratado;

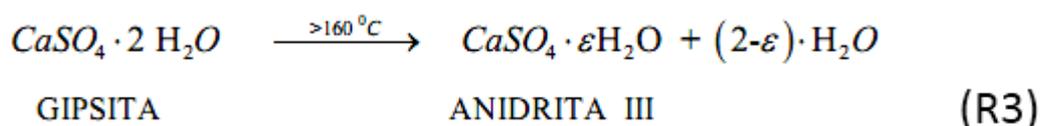
2 – Ao alcançar 60 °C, conforme as condições experimentais de desidratação inicia-se a perda, pela gipsita, de  $\xi$  moles de água, sendo  $\xi$  variando entre 0 e 2. É possível, entretanto, admitir a existência de mais de um tipo de semi-hidrato, dependendo da temperatura e pressão do processo, com teor de água que varia entre 0,15 e 0,66 moles; sendo o hemidrato, caracterizado pela presença de meio mol de molécula de água (Ver equação estequiométrica abaixo), uma

forma particular intermediária de grande interesse comercial pela sua estabilidade química. Os graus de hidratação e de cristalinidade do produto estão associados ao processo de obtenção e condições de tratamento térmico (BENACHOUR, PERES e SANTOS, 2008).

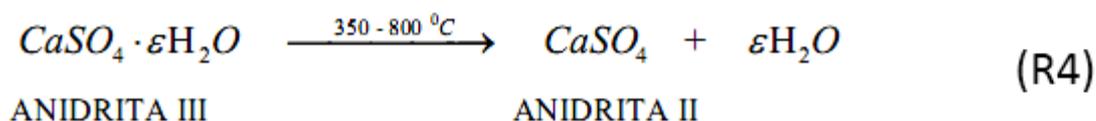


A reação acima apresentada pode ser observada experimentalmente a temperaturas a 60°C, mas nesta faixa de temperatura ocorre uma cinética muito lenta, tornando a reação imperceptível. Em processos industriais, a velocidade requerida de produção é conseguida operando-se em uma faixa de temperatura entre 120° e 140°C. Quando a desidratação é realizada em autoclave, a pressões acima de uma atmosfera manométrica, um produto caracterizado por cristais bem formados dá origem a um semi-hidrato denominado de gesso alfa ( $\alpha$ ). Se a retirada da água combinada é realizada sob pressões próximas da atmosfera, obtém-se um sólido micro poroso e caracterizado por cristais mal formados denominado de gesso beta ( $\beta$ ). A má formação destes cristais é atribuída à saída relativamente brusca de água de hidratação no decorrer da reação (BENACHOUR, PERES e SANTOS, 2008).

3 – Quando a temperatura de 200°C é alcançada, o semi-hidrato perde quase toda sua água e obtém-se uma anidrita solúvel e instável, denominada anidrita III. A anidrita solúvel, de fórmula  $\text{CaSO}_4 \cdot \xi \text{H}_2\text{O}$ , indica que este produto pode conter água de cristalização, embora em baixo teor, variável entre 0,06 a 0,11 moles de água. A anidrita III, sendo muito reativa, transforma-se em semi-hidrato em contato com a umidade do ar. Esta hidratação tem sido verificada após 12 horas de armazenamento do produto em atmosfera com umidade relativa em torno de 80%. Industrialmente esta re-hidratação ocorre após o gesso sair do forno em uma etapa do processo conhecida como estabilização do gesso.



4 – Ao se alcançar cerca de 400°C, a anidrita III transforma-se em anidrita II, sendo esta última hidratação lenta.



Quando a temperatura de reação aumenta acima de 400°C, a velocidade de re-hidratação do produto obtido é cada vez mais lenta. A 500°C necessita-se de mais quatro dias, em média, para re-hidratar metade da anidrita. A 600°C necessita-se de mais de 10 dias para re-hidratar metade da anidrita e, a 800°C, o produto é considerado de difícil re-hidratação (Figura 1).

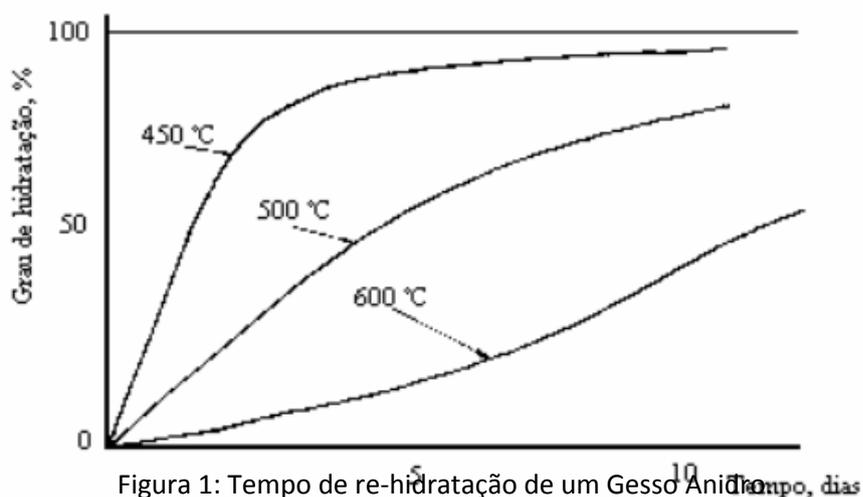


Figura 1: Tempo de re-hidratação de um Gesso Anidro

A anidrita II, também chamada de Anidrita artificial solúvel, ou ainda Anidrita supercalcina  $\text{CaSO}_4$ , pode ser obtida entre 350 e 800°C. Entre 700 – 800°C é denominada de gesso calcinado à morte. Sua produção controlada entre 400 e 500°C produz uma anidrita utilizada como um dos constituintes dos gessos de construção, principalmente o gesso para revestimento de parede, por conferir resistências especiais à erosão e a compressão para mistura final.

5 – Quando se calcina o minério da gipsita acima de 800°C, o produto é similar à anidrita natural encontrada em minério de gipsita, conhecida como anidrita I, de hidratação extremamente difícil.

6 – Quando se atinge temperaturas de calcinação acima de 1250°C, a gipsita decompõe-se em óxido de cálcio e anidrido sulfúrico (BENACHOUR, PERES e SANTOS, 2008).

#### 2.1.4 Principais Fornos utilizados no Polo Gesseiro do Araripe

Os principais fornos encontrados no Polo Gesseiro do Araripe, Estado de Pernambuco, podem ser classificados de acordo com o tipo de contato entre os gases de combustão e o minério, contato direto ou indireto, e quanto ao tipo de funcionamento, batelada ou contínuo. Em fornos de contato indireto, os gases da combustão aquecem uma superfície metálica que por sua vez transfere o calor para a gipsita. Este modelo é muito comum no Araripe em forno do tipo: panela, marmitta rotativa (Figura 2) e rotativo de contato indireto. No contato direto, os gases quentes aquecem diretamente a gipsita. Seu modelo mais comum de aplicação é o rotativo de contato direto (Figura 3).



Figura 2: Forno marmita rotativa utilizando lenha como combustível.



Figura 3: Forno rotativo de contato direto utilizando BPF como combustível.

Evidentemente, os fornos de contato direto apresentam maior eficiência térmica quando comparados aos de contato indireto (Tabela 1).

Tabela 1: Características térmicas dos principais fornos utilizados no Araripe.

<b>Tipo de Forno</b>	<b>Combustível</b>	<b>Eficiência Térmica (%)</b>
Panela *	Lenha	9,40
Marmita Rotativa *	Lenha	14,00
	Óleo BPF	35,00
Rotativo Contato Direto	Óleo BPF	45,00

\* contato indireto

Fonte: BENACHOUR, PERES e SANTOS (2008)

No processo batelada, o forno é inicialmente carregado com gipsita para em seguida começar a calcinação. Depois de calcinado, o produto é retirado do forno para ser carregado novamente. Com estas características podemos citar os fornos panela e marmitta rotativa. No processo contínuo, o forno é continuamente alimentado com gipsita enquanto o produto é retirado também de forma contínua. Este modelo é mais eficiente, pois não apresenta tempo de descarregamento do forno, além de ser melhor para o monitoramento da qualidade do produto. Enquadram-se neste grupo os fornos rotativos de contato indireto e direto (BENACHOUR, PERES e SANTOS, 2008).

Os processos contínuos têm por características fornecer produtos de melhor qualidade. Isto se dá porque nestes processos as condições operacionais se mantêm constantes durante todo o tempo de fabricação. Desta forma os produtos apresentam características praticamente idênticas o que reforça o conceito de qualidade. Nestes processos, a ausência de paradas faz com que não haja desperdício de tempo de operação. Desta forma, o tempo de fabricação pode ser otimizado, e ganhar-se em produtividade e desempenho das máquinas e funcionários (BENACHOUR, PERES e SANTOS, 2008).

#### 2.1.4.1. Forno rotativo de contato direto

Os fornos rotativos são considerados um dos mais importantes equipamentos para calcinação de minério de gipsita para obtenção de gesso beta por desidratação térmica. São construídos a partir de um cilindro metálico relativamente longo, o qual possui rotação em torno de seu comprimento de maior dimensão – axial. Esse cilindro deve possuir uma leve inclinação para induzir os sólidos a movimentos simultâneos de rotação e de translação; entrando por uma extremidade do forno e saindo pela outra. Em fornos de contato indireto, o cilindro permanece disposto dentro da câmara de combustão onde o combustível é queimado (BENACHOUR, PERES e SANTOS, 2008).

Em fornos de contato direto, o gás flui concorrentemente no interior do mesmo cilindro, estabelecendo um contato tipo gás/sólido. Para promover um melhor contato gás-sólido ou retenção de material mais efetiva, a maioria dos fornos rotativos é construída com aletas. De acordo com seu posicionamento são classificadas em axiais, dispostas paralelamente aos comprimentos axiais, e radiais, colocadas de forma radial nas seções transversais do cilindro. As aletas axiais visam promover maior contato gás-sólido por transportar e distribuir os sólidos por toda a área da seção transversal do forno, como resultado do movimento de rotação do mesmo. As aletas radiais favorecem a estagnação do material sólido em determinadas zonas desejadas, o que aumenta a capacidade de retenção do equipamento. Um bom projeto para as aletas é essencial à obtenção de uma rápida e homogênea troca de calor entre os componentes da mistura em escoamento (BENACHOUR, PERES e SANTOS, 2008). Os fornos rotativos, conforme exposto, são equipamentos de alta simplicidade e dinâmica que permitem obter um processo contínuo de contato direto, favorecendo a eficiência e o controle do processo.

## 2.1.5 Gás Natural

O gás natural é um combustível fóssil encontrado em rochas porosas no subsolo, resultantes da decomposição de matéria orgânica durante milhões de anos. O acúmulo de energia solar sobre matérias orgânicas pré-históricas, soterradas em grandes profundidades, forma o gás natural graças à acomodação da crosta terrestre. Em suas primeiras etapas de decomposição, a matéria orgânica da origem ao petróleo, enquanto que o gás natural é formado nos últimos estágios de degradação. As reservas de gás natural podem ser encontradas em diferentes locais do planeta, em locais subterrâneos, sendo em maior quantidade o número de reservatórios que contém gás natural associado ao petróleo. Nestes casos, o gás recebe a designação de gás natural associado. Quando o gás natural contém pouca ou nenhuma quantidade de petróleo ele é chamado de gás não associado (GASNET, 2009).

Por estar no estado gasoso, não é necessário atomizar o gás natural antes de queimar. Sua eficiência, limpeza e versatilidade tornaram este combustível largamente utilizado nas indústrias, no comércio, em residências, em veículos, dentre outras aplicações. Nos países de clima frio, seu uso residencial e comercial é predominantemente para aquecimento do ambiente. Na indústria, o gás natural é utilizado como combustível para fornecimento de calor, geração de eletricidade e de força motriz, como matéria-prima nos setores químico, petroquímico, de fertilizantes, e como redutor siderúrgico na fabricação de aço (COPERGÁS, 2009).

Porém, a principal vantagem deste insumo energético é a preservação do meio ambiente, pois o gás natural é um combustível pouco-poluente. Sua combustão é limpa, isenta de fuligem e outros materiais que possam prejudicar o meio ambiente. Geralmente, ele apresenta baixos teores de contaminantes como o nitrogênio, dióxido de carbono, água e compostos de enxofre. O gás natural permanece no estado gasoso, sob pressão atmosférica e temperatura ambiente (PETROBRAS, 2009).

### 2.1.5.1. Propriedades do Gás Natural

O gás natural é incolor, não tem cheiro, é insípido, e menos denso que o ar, possui baixo ponto de vaporização, e seu limite de inflamabilidade em mistura com o ar é superior aos dos demais gases combustíveis. Geralmente, ele é odorizado antes de ser entregue aos consumidores. A odorização é realizada para garantir que em casos de vazamentos, a sua presença será percebida, facilitando a detecção, e prevenção de acidentes. Normalmente, ele enviado aos clientes através de sistemas de tubulações (MOKHATAB, POE e SPEIGHT, 2006).

A Tabela 2 resume as principais propriedades do gás natural (GN) oriundo da Companhia Pernambucana de Gás (COPERGÁS), utilizado no presente trabalho de pesquisa como combustível para calcinação da gipsita.

Tabela 2 – Propriedades do gás natural usado neste trabalho (T = 25 °C e P = 1atm).

<b>Nome</b>	<b>Valor médio</b>
<i>Poder calorífico superior</i>	9400 kcal/m <sup>3</sup>
<i>Poder calorífico inferior</i>	8500 kcal/m <sup>3</sup>
<i>Densidade relativa</i>	0,63 kg/m <sup>3</sup>
<i>Massa específica</i>	0,78 kg/m <sup>3</sup>
<i>Peso molecular médio</i>	18,064 g/mol
<i>Fator de compressibilidade R-K</i>	0,9973
<i>Viscosidade</i>	0,010816 cP
<i>Cp/Cv</i>	1,2816
<i>Ponto de orvalho</i>	- 56 °C
<i>Ponto de ignição</i>	482 – 632°C
<i>Limite inferior de inflamabilidade da mistura</i>	5 % vol Ar
<i>Limite superior de inflamabilidade da mistura</i>	15 % vol Ar

Fonte: Copergás (2009)

### 2.1.5.2. Composição do gás natural

O principal constituinte do gás natural é o metano. Os outros constituintes são hidrocarbonetos parafínicos como o etano, propano e butano, podendo apresentar nitrogênio, dióxido de carbono e sulfeto de hidrogênio em sua composição. Quantidades de argônio, hidrogênio e hélio também podem estar presente. A composição típica do gás natural (Tabela 3) pode variar muito, dependendo de fatores, tais como: reservatórios, processo de produção, condicionamento, processamento, transporte, dentre outros (MOKHATAB, POE e SPEIGHT, 2006).

A composição comercial do gás natural depende da composição do gás natural bruto, do mercado atendido, do uso final e do produto gás que se deseja. Apesar desta variabilidade da composição, são parâmetros fundamentais que determinam a especificação comercial do gás natural o teor de enxofre total, o teor de gás sulfídrico, o teor de gás carbônico, o teor de gases inertes, o ponto de orvalho da água, o ponto de orvalho dos hidrocarbonetos e o poder calorífico (GASNET, 2009). A Tabela 4 apresenta a composição do gás natural fornecido pela COPERGÁS e utilizado nos ensaios experimentais desta pesquisa.

Tabela 3 – Composição típica do Gás natural

<i>Nome</i>	<i>Fórmula</i>	<i>Volume (%)</i>
<i>Metano</i>	$CH_4$	> 85
<i>Etano</i>	$C_2H_6$	3 - 8
<i>Propano</i>	$C_3H_8$	1 - 2
<i>Butano</i>	$C_4H_{10}$	< 1
<i>Pentano</i>	$C_5H_{12}$	< 1
<i>Dióxido de carbono</i>	$CO_2$	1 - 2
<i>Sulfeto de hidrogênio</i>	$H_2S$	< 1
<i>Nitrogênio</i>	$N_2$	1 - 5
<i>Hélio</i>	$He$	< 0,5

Fonte: Mokhatab, Poe e Speight (2006).

Tabela 4 – Composição do gás natural utilizado no presente trabalho.

<i>Nome</i>	<i>Fórmula</i>	<i>Volume (%)</i>
<i>Metano</i>	$CH_4$	89,0
<i>Etano</i>	$C_2H_6$	7,0
<i>Propano</i>	$C_3H_8$	0,24
<i>Butano e mais pesados</i>	$C_4H_{10+n}(C_NH_N)$	0,05
<i>Nitrogênio</i>	$N_2$	2,64
<i>Dióxido de carbono</i>	$CO_2$	1,05
<i>Oxigênio</i>	$O_2$	0,02

Fonte: COPERGÁS (2009)

## 2.2 COMBUSTÃO

Pode-se definir combustão, de forma geral, como a liberação de energia térmica, quando se tem a reação entre um combustível e um oxidante. Segundo o dicionário (Webster's Dictionary), combustão é uma rápida oxidação capaz de gerar calor, ou luz e calor; também ocorrendo em processos lentos, liberando uma quantidade menor de luz e calor (HOLMAN, 2000). Trata-se de um processo essencial para a vida no planeta, pois a combustão é utilizada direta ou indiretamente, em vários processos como refino de combustíveis, geração de eletricidade, preparação de alimentos e produtos farmacêuticos, transporte, etc. Em 1996, eram advindos de processos de combustão cerca de 85% da energia utilizada nos Estados Unidos (TURNS, 2000).

É importante salientar, que o processo de combustão é rápido e, em geral, libera também gases, produtos de combustão a altas temperaturas. Porém não é só energia térmica que é liberada no processo de combustão, outras formas de energia como energia eletromagnética (luz), energia elétrica (íons ou elétrons livres) e energia mecânica (ruído), são liberadas em pequenas quantidades (SEFARTY, 2007). O início do processo de combustão é baseado no chamado triângulo de fogo: Combustível, Oxigênio e Temperatura. Já outros três fatores definem a velocidade e a química da queima do combustível, sendo responsáveis por manter a combustão: Temperatura, Tempo e Turbulência. (SEFARTY, 2007). Pode-se classificar como combustíveis compostos que tem sua oxidação como uma fonte de energia suficiente para aproveitamento. O avanço na qualidade dos combustíveis pode associar ao processo:

- Aumento da eficiência e confiabilidade;
- Redução de emissões;
- Desenvolvimento de sistemas com maior flexibilidade;
- Redução do desgaste dos materiais do processo;
- Melhoria no controle e monitoração do processo (TURNS, 2000).

A combustão pode ainda ser classificada com relação ao processo de formação das chamas. Quando ocorre contato entre combustível e comburente antes da zona de formação da chama é conhecida como pré-misturada, já aquelas em que o contato combustível/comburente só acontece na zona de formação da chama é chamada de não pré-misturada, como pode ser visualizado nas figuras 4 e 5 (BAUKAL, 2001).

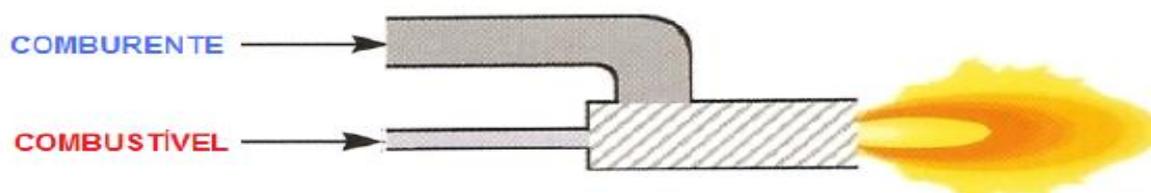


Figura 4: Chama Pré-Misturada (BAUKAL, 2001).

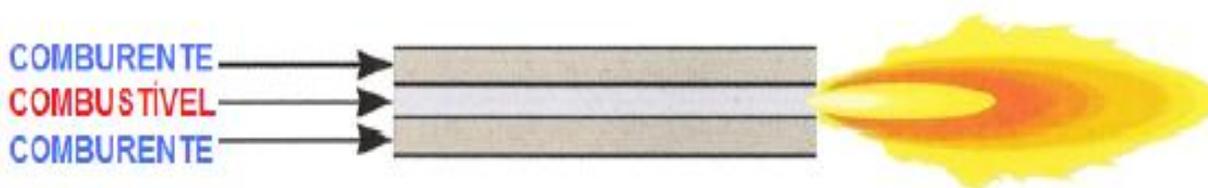
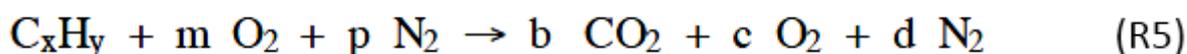


Figura 5: Chama Não Pré-Misturada (BAUKAL, 2001).

Associados ao processo de combustão de um hidrocarboneto existem reações químicas bastante complexas, podendo ou não, ter várias etapas. Essas reações intermediárias são funções de fatores como tipo e composição do combustível, mistura entre combustível e comburente, geometria do queimador e da câmara de combustão, e também a temperatura do processo, podendo originar substâncias como  $\text{CO}_2$ ,  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{SO}_2$ ,  $\text{O}_2$ ,  $\text{N}_2$  e  $\text{CO}$  (SOUZA, 2006). Como reação clássica da combustão completa de um hidrocarboneto, podemos apresentar a seguinte equação:



Para o metano, por exemplo, as seguintes reações podem ocorrer ( $T_{\text{ref}} = 25^\circ\text{C}$ ):

- 1)  $\text{CH}_4 + 2\text{O}_2 \rightarrow \text{CO}_2 + 2\text{H}_2\text{O}_{(\text{v})} + 191760 \text{ Kcal/Kmol}$
- 2)  $\text{CH}_4 + \text{Calor} \rightarrow \text{C} + 2\text{H}_2 - 17889 \text{ Kcal/Kmol}$
- 3)  $\text{C} + \text{O}_2 \rightarrow \text{CO}_2 + 94052 \text{ Kcal/Kmol}$
- 4)  $2\text{C} + \text{O}_2 \rightarrow 2\text{CO}_2 + 26416 \text{ Kcal/Kmol}$
- 5)  $2\text{CO} + \text{O}_2 \rightarrow 2\text{CO}_2 + 67636 \text{ Kcal/Kmol}$
- 6)  $\text{C} + \text{CO}_2 \rightarrow 2\text{CO}_2 - 41220 \text{ Kcal/Kmol}$
- 7)  $2\text{H}_2 + \text{O}_2 \rightarrow 2\text{H}_2\text{O}_{(\text{v})} + 57798 \text{ Kcal/Kmol}$
- 8)  $\text{CH}_4 + 2\text{H}_2\text{O}_{(\text{v})} \rightarrow \text{CO} + 3\text{H}_2 - 49271 \text{ Kcal/Kmol}$

(SEFARTY, 2007).

Para a combustão completa de uma determinada quantidade de combustível, é necessário uma quantidade específica de oxigênio (ar). Caso essa quantidade não seja suficiente, ocorrerá combustão incompleta, ou seja, perda de calor potencial. Uma quantidade maior, gera perda de gás de combustão e pode causar também diminuição da temperatura (SEFARTY, 2007). Dessa forma para cada combustível, é necessário o cálculo da quantidade exata de ar para que ocorra a combustão completa. Esta quantidade depende dos teores de C e H que o combustível contém, e é definida pela relação ar-combustível. De forma geral, se utiliza excesso de ar em fornos e câmara de combustão, para garantir uma melhor homogeneização

entre o ar e o combustível (SEFARTY, 2007). O ar seco tem a seguinte composição e volume específico:

Tabela 5 – Composição do Ar (SEFARTY, 2007).

COMPONENTES	% VOLUME	% MASSA	VOLUME ESPECÍFICO
O <sub>2</sub>	21	23,2	0,85 m <sup>3</sup> /kg a 25°C
N <sub>2</sub>	79	76,8	

Segundo Sefarty(2007) podemos classificar certas quantidades utilizadas em fornos e câmaras de combustão:

**Oxigênio Teórico** (ou estequiométrico): Quantidade de oxigênio necessária para a combustão completa do combustível, em condições ideais, ou seja, sem que haja falta ou sobra de oxigênio;

**Ar Teórico:** Trata-se da quantidade de ar correspondente ao ar teórico;

**Ar Real:** Trata-se da quantidade de ar utilizada efetivamente na combustão, na qual existe mais oxigênio do que o necessário para a combustão teórica. Esta quantidade adicional é chamada de excesso de ar e é definida em percentagem do ar teórico;

**Gás Real:** É a quantidade de gases gerada efetivamente na combustão, ou seja, a quantidade de gases de combustão correspondente ao ar real. O gás real pode ser apresentado em duas formas: em base seca ou úmida, em função de ser considerada, ou não, a água contida no mesmo.

## 2.3 FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL

### 2.3.1 Métodos Numéricos

Nas últimas três décadas, os métodos numéricos tiveram uma revolução, impulsionada pelo avanço na área da microeletrônica. Tornou-se possível a utilização de métodos para a solução de modelos complexos e com poucas simplificações, graças a produção de computadores com alto desempenho. (TELEKEN, 2009).

Na atualidade, os desenvolvedores (engenheiros e projetistas) com a função de solucionar determinados problemas tem a seu dispor, fundamentalmente, três elementos de análise:

- Métodos Analíticos;
- Experimentação Numérica;
- Métodos Experimentais.

A 1ª opção, os métodos analíticos, sofrem com várias limitações, devido aos problemas serem desviados do fenômeno físico real com a utilização de hipóteses simplificadoras, como aproximação de geometria complexas para geometrias mais simples. A 2ª opção, métodos experimentais, retrata a configuração real de problemas, porém além de ser a opção mais problemática, financeiramente falando, em vários casos é altamente perigosa como experimentos em reatores nucleares (GONÇALVES, 2007).

Já a utilização de métodos numéricos, é a opção que apresenta menos restrições, solucionando problemas complexos, para vários tipos de geometrias, e principalmente, oferecendo resultados de forma mais rápida e econômica, quando comparado aos métodos experimentais. O que se tem observado é a sofisticação de laboratórios para que se possa atender a demanda de experimentos cada vez mais avançados. Porém esses resultados estão sendo utilizados na verdade para validar modelos matemáticos e numéricos, para o entendimento de fenômenos ainda não explicados, que precisam ser modelados matematicamente. Dessa forma, os métodos experimentais serão realizados com menor frequência, cabendo ao computador efetuar o trabalho repetitivo (GONÇALVES, 2007).

O processo de modelagem computacional de um fenômeno físico, tem como primeiro passo, identificação de fatores que influenciam o problema de forma significativa. Para a formulação de um modelo matemático consistente, constituído por um conjunto de equações diferenciais, se faz necessário uma escolha correta dos princípios físicos adotados, bem como, adequada determinação de variáveis dependentes e independentes que possam descrever o problema. Para o segundo passo, se faz necessário obter uma solução do modelo matemático, para isso se dispõe de vários métodos numéricos, dentre os mais conhecidos: Método das Diferenças Finitas (MDF), Método dos Elementos Finitos (MEF) e Método dos Volumes Finitos (MVF) (GONÇALVES, 2007).

Um dos métodos, o método das diferenças finitas, foi criado com a intenção de resolver sistemas de equações diferenciais. Já o método dos elementos apareceu, basicamente, com a finalidade de aplicação na análise estrutural. Com o passar do tempo, o método dos elementos finitos passou a ser aplicado a problemas de mecânica dos fluidos e, desde então, vem consolidando-se como um método mais geral de solução de equações diferenciais parciais. De Já o método dos volumes finitos (MVF), é um método originário de um princípio físico, onde um certo volume de controle, é dividido em vários pequenos volumes de controle, e nesses pequenos volumes as propriedades são conservadas (MALISKA, 2004).

Como primeiro passo, o MVF parte para a discretização do espaço, ou seja, divisão do domínio em volumes de controle, que pode ser chamado de geração do grid. Entre certo domínio são criados vários nós como os pontos W, E e P. A fronteira ou face de cada nó está no ponto médio da distância entre os nós adjacentes. Ou seja, cada nó está “cercado” por um pequeno volume de controle ou célula. E nesse volume de controle é garantido convergência nas equações de conservação de massa, energia e movimento (MIGUEZ, 2008).

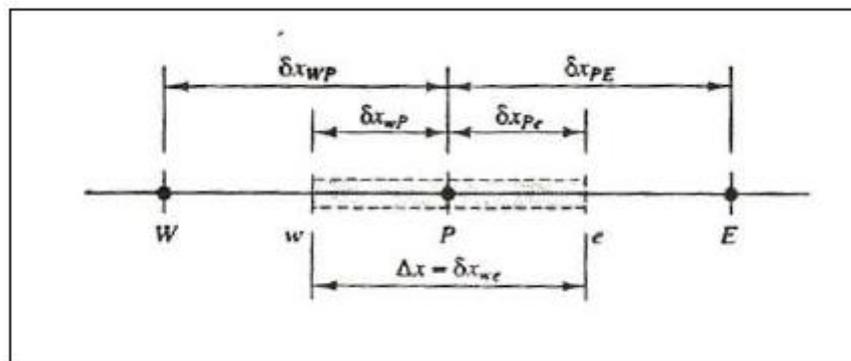


Figura 6: Célula em torno de um ponto (MALISKA, 2004).

Comparando o método dos volumes finitos com o método das diferenças finitas, obtêm-se uma vantagem, que trata-se da não exigência de utilização de malhas estruturadas, apenas, que são formadas por quadriláteros ou hexaedras não alinhadas aos eixos principais, como os que aparecem em grades esféricas ou curvilíneas. Sendo assim, é permitido o uso de malhas não-estruturadas, que possuem polígonos ou poliedros sem qualquer padrão explícito de conectividade, permitindo se trabalhar com geometrias mais complexas, tendo elas pequenas saliências e/ou reentrâncias, sendo isso permitido devido ao cálculo das variáveis poder ser realizado nos nós localizados no meio dos elementos por interpolação (MALISKA, 2004).

Contudo, o método dos volumes finitos pode ser formulado tanto no método dos elementos finitos como nas diferenças finitas, isso graças à integração dos fluxos normais às superfícies, que garante conservação das propriedades ao longo do domínio geométrico (GAZONI, 2011).

Esse método providencia soluções discretas, utilizando malhas não estruturadas para geometrias complexas. O procedimento para a obtenção das soluções através do método dos volumes finitos pode ser dividida em 4 etapas básicas:

1. Divisão do domínio computacional em volumes de controle finitos;
2. Integração da equação diferencial parcial nos volumes de controle criados na etapa 1;
3. Discretização de termo da Equação diferencial para que a mesma possa ser escrita como um conjunto de equações algébricas;
4. Solução do sistema de equações algébricas resultante, usando métodos diretos ou iterativos.

(GAZONI, 2011).

### 2.3.2 CFD

A expressão, em inglês, “Computational Fluid Dynamics” ou CFD, pode ser traduzida como Fluidodinâmica Computacional, e trata da simulação numérica de todos aqueles processos físicos e/ou físico-químicos que apresentam escoamento. Aplicando princípios de conservação (Massa, Quantidade de Movimento e Energia), no domínio do espaço e do tempo, pode-se obter campos de concentração, velocidades, pressão, temperaturas, propriedades turbulentas e outras (DECKER, 2003). Porém, para aplicar a simulação numérica utilizando um processador computacional, deve ter domínio da parte de fenômenos de transporte, dessa forma os resultados obtidos serão condizentes com o problema físico real (DECKER, 2003).

O uso da simulação numérica de forma aleatória, pode acarretar em 2 tipos erros clássicos quando se compara os resultados simulados com os valores reais. O primeiro tipo são os erros numéricos, que ocorrem devido a uma má solução das equações diferenciais do modelo simulado. Para encontra-lo realiza-se uma validação numérica, que consiste na comparação do resultado com valores analíticos ou numéricos, analisando se a equação diferencial foi resolvida corretamente, assim, trata-se de uma avaliação da qualidade do método numérico. O outro tipo de erro comum está associado a escolha incorreta das equações que representam o fenômeno físico. Dessa forma, para que não se cometa esse tipo de erro deve-se ter um modelo matemático que represente com fidelidade o modelo físico (MALISKA, 2004).

O uso da fluidodinâmica computacional é aplicado, muitas vezes, paralelamente com a parte experimental inserindo dessa forma os dados experimentais no modelo matemático. Comparando os resultados gerados na simulação numérica com os dados obtidos experimentalmente é possível validar ou não um modelo matemático para uma determinada situação. Dentre as motivações para o uso da ferramenta de CFD na engenharia química pode-se destacar um trecho do relatório *Vision 2020 document for the U.S. Chemical Industry* intitulado “*Technology Roadmap for CFD*” que identificou as seguintes metas de desempenho para o uso de CFD:

- Diminuição do tempo entre pesquisa básica e projeto final de plantas industriais para 3-5 anos;
- Redução do consumo energia e melhoria da eficiência em 20%;
- Aumento da facilidade de projeto, com a diminuição dos riscos devido à redução ou eliminação de erros de projeto;
- Promoção de projetos inovadores;
- Redução do consumo de combustível por unidade de produto;
- Otimização dos processos, com aumento dos rendimentos.

(MIGUEZ, 2008).

Apesar de apresentar todos os benefícios acima citados, é importante salientar que o CFD não é uma metodologia livre de erros, e não é, nem tem o objetivo de acabar com a realização de experimentos em bancadas e unidades piloto. Ainda mais, a utilização de soluções numéricas acarreta a possibilidade de mudanças nas equações originais, assim como erros associados a aproximações, ou seja, um erro relacionado a forma de resolução do problema, que é conhecido como erro de truncamento (MIGUEZ, 2008).

### 2.3.3 Processo de Modelagem

Como já mencionado, as técnicas de CFD são ferramentas computacionais para simular o comportamento de sistemas envolvendo processos físicos e químicos diversos como transferência de massa, calor e quantidade de movimento (VERSTEEG, MALALASEKERA, 1995). Para tanto, resolvem-se as equações próprias de cada modelo em uma determinada região de interesse onde condições de contorno são conhecidas. Basicamente, pode-se dividir o processo todo em 5 etapas:

- **Criação da Geometria:** nesta etapa é criada a geometria do domínio considerado, através de ferramentas CAD (*Computer Aided Design*);
- **Criação da Malha:** Depois é confeccionada uma malha sobre a geometria criada anteriormente, que corresponde à divisão do domínio em volumes de controle, nos quais é obtida a solução das equações propostas;
- **Pré-Processamento:** nesta etapa são escolhidos os modelos, as condições de contorno e os parâmetros para se obter a solução numérica;
- **Solução Numérica:** nesta etapa ocorre a solução numérica em si, sendo um processo não iterativo, salvo pela possibilidade das simulações em alterar alguns parâmetros simples e acompanhar pontos de monitoramento pré-definidos;

- **Pós-Processamento:** etapa onde os resultados são analisados através da criação de gráficos cartesianos, campo de variáveis, campos vetoriais, etc. (VERSTEEG, MALALASEKERA, 1995).

### 2.3.3.1 Geração da Geometria

A solução de problemas pela metodologia CFD deve partir da representação, em escala, do sistema a ser estudado, essa representação é conhecida como geração da geometria. A geometria deve englobar toda a região onde ocorrerá escoamento, determinando assim um volume de controle do sistema (MIGUEZ, 2008).

### 2.3.3.2 Geração de Malha

Para a resolução de um problema de CFD é necessário proceder à discretização da geometria (no caso, pelo método dos volumes finitos). Se a geometria puder ser considerada como o domínio do problema, pode-se encarar cada elemento da malha como uma espécie de subdomínio, onde todas as equações serão resolvidas. Dessa forma, o método dos volumes finitos permite a conversão de equações diferenciais parciais em sistemas de equações algébricas. Essa discretização se dá pela geração de malhas estruturadas uniformes ou não uniformes, não estruturadas e híbridas (MOURA, 2010).

Pode-se classificar malhas estruturadas como aquelas que possuem o mesmo número de vizinhos, sendo de A malha estruturada é formada por elementos de formatos hexaedros, sejam ortogonais ou não. Malhas desse tipo sempre possuem o mesmo número de vizinhos e apresentam uma maior facilidade de geração associada ao alto grau intuitivo dos algoritmos numéricos empregados na solução dos problemas (VIEIRA, 2010). A malha não estruturada, diferentemente das estruturadas, possui células com números diferentes de vizinhos e apresenta elementos de geometrias diversas como triângulos, tetraedros e prismas. Tal malha é mais aplicada em geometrias com maior complexidade, com presença de curvas e mudanças de direção devido à variedade de suas células. Já as malhas híbridas são uma mistura das malhas estruturadas e não estruturadas (VIEIRA, 2010).

As malhas tetraédricas (não-estruturadas) são caracterizadas por não exibirem uma regularidade na distribuição dos pontos. Este tipo de malha permite a construção de geometrias complexas de maneira mais fácil do que se obteria com malha estruturada. O emprego de domínios com volumes tetraédricos é útil quando se precisa de uma resposta muito rápida para uma determinada variável, situação normalmente encontrada na indústria (JOAQUIM JUNIOR, 2008).

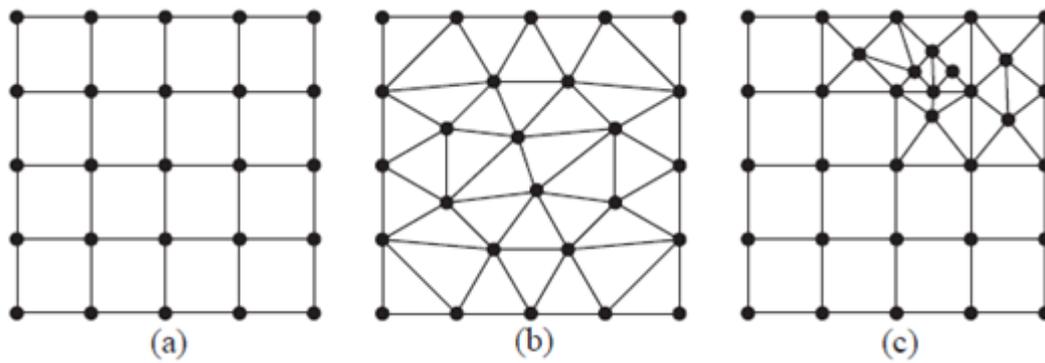


Figura 7: Malha estruturada(a), não estruturada(b) e híbrida(c).

A qualidade do resultado de um problema em CFD, é função da quantidade de elementos e como eles estão organizados. De forma geral, a precisão da solução melhora com o aumento do número de elementos da malha. Porém, isso acarreta em um maior custo computacional, que deve ser balanceado com o “hardware” que se encontra disponível (VERSTEEG, MALALASEKERA, 1995).

### 2.3.3.3 Pré-Processamento

Esta etapa do pré-processamento tem por finalidade criar as condições viáveis para o *solver* resolver o problema físico. Os modelos físicos que serão utilizados na simulação são selecionados, além das propriedades do fluido e condições de contorno (planos de simetria, paredes isotérmicas e adiabáticas, por exemplo). Também se devem definir regiões de entrada e saída, além de locais definidos para a transferência de calor ou que haja periodicidade, assim como valores iniciais necessários para a resolução do sistema de equações em cada domínio de controle. Neste estágio, devem-se inserir todas as considerações relativas ao escoamento, ou seja, colocar todas as informações corretas para que a simulação ocorra sem erros ou sem gerar resultados não esperados (MALISKA, 2004).

É possível criar expressões a serem utilizadas na definição de alguns parâmetros, como densidade, viscosidade dinâmica, condutividade térmica, e mesmo monitoradas pelo controle da simulação (MALISKA, 2004).

### 2.3.3.4 Solução Numérica (Solver)

É a parte principal de um pacote de CFD, pois ele implementa as técnicas numéricas de solução e seus parâmetros para resolver os problemas físicos de modo apropriado (CFD. online.com). Resumidamente, os métodos numéricos que formam a base do solver passam pelos seguintes passos:

- Aproximação das variáveis incógnitas do escoamento através de funções simples;
- Discretização, pela substituição das aproximações mencionadas acima nas equações de transporte que governam o escoamento, com manipulações matemáticas subsequentes;
- Linearização do sistema de equações algébricas resultantes;

- Definição da estratégia de solução do sistema de equações algébricas lineares;
- Solução dos sistemas de equações algébricas lineares.

(CFD. online.com).

### 2.3.3.5 Pós-Processamento

No pós-processamento é possível visualizar a geometria e volumes de controle, gerar vetores que indicam a direção e magnitude do escoamento, visualização da variação de variáveis escalares (variáveis as quais têm apenas magnitude, sem direção, como a temperatura e pressão) em todo o domínio e obter vídeos de casos transientes (MALISKA, 2004).

### 2.3.4 Modelagem Matemática

Pode-se definir como modelagem matemática a representação, na forma de equações, de um fenômeno real para um fenômeno ideal, tratando-se de uma abstração da realidade (BASTOS, 2005). Essa abstração tem por objetivo encontrar a solução do problema ideal, e depois transformá-la em solução para a situação real. A seguir, são apresentadas as 3 equações básicas para um problema CFD:

- **Conservação de Massa:**

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

A equação que representa a conservação de massa, também conhecida como equação da continuidade, pode ser obtida analisando a taxa mássica de escoamento que entra e sai de um determinado elemento infinitesimal de volume. Desta forma, o acréscimo ou decréscimo temporal da massa específica neste volume é controlado pelo transporte convectivo de massa sobre as fronteiras deste volume de controle (BASTOS, 2005).

- **Conservação de Movimento:**

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

A equação representa a taxa de variação temporal de momento do fluido é igual à resultante das forças que atuam sobre o fluido. O 1º termo do lado esquerdo representa a variação em função do tempo, já o 2º termo representa a transferência de quantidade de movimento do fluido devido ao fluxo do fluido (transporte convectivo). O 1º termo do lado direito da equação representa o divergente de contribuição da pressão. O 2º termo diz respeito

a transferência de quantidade de movimento de forma molecular (transporte difusivo). E o último termo representa um termo fonte, que inclui contribuição devido as forças do corpo somente (BINELI, 2009).

- **Conservação de Energia:**

$$\frac{\partial(\rho h_{tot})}{\partial t} - \frac{\partial p}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho U h_{tot}) = \nabla \cdot (\lambda \nabla T) + \nabla \cdot (U \cdot \tau) + U \cdot S_M + S_E \quad (3)$$

Essa equação informa que a taxa de variação temporal da energia é igual à soma do fluxo líquido, ou resultante, de calor para o fluido com o trabalho realizado sobre o fluido. O 1º termo do lado esquerdo da equação representa a taxa de mudança no tempo da densidade multiplicada pela entalpia. O 2º termo relaciona a taxa de mudança no tempo da pressão. O 3º termo descreve o fluxo de energia fora do elemento. O 2º termo do lado direito diz respeito ao trabalho devido as forças viscosas (trabalho da viscosidade). O 3º termo representa o trabalho devido a fonte de quantidade de movimento externa. E o último termo diz respeito a uma, possível, fonte de energia (BINELI, 2009).

Essas equações são discretizadas, e originam volumes infinitesimais, que tem as leis de conservação garantidas no seu domínio. Partindo de um volume infinitesimal, percebe-se que ele será função do tempo e do espaço, sofrendo alterações e mudando sua forma a medida que se desloca. Generalizando, pode-se creditar a convecção e a difusão, o domínio do movimento de um fluido em um escoamento. Denomina-se convecção ao processo de deslocamento e o processo de difusão (NAVARRO, 2011).

### 2.3.4.1 Modelos de Combustão

A altíssima velocidade de reação é uma das melhores formas de caracterizar o processo de combustão, ocasionando vantagens e desvantagens a esse processo. Como desvantagem podemos citar a inviabilidade do emprego da equação cinética de reação, já como vantagem, é possível simplificar os modelos partindo de que as reações sejam instantâneas, assim elas seriam regidas apenas pela taxa de mistura entre os reagentes (ALENCAR, 2007).

Como análise fundamental para simulação de combustão, se faz necessário a análise de um determinado parâmetro, que seria a relação entre a velocidade característica do processo químico e a velocidade característica do processo de mistura turbulento (PINHEIRO JÚNIOR, 2010). Dessa forma, para um processos químico muito rápido, a combustão seria controlada pelo processo de mistura turbulento e as condições estequiométricas, já para velocidade do processo químico lenta, a combustão seria governada pela velocidade de reação (PINHEIRO JÚNIOR, 2010). Para isso, utiliza-se um número adimensional que permite comparar o tempo de processo químico, ( $t_Q$ ) e de mistura turbulenta, ( $t_T$ ), esse número é conhecido como Damköhler ( $Da$ ):

$$Da = \frac{t_T}{t_Q} \quad (4)$$

Assim, a condição de cinética química extremamente veloz corresponde a uma condição tal que  $Da \gg 1$ ; enquanto que  $Da \ll 1$  representa uma condição governada essencialmente pela cinética química (PINHEIRO JÚNIOR, 2010).

#### 2.3.4.1.1 Eddy Dissipation

O modelo Eddy Dissipation é baseado no conceito de que a reação química é tão rápida, relativo ao, processo de transporte no fluxo. Dessa forma, a medida que se mistura os reagentes, a nível molecular, eles instantaneamente formam produtos. O modelo assume que a taxa de reação pode ser diretamente relacionado com o tempo necessário para misturar reagentes ao nível molecular (ANSYS, 2009). Em escoamentos turbulentos, este tempo de mistura é dominado pelas propriedades de Eddy e, por conseguinte, a taxa é proporcional a um tempo de mistura definida pela energia cinética turbulenta,  $\kappa$  e dissipação,  $\varepsilon$ :

$$\text{Taxa} \propto \frac{\varepsilon}{\kappa} \quad (5)$$

(ANSYS, 2009).

Este conceito de controle de reação é aplicável em muitos problemas industriais onde as taxas de reação de combustão são rápidas em comparação com as taxas de mistura de reagentes (ANSYS, 2013). No modelo de dissipação de Eddy, a taxa de progresso de reação elementar  $k$ , é determinada pelas duas expressões seguintes:

$$R_k = A \frac{\varepsilon}{k} \min \left( \frac{[I]}{v'_{kI}} \right) \quad (6)$$

em que  $[I]$  representa a concentração molar do componente  $I$ , incluindo apenas os reagentes (ANSYS, 2009).

$$R_k = A B \frac{\varepsilon}{k} \left( \frac{\sum_P (I) W_I}{\sum_P v''_{kI} W_I} \right) \quad (7)$$

onde  $P$  faz um loop sobre todos os componentes do produto na reação elementar  $k$  (ANSYS, 2009).

### 2.3.4.1.2 Finite Rate Chemistry

O modelo Finite Rate Chemistry, assume que a taxa de progresso da reação elementar  $k$  pode ser reversível se uma reação inversa possa ser definida. Portanto, a taxa de progresso  $R_k$ , é calculada como:

$$R_k = \left( F_k \prod_{I=A,B,\dots}^{N_C} [I]^{r'_{kI}} - B_k \prod_{I=A,B,\dots}^{N_C} [I]^{r''_{kI}} \right) \quad (8)$$

(CFDonline.com).

em que  $[I]$  é a concentração molar do componente  $I$ ,  $F_k$  e  $B_k$  são as constantes de velocidade para as reações direta e inversa, respectivamente. Onde  $r$  representa a ordem de reação do componente  $i$  na reação elementar  $k$ . Esta ordem de reação é igual ao coeficiente estequiométrico para reações elementares, podendo ser diferente para certas reações globais (CFDonline.com).

Este modelo despreza os efeitos das flutuações turbulentas. A única exigência na fórmula para as constantes de velocidade para a reação direta e inversa é assumir uma dependência da temperatura de Arrhenius como:

$$F_k = A_k T^{\beta_k} \exp\left(-\frac{E_k}{RT}\right) \quad (9)$$

$$B_k = A_k T^{\beta_k} \exp\left(-\frac{E_k}{RT}\right) \quad (10)$$

(CFDonline.com).

### 2.3.4.2 Modelos de Turbulência

Pode-se definir como turbulência, o aparecimento de instabilidades num escoamento originalmente estável, as quais se multiplicam por um processo não-linear e regeneram-se finalmente em um regime turbulento. A Turbulência é um fator importantíssimo no processo de mistura das espécies químicas, como também na transferência de calor, sendo caracterizada pelo tensores de Reynolds na fase contínua (BASTOS, 2005).

#### 2.3.4.2.1 Modelo $\kappa$ - $\epsilon$

Trata-se do modelo mais utilizado para caracterizar a turbulência, devido principalmente a grande representatividade de fenômenos e o menor esforço computacional. O modelo  $\kappa$ - $\epsilon$  é baseado em duas equações, uma associada as escalas de velocidade e outra a escalas de comprimento, na qual cada uma delas possui uma equação de transporte (DIAS, 2009).

O modelo  $\kappa$ - $\epsilon$  é baseado na viscosidade efetiva de turbilhões, e assim:

$$\mu_{eff} = \mu + \mu_t \quad (11)$$

onde,  $\mu_t$  é a viscosidade turbulenta (TELEKEN, 2009).

O modelo  $k$ - $\epsilon$  assume que a viscosidade turbulenta é ligada à energia cinética e dissipação turbulenta pela relação:

$$\mu_t = C_\mu \rho_\alpha \left( \frac{k_\alpha^2}{\epsilon_\alpha} \right) \quad (12)$$

e,

$$G_k = \mu_t \left[ 2 \times \left( \frac{\partial v_{x,k}}{\partial x} \right)^2 + 2 \times \left( \frac{\partial v_{y,k}}{\partial y} \right)^2 + 2 \times \left( \frac{\partial v_{z,k}}{\partial z} \right)^2 + \left( \frac{\partial v_{x,k}}{\partial y} + \frac{\partial v_{y,k}}{\partial x} \right)^2 + \left( \frac{\partial v_{y,k}}{\partial z} + \frac{\partial v_{z,k}}{\partial y} \right)^2 + \left( \frac{\partial v_{z,k}}{\partial x} + \frac{\partial v_{x,k}}{\partial z} \right)^2 \right] \quad (13)$$

onde  $C_{\mu}$  é uma constante e  $G_k$  é o termo de geração da energia cinética turbulenta (TELEKEN, 2009).

Os valores de  $k$  e  $\varepsilon$  vem diretamente das equações diferenciais de transporte para a energia cinética turbulenta e taxa de dissipação turbulenta (TELEKEN, 2009). Dessa forma, em sistemas multifásicos teremos:

$$\frac{\partial}{\partial t} (r_\alpha \rho_\alpha k_\alpha) + \nabla \cdot \left( r_\alpha \left( \rho_\alpha U_\alpha k_\alpha - \left( \mu + \frac{\mu_{t\alpha}}{\sigma_k} \right) \nabla k_\alpha \right) \right) = r_\alpha (P_\alpha - \rho_\alpha \varepsilon_\alpha) + T_{\alpha\beta}^{(k)} \quad (14)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (r_\alpha \rho_\alpha \varepsilon_\alpha) + \nabla \cdot \left( r_\alpha \rho_\alpha U_\alpha \varepsilon_\alpha - \left( \mu + \frac{\mu_{t\alpha}}{\sigma_k} \right) \nabla \varepsilon_\alpha \right) = r_\alpha \frac{\varepsilon_\alpha}{k_\alpha} (C_{\varepsilon 1} P_\alpha - C_{\varepsilon 2} \rho_\alpha \varepsilon_\alpha) + T_{\alpha\beta}^{(\varepsilon)} \quad (15)$$

onde os termos adicionais  $T_{\alpha\beta}^{(k)}$  e  $T_{\alpha\beta}^{(\varepsilon)}$  representam os coeficientes de transferência entre fases  $k$  e  $\varepsilon$ , respectivamente, e  $C_{\varepsilon 1}$ ,  $C_{\varepsilon 2}$ ,  $C_{\mu}$ ,  $k$  e  $\varepsilon$  são constantes do modelo. A Tabela 6 apresenta os valores das constantes empíricas do modelo  $k$ - $\varepsilon$  padrão (TELEKEN, 2009).

Tabela 6: Valores das constantes empíricas do modelo  $k$ - $\varepsilon$  padrão.

Constante	$C_{\varepsilon 1}$	$C_{\varepsilon 2}$	$C_{\mu}$	$\sigma_k$	$\sigma_\varepsilon$
Valor	0,09	1,44	1,92	1,00	1,30

(TELEKEN, 2009).

### 2.3.4.2.2 Modelo SST

SST, que significa *Shear-Stress Transport*, trata-se de um modelo híbrido, que apresenta melhor precisão que o  $k$ - $\varepsilon$ , em regiões próximas da parede, mas também possui boa previsão para gradientes moderados de pressão adversa. Isso se deve principalmente, a necessidade de incorporar a distância da parede, necessária nas funções de mistura (DALL'AGNOL, 2010). Segundo Ronchetti (2008), pode-se impor um limite à viscosidade turbulenta, dado que leva-se em consideração o efeito do transporte da tensão cisalhante, da seguinte maneira:

$$\mu_t = \rho \frac{a_1 k}{\max(a_1 \omega, SF_2)} \quad (16)$$

Sendo  $a_1$  uma constante e  $F_2$  uma função combinação. As funções de combinação são fundamentais neste modelo, sendo baseadas na distância da superfície mais próxima e nas variáveis do escoamento (RONCHETTI, 2008).

$$F_1 = \tanh(\arg_1^4) \quad (17)$$

$$\arg_1 = \min \left( \max \left( \frac{\sqrt{k}}{\beta' \omega y}, \frac{500\nu}{y^2 \omega} \right), \frac{4\rho k}{CD_{k\omega} \sigma_{\omega 2} y^2} \right) \quad (18)$$

$$CD_{k\omega} = \max \left( 2\rho \frac{1}{\sigma_{\omega 2} \omega} \nabla k \nabla \omega, 1 \times 10^{-10} \right) \quad (19)$$

(RONCHETTI, 2008).

Sendo  $y$  a distância da superfície mais próxima:

$$F_2 = \tanh(\arg_2^4) \quad (20)$$

$$\arg_2 = \max \left( \frac{\sqrt{k}}{\beta' \omega y}, \frac{500\nu}{y^2 \omega} \right) \quad (21)$$

(RONCHETTI, 2008).

Para a solução do modelo SST, é necessário saber a distância de um nó à parede, uma escala de comprimento para determinar em que local do domínio deve-se utilizar o modelo misto. A distância em relação à parede é calculada a partir da escala de comprimento da parede  $l_w$ , onde  $\Delta l_w = 1$ , e a distância da parede é dada por:

$$\text{Distância da parede} = \sqrt{(|l_w|^2 + 2l_w) - |\nabla l_w|} \quad (22)$$

(RONCHETTI, 2008).

### 2.3.4.2.3 Modelo RNG $\kappa$ - $\varepsilon$

O RNG  $\kappa$ - $\varepsilon$  é baseado numa técnica estatística (chamada teoria do grupo de renormalização). Assemelha-se em forma, com o modelo  $\kappa$ - $\varepsilon$  padrão, mas inclui os alguns aperfeiçoamentos:

- A existência de um termo adicional em sua equação  $\varepsilon$  que melhora a precisão para os fluxos rapidamente tensos;
- Tem incluído, o chamado efeito de “redemoinho” em turbulência, aumentando a precisão para esses tipos de fluxos;
- Apresenta uma fórmula analítica para os números de Prandtl turbulentos, enquanto que o  $\kappa$ - $\varepsilon$  padrão, utiliza constantes;
- Apresenta uma fórmula, vindo da viscosidade efetiva, que leva em consideração baixos números de Reynolds.

(ANSYS, 2009).

Deve-se determinar a viscosidade efetiva, pela teoria RNG, através de um processo de eliminação de escala resultando na seguinte equação diferencial para a viscosidade turbulenta onde:

$$d\left(\frac{\rho^2 \kappa}{\sqrt{\varepsilon \mu}}\right) = 1,72 \frac{\hat{v}}{\sqrt{\hat{v}^3 - 1 + C_v}} d\hat{v} \quad (23)$$

sendo

$$\hat{v} = \frac{\mu_{ef}}{\mu} \quad \text{e} \quad C_v \approx 100 \quad (24)$$

(HUAPAYA, 2008).

A integração dessa equação permite obter uma descrição mais precisa da variação do transporte turbulento com o número de Reynolds efetivo (HUAPAYA, 2008). Isto permite melhor descrever o escoamento de baixo número de Reynolds e escoamentos próximos às paredes. Para altos números de Reynolds, a equação acima resulta em:

$$\mu_{ef} = \frac{c_\mu \rho \kappa^2}{\varepsilon} \quad (25)$$

sendo o valor de  $c_\mu = 0,0845$  é determinado pela teoria RNG (HUAPAYA, 2008).

Para baixos números de Reynolds, a viscosidade turbulenta se torna:

$$\mu_{ef} = \mu \left( 1 + \sqrt{\frac{c_\mu}{\mu} \rho \frac{\kappa}{\varepsilon}} \right)^2 \quad (26)$$

(HUAPAYA, 2008).

É possível afirmar que existem sérias razões para questionar a validade da hipótese de isotropia local em escoamentos turbulentos fortemente cisalhados, propondo a introdução de um termo adicional no lado direito da Equação (HUAPAYA, 2008).

$$R = 2\mu S_{ij} \frac{\partial u'_k}{\partial x_i} \frac{\partial u'_k}{\partial x_j} \quad ; \quad S_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (27)$$

Ainda utilizando a Teoria do Grupo de Renormalização, propõem um modelo para este termo, baseado na escala de expansão,  $h$ , a qual é definida como a razão entre a frequência da turbulência e a escala de deformação média:

$$\eta = S\kappa / \varepsilon, \text{ onde } S = \sqrt{2S_{ij}S_{ij}} \quad (28)$$

(HUAPAYA, 2008).

Assim o novo termo de  $R$  é escrito como:

$$R = \frac{c_\mu \eta^3 (1 - \eta / \eta_0) \varepsilon^3}{1 + \beta \eta^3} \frac{\varepsilon^2}{\kappa} \quad ; \quad \beta = 0,012 \quad ; \quad \eta_0 = 4,38. \quad (29)$$

(HUAPAYA, 2008).

A equação proposta para a taxa de dissipação da energia cinética da turbulência torna-se:

$$\frac{\partial(\rho\varepsilon)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho \bar{u}_j \varepsilon) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \frac{\mu_{ef}}{\sigma} \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right) + c_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{\kappa} P_k - c_{2\varepsilon} \rho \frac{\varepsilon}{\kappa} - R \quad (30)$$

(HUAPAYA, 2008).

Se este novo termo for incluído na “constante”  $c_{2\varepsilon}$  da equação da dissipação, as equações de  $\kappa$ - $\varepsilon$  guardam a mesma forma das equações de transporte do modelo  $\kappa$ - $\varepsilon$  tradicional:

$$\frac{\partial(\rho\kappa)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho \bar{u}_j \kappa) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \frac{\mu_{ef}}{\sigma_\kappa} \frac{\partial \kappa}{\partial x_j} \right] + P_\kappa - \rho\varepsilon \quad (31)$$

$$\frac{\partial(\rho\varepsilon)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho \bar{u}_j \varepsilon) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \frac{\mu_{ef}}{\sigma_\varepsilon} \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] + c_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{\kappa} P_\kappa - c_{2\varepsilon}^* \rho \frac{\varepsilon}{\kappa} \quad (32)$$

$$c_\mu = 0,085 \quad ; \quad c_{1\varepsilon} = 1,42 \quad ; \quad c_{2\varepsilon} = 1,68 + R_\varepsilon^* \quad ; \quad \beta = 0,012 \quad ; \quad \sigma_\varepsilon = \sigma_\kappa = 0,7179$$

$$R_\varepsilon^* = \frac{c_\mu \rho \eta^3 [1 - (\eta / \eta_0)]}{1 + \beta \eta^3} \quad (33)$$

(HUAPAYA, 2008).

### 2.3.4.3 Modelos de Radiação

Em fornos e câmaras de combustão, a radiação térmica é um dos mecanismos mais importantes de transferência de calor. Ela se dá devido ao fato que toda superfície que possui temperatura maior que o zero Kelvin emite radiação na forma de ondas eletromagnéticas, dessa forma não necessita de um meio para se propagar, ou seja, se propaga até no vácuo (DONOSO, 2008). A lei que rege a transferência de calor por radiação é a Lei de Radiação de Stefan-Boltzmann para o Corpo Negro:

$$q = \sigma \cdot \varepsilon \cdot T^4 \text{ (W/m}^2\text{)} \quad (34)$$

Onde  $\sigma$  é a constante de Stefan Boltzmann e igual a  $3.6705119 \cdot 10^{-8} \text{ (W/m}^2\text{K}^4\text{)}$ ;  $\varepsilon$  é a emissividade do meio; e  $T$  é a temperatura absoluta do meio ou superfície quente (ALENCAR, 2007). Sendo assim para se modelar a radiação térmica, se faz necessário obter o volume total de absorção e emissão de radiação térmica, seguindo o procedimento:

- a) resolver a Equação de Transporte da Radiação Espectral (RTE);
- b) obter o termo de geração interna de calor da equação de conservação de energia; e
- c) estimar os fluxos de calor das paredes (ALENCAR, 2007).

#### 2.3.4.3.1 P1 Method

O P1 Method é baseado na simplificação da equação de transporte da radiação, assumindo que a intensidade de radiação é isotrópica, dessa forma se adiciona uma equação de transporte, ocasionando um maior custo computacional (ANSYS, 2009). Além disso, trata como limites transparentes entradas, saídas e aberturas, dessa forma, toda a energia de saída é absorvida, e a energia de entrada é calculado como um corpo negro em cada local (ANSYS, 2009). O espectro radiativo de fluxo de calor é dado por:

$$q_{rv} = -\frac{1}{3(K_{av} - K_{sv}) - AK_{sv}} \nabla G_v \quad (35)$$

(ANSYS, 2009):

onde  $G_v$  é a radiação espectral incidente, dada por:

$$G_v = \int I_v d\Omega_s \quad (36)$$

(RONCHETTI,2008).

O espectro da radiação incidente resulta da substituição da equação 33 na equação de transporte de radiação, sendo escrita na seguinte forma:

$$-\nabla \left( \frac{1}{3(K_{av} - K_{sv}) - AK_{sv}} \nabla G_v \right) = K_{av} (E_{bv} - G_v) \quad (37)$$

(VENSON, 2007).

### 2.3.4.3.2 Discrete Transfer

O modelo parte do princípio que a absorção e a emissão podem aumentar ou diminuir o fluxo de calor por radiação que atravessa um meio participante (OZISIK, 1990). Segundo Silva, 2005, a principal consideração do DTRM é que a radiação que parte de uma superfície discreta numa certa faixa de ângulos de sólidos pode ser aproximada por uma única direção. Ou seja, é preciso prever com suficiente precisão a transferência de calor entre superfícies, sem utilizar o cálculo do fator de forma (SILVA, 2005). O DTRM também assume que todas são difusas. Isto significa que a reflexão da radiação incidente sobre uma superfície é isotrópica com relação ao ângulo do sólido (SILVA, 2005). Dessa forma, pode-se adotar que a transferência de radiação se realiza num meio isotrópico, dando origem a expressão:

$$\frac{d I_v(r, s)}{d s} = -(K_{av} + K_{sv}) \cdot I_v(r, s) + K_a \cdot I_b(v, T) + \frac{K_{sv}}{4\pi} \int_{4\pi} I_v(r, s') \cdot d\Omega + S \quad (38)$$

(ALENCAR, 2007).

Assumindo que o meio seja homogêneo, tem-se:

$$I_v \approx I_v(r + dr) \quad q_v^R(r) \propto q_v^R(r + dr) \quad (39)$$

(ALENCAR, 2007).

Sendo assim, o modelo permite calcular a radiação  $I_v$  ao longo de raios saindo das paredes pela expressão:

$$I_v(r, s) = I_{v0} \cdot \exp[-(K_{av} + K_{sv}) \cdot s] + I_{bv} \cdot [1 - \exp(-K_a \cdot s)] + K_{sv} \cdot \bar{I}_v \quad (40)$$

Tendo  $I_{v0}$  é a intensidade da radiação saindo da parede;  $I_v$  é a intensidade média da radiação no meio;  $I_{bv}$  é a intensidade da radiação devida ao corpo negro; e  $s$  é a variável equivalente ao tempo, quando se aplica a Transformada de Laplace (ALENCAR, 2007).

### 2.3.4.3.1 Rosseland

Pode-se classificar o modelo de Rosseland como uma simplificação da Equação de Transporte Radiativa para o caso de meios óticos espessos. A aproximação Rosseland assume que a mídia é opticamente espessa e que a energia radiante emitida a partir de outros locais no domínio são rapidamente absorvidos e não têm influência no transporte local. Isto implica que a aproximação não é válida perto das paredes. Introduce um novo termo de difusão na equação de energia original, com um coeficiente de difusão fortemente dependente da temperatura (RONCHETTI,2008). O fluxo radiativo total em um meio opticamente espesso, e linearmente espalhante, pode ser escrito:

$$q_r = -\int \frac{4}{3\beta - CK_s} \nabla E_{bv} dv \quad (41)$$

Onde  $\beta$  é o coeficiente de extinção, absorção mais espalhamento (ANSYS, 2013). Quando a aproximação de Rosseland é introduzida na equação de transporte da energia, a condução e o fluxo radiativo podem ainda ser combinados da seguinte forma:

$$q = q_c + q_r \therefore -(\lambda + \lambda_r) \nabla T \quad (42)$$

Tendo

$$\lambda_r = -\frac{16\sigma n^2 T^3}{3\beta} \quad (43)$$

Onde  $\lambda$  é a condutividade térmica e  $\lambda_r$  é a condutividade radiativa total (RONCHETTI,2008).

## 2.4 TEMPERATURA TEÓRICA DE CHAMA ADIABÁTICA

Define-se temperatura teórica de chama adiabática como a temperatura que é alcançada num processo de combustão, quando se utiliza uma dada combinação de combustível e oxidante, sendo máxima quando a mistura é estequiométrica. Vale salientar, que essa temperatura trata-se de uma idealização, já que essa temperatura seria alcançada em um processo adiabático, ou seja, sem transferência de calor para o exterior, combustão incompleta, ou fenômenos de dissociação que ocasionariam temperaturas inferiores (MENDES, 2010).

Dessa forma a temperatura teórica de chama adiabática trata-se de uma abstração, dado que todos os processos reais sofrem algum tipo de perda, e isso torna-se ainda mais impossível quando se trabalha com altas temperaturas. Mesmo assim, o cálculo serve como parâmetro de comparação de potenciais de combustíveis para uma dada necessidade de calor e temperatura. Sendo assim, pode-se obter a temperatura adiabática de chama pode ser então calculada para uma massa unitária de combustível desde que se estabeleça a relação ar/combustível (GLAUCO, 2012)

## 3 MATERIAIS E MÉTODOS

### 3.1 EQUIPAMENTOS E MATERIAIS

#### 3.1.1 Descrição do Forno piloto utilizado na calcinação da Gipsita

O forno piloto de calcinação de gipsita (Figura 8), construído no Laboratório de Processos Catalíticos do Departamento de Engenharia Química da Universidade Federal de Pernambuco (DEQ/UFPE), tem diâmetro interno de 0,90 m e comprimento de 5,46 m ( $L/D = 6,07$ ). É confeccionado em chapa de aço carbono de 0,006 m de espessura e possui internamente quatro aletas axiais e uniformemente distribuídas. Duas destas aletas, diametralmente opostas, possuem terminais com inclinação de  $90^\circ$  e as outras duas de  $120^\circ$ , para promoverem um preenchimento mais uniforme da seção transversal do forno com os sólidos, permitindo um contato eficiente entre os componentes da mistura gás-sólido. Um conduto de aço inoxidável distribui três termopares para monitoração axial da temperatura dos gases. O regime de contato gás-sólido é do tipo concorrente, com as alimentações desses componentes sendo realizadas em uma mesma extremidade do equipamento. A rotação do forno é realizada por meio de um conjunto motor-redutor de 3 CV, conectado ao casco do forno via corrente dentada/cremalheira. O casco possui dois anéis de rolamento em aço forjado, apoiados sobre rolamentos também confeccionados em aço forjado.



Figura 8: Forno rotativo piloto para calcinação da gipsita – DEQ/UFPE.

A alimentação de sólidos para o sistema é realizada com auxílio de um elevador de caçambas, que faz a descarga em um silo. Esse reservatório-pulmão retém o minério particulado acima da câmara de alimentação e controla a vazão de sólidos com auxílio de uma válvula rotativa.

Gases quentes que circulam pelo forno são originados da combustão do gás natural. Basicamente são compostos pelo combustível não reagido, produtos da sua combustão, componentes do ar em excesso e vapor de água proveniente da desidratação do minério de gipsita. A circulação dos gases é induzida com auxílio de um exaustor de CV, 1720 rpm e capacidade máxima de tiragem de 3100 m<sup>3</sup>/h, instalado na tubulação de saída de gases do forno que ligam o mesmo a uma chaminé. Após ceder calor para a reação no interior do forno os gases quentes saem do sistema na parte superior da mesma extremidade em que o gesso é descarregado. Para evitar problemas de emissão de particulados pelo sistema para a atmosfera, foi instalado na saída dos gases um ciclone e uma coluna de lavagem destes gases. Numa etapa posterior foi projetado o isolamento térmico para o forno, composto de fibra cerâmica suportadas por folhas alumínio corrugadas.

### **3.1.2. Sistemas Auxiliares**

#### **3.1.2.1. Sistema de combustão**

O gás natural utilizado na combustão é acondicionado em quatro cilindros de 16 m<sup>3</sup>, totalizando 64 m<sup>3</sup>, pressurizados a 200 atm e armazenados em uma cabine, na parte externa do laboratório onde se encontra o forno rotativo piloto. O gasoduto de suprimento de gás foi construído em tubos e conexões de aço patente de ¾ in. Devido à ação de uma válvula redutora de pressão instalada na cabine de armazenagem dos cilindros, a linha que leva o gás natural ao forno opera a pressões em torno de 1,0 atmosfera manométrica. As conexões do gasoduto são do tipo rosca. Antes da alimentação do forno foi elaborado um sistema de combustão, responsável pela monitoração e controle das condições de vazão, temperatura e pressão do combustível e do ar de combustão. Uma vista parcial do sistema de combustão é mostrada pela Figura 9, a seguir.



Figura 9 - Sistema de alimentação do ar de combustão e queimador.

Duas tubulações de  $\frac{3}{4}$  polegada chegam à entrada do “*manifold*” que alimenta o sistema de combustão – uma para admissão de gás natural e outra para GLP. A junção dessas duas tubulações dá origem a um único *manifold* de 1 polegada de diâmetro. No conjunto de dutos que compõe o sistema de medição e controle do fluxo de combustível.

### 3.1.2.2. Sistema de exaustão e controle de emissão de particulados

A operação do forno piloto sofre grande influência das condições de tiragem ou exaustão dos gases efluentes. A pressão de tiragem desses gases é controlada através do exaustor, cuja capacidade está diretamente ligada a sua rotação. Uma queda de pressão não adequada pode causar altas velocidades de exaustão, com conseqüente arraste de sólidos acima de níveis recomendados. Como estratégia para reduzir tal problema foi instalada uma válvula do tipo borboleta na canalização de saída desses gases.

Foi elaborado, construído e instalado um sistema de lavagem dos gases de exaustão para evitar uma possível descarga de sólidos ao meio ambiente. O sistema acoplado na saída do exaustor de gases consta basicamente da coluna propriamente dita, de uma bomba de circulação da água de lavagem dos gases, e de um tanque para sedimentação dos sólidos coletados.

Os gases de exaustão entram na coluna e ascendem em contracorrente com um fluxo de água, homogeneamente distribuído, injetado no topo da coluna por uma bomba centrífuga. Os sólidos arrastados do forno piloto, pelos gases, são coletados pela corrente de água e são levados por uma tubulação a um tanque com dimensões suficientes para promover a sedimentação

desses sólidos. O ar limpo é descarregado pelo topo da coluna, através de uma tubulação em forma de chaminé. O tanque de sedimentação dos sólidos, com volume de  $1,5 \text{ m}^3$ , possui em seu interior dois vertedores em série com uma terceira câmara; esta última com a finalidade de sedimentação das partículas mais finas. As partículas, em ordem decrescente de tamanhos, são armazenadas nos compartimentos formados pelas três câmaras. A saída final do fluxo de água limpa do sedimentador é feita com auxílio da bomba de circulação da água (1,5 cv) a uma vazão máxima de  $6,5 \text{ m}^3/\text{h}$ , fazendo com que esse fluxo de água retorne ao topo da coluna de lavagem dos gases.

O exaustor de tiragem dos gases do forno piloto possui motor trifásico de 3 cavalos de potência (cv), 1720 rpm e capacidade máxima de  $3100 \text{ m}^3/\text{h}$  de gases nas CNTP. A coluna de lavagem tem diâmetro interno de 0,7 m, altura de 2,5 m, e foi confeccionada com chapa de aço carbono de 0,048 m de espessura. As tubulações de entrada e saída das águas de lavagem são confeccionadas em tubos de PVC e mangueiras plásticas, ambos de 32 mm de diâmetro. A altura total do conjunto permite que se obtenha uma saída de gases limpos a 5,3 m do piso.

### 3.1.3 Descrição dos Experimentos

O forno rotativo piloto foi operado em regime transiente. Os testes foram realizados com gipsita proveniente do Pólo Gesseiro do Araripe/PE (SUPERGESSO S.A). A vazão de alimentação de sólidos permaneceu constante durante a execução dos experimentos, uma vez que o seu controle é realizado por uma válvula rotativa do tipo carambola que dosa o material de acordo com a sua velocidade de rotação. Na saída do forno, a massa de material é pesada e quantificada por unidade de tempo, assim determinava-se a vazão de sólidos na saída. Quando as vazões na entrada e saída do forno apresentavam-se constantes, conclui-se que o forno opera em regime permanente, em relação à taxa de material. No momento que o sólido entra no forno, sua temperatura se eleva devido à troca de calor com os gases de combustão por convecção, condução e radiação, provocando sua desidratação.

As variáveis de controle selecionadas para o estudo da calcinação no forno foram: temperatura de controle da combustão ( $T_c$ ), vazão de alimentação de sólido ( $Q_s$ ) e velocidade de rotação do cilindro ( $N$ ). Cada ensaio foi realizado nas condições otimizadas preestabelecidas em trabalhos anteriores: velocidade de rotação do cilindro do forno (2 RPM), vazão de combustível de  $12 \text{ m}^3/\text{h}$ . Durante a execução dos experimentos o cilindro do forno permaneceu inclinado com ângulo constante de  $1^\circ$  em relação à horizontal, e o combustível utilizado no forno foi o gás natural com excesso de ar em 15%.

Todo sistema de controle do forno foi realizado através de um *software* supervisor conectado a um sistema de instrumentação para monitoramento e controle de variáveis durante a operação da planta. Através de um computador foi possível acionar os principais motores envolvidos na operação, controlar variáveis como: velocidade de rotação do cilindro e a taxa de alimentação de sólidos. Utilizando o mesmo sistema, foi possível monitorar a vazões de

combustível e comburente, assim como a temperatura dos gases oriundos da combustão, através de cinco termopares distribuídos ao longo do forno.

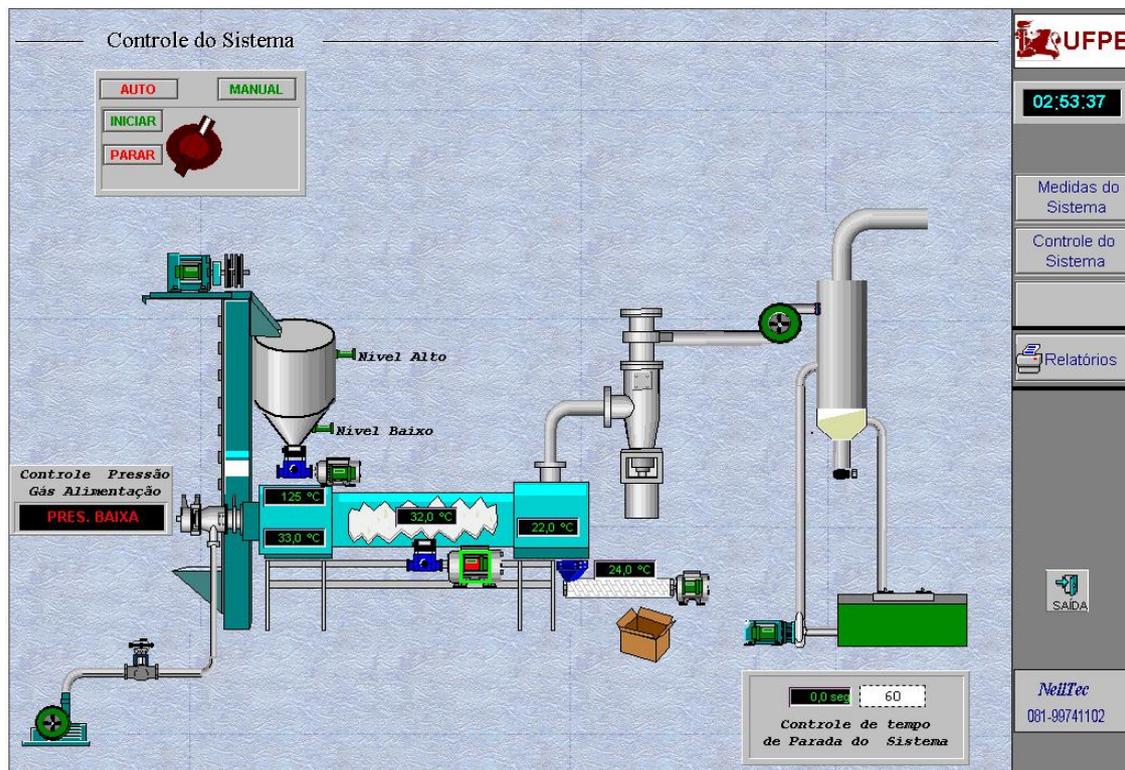


Figura 10 – Sistema de controle do forno através *software* de supervisor.

### 3.2 SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL

As simulações foram realizadas no Laboratório do CEERMA/UFPE (Centro de Estudos e Ensaio em Risco e Modelagem Ambiental), utilizando o software comercial ANSYS CFX 12.0.

#### 3.2.1 Geração da Geometria

Inicialmente foi utilizado um programa CAD (Computer Aided Design) para modelagem da geometria do forno. O programa utilizado foi o Design Modeler, que pertence ao pacote ANSYS, destinado a construção de domínios tridimensionais.

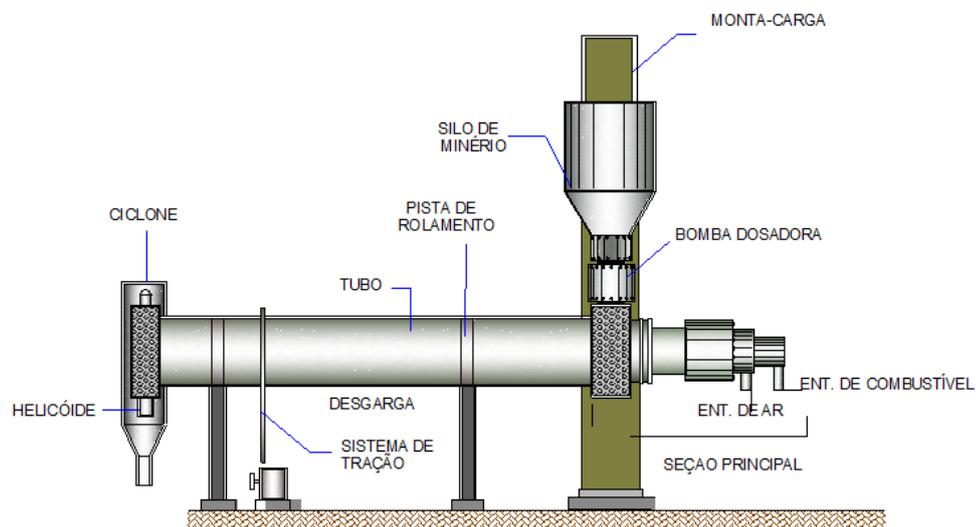


Figura 11: Esquema do Forno rotativo piloto para calcinação da gipsita – DEQ/UFPE.

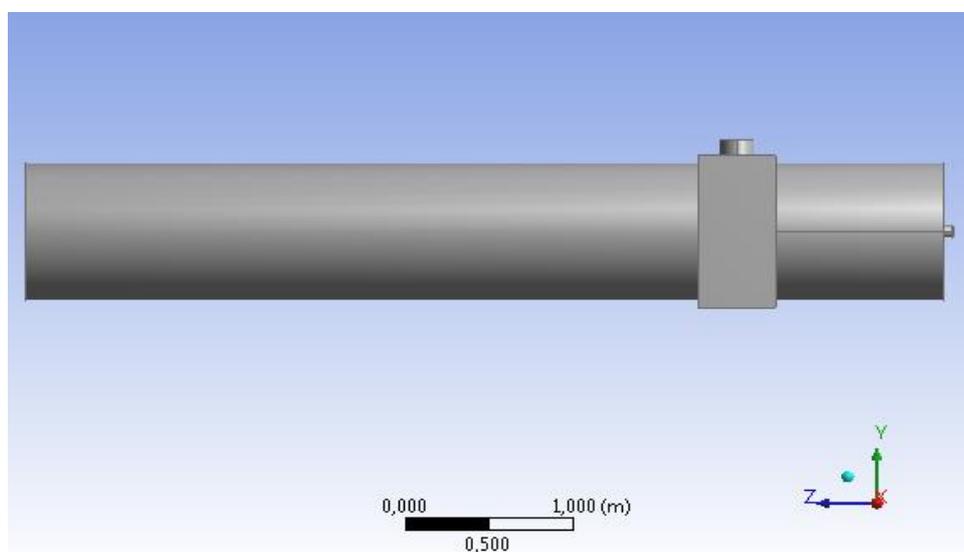


Figura 12: Geometria da Região do Domínio gerada no Design Modeler

### 3.2.2 Geração de Malha

A malha foi gerada no CFX-Mesh, onde foi utilizado o método não estruturado onde, automaticamente o software CFX reconhece as regiões e adapta a formação da malha, com um posterior refinamento de regiões específicas como a região de alimentação. Foram delimitadas as seguintes regiões: entrada de combustível(inlet\_1), entrada de ar(inlet\_2), saída(outlet) e paredes(wall). No total a malha apresentou 3.772.292 elementos tetraédricos. Foram realizados alguns testes e verificações, para garantir a qualidade da malha.

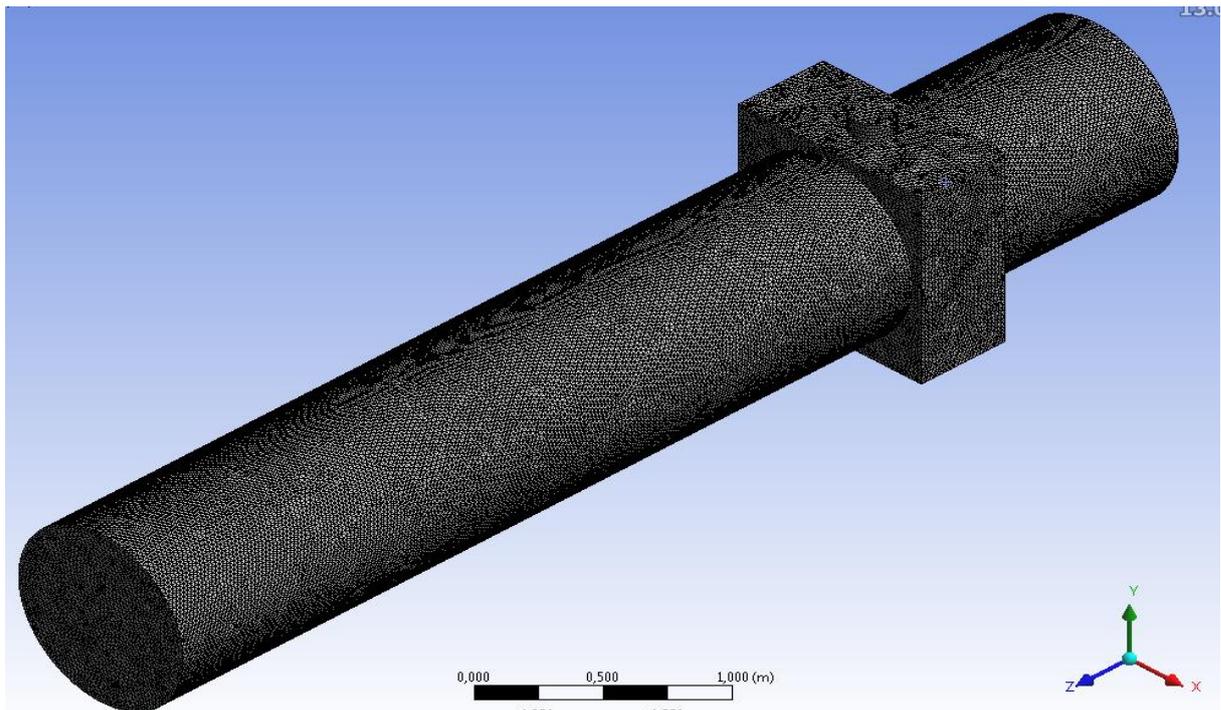


Figura 13: Malha gerada no CFX-Mesh.

### 3.2.3 Condições Aplicadas nas Simulações

A partir de uma prévia análise bibliográfica, foram determinadas condições e selecionados modelos (combustão, turbulência e radiação) que combinados pudessem representar todo o processo de combustão. Então foram considerados:

- O fluido reativo pode tratar-se como um meio contínuo e homogêneo, sendo regido pela Lei de Gás Ideal;
- O fluido pode ser uma mistura de espécies químicas com mesma fase (líquido ou gás ou sólido);

- A difusividade de massa para todas as espécies é conservada;
- Ausência de fuligem (particulados advindos da combustão incompleta);
- Os calores específicos à pressão constante e volume constante são constantes;
- Paredes (superfícies metálicas) adiabáticas e não catalíticas;
- Reação uniforme e ocorrendo em, no máximo, 5 etapas;

(ALENCAR, 2007).

- Turbulência:

1)  $\kappa$ - $\epsilon$ ;      2) SST (Shear-Stress Transport);      3) RNG  $\kappa$ - $\epsilon$ .

- Combustão:

1) Eddy Dissipation;      2) Finite Rate Chemistry.

- Radiação:

1) P1 Method;      2) Discrete Transfer;      3) Rosseland.

- As condições na alimentação utilizadas no estudo experimental são as mesmas para a parte numérica. A condição de parada usada nas simulações foi que a norma dos mínimos quadrados (RMS) em todas as equações do modelo fosse menor que  $10^{-4}$ . Também foram utilizadas 500 iterações como referência e um tempo físico de 0.025 s, que é um tempo característico das reações de combustão;
- O esquema de interpolação utilizado foi o *High Resolution*;
- Para a variação de energia do sistema foi utilizado a opção *Total Energy*;
- Para a formação de NO, adotou-se a técnica NO PDF.

## 4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

### 1ª Parte: Análise com Relação aos Valores Experimentais

#### 4.1 Estudos Experimentais

Inicialmente esta pesquisa envolve a realização de estudos experimentais referente a combustão do gás natural e seu escoamento pelo forno rotativo contínuo para obtenção de uma referência para validação das simulações computacionais. São apresentados os dados experimentais referentes aos valores da temperatura ao longo do forno rotativo contínuo, foram obtidos a partir dos 4 termopares presente no forno.

Tabela 7: Valores Experimentais da Temperatura ao longo do forno

Comprimento Relativo do Forno (z/L)	Temperatura(K)
0,1	920
0,5	650
0,8	570
1,0	550

#### 4.2- Estudos Numéricos

Em seguida são apresentados os estudos utilizando Fluidodinâmica Computacional (CFD), as combinações foram agrupadas com os modelos de turbulência como referência para os grupos de resultados, com intuito de uma melhor comparação posteriormente. Serão demonstrados perfis de temperatura para uma visualização do comportamento da temperatura em toda região do forno. E também, gráficos com valores das temperaturas, na região (altura) dos termopares, do forno com intuito de comparação com os valores obtidos experimentalmente.

##### 4.2.1 Modelo $\kappa$ - $\epsilon$

São apresentadas as visualizações dos perfis de temperatura ao longo do forno obtidas fixando o modelo  $\kappa$ - $\epsilon$ , e variando os modelos de combustão e radiação.

- **Simulação 1.1.1 ( $\kappa$ - $\epsilon$  , Eddy Dissipation e P1 Method)**

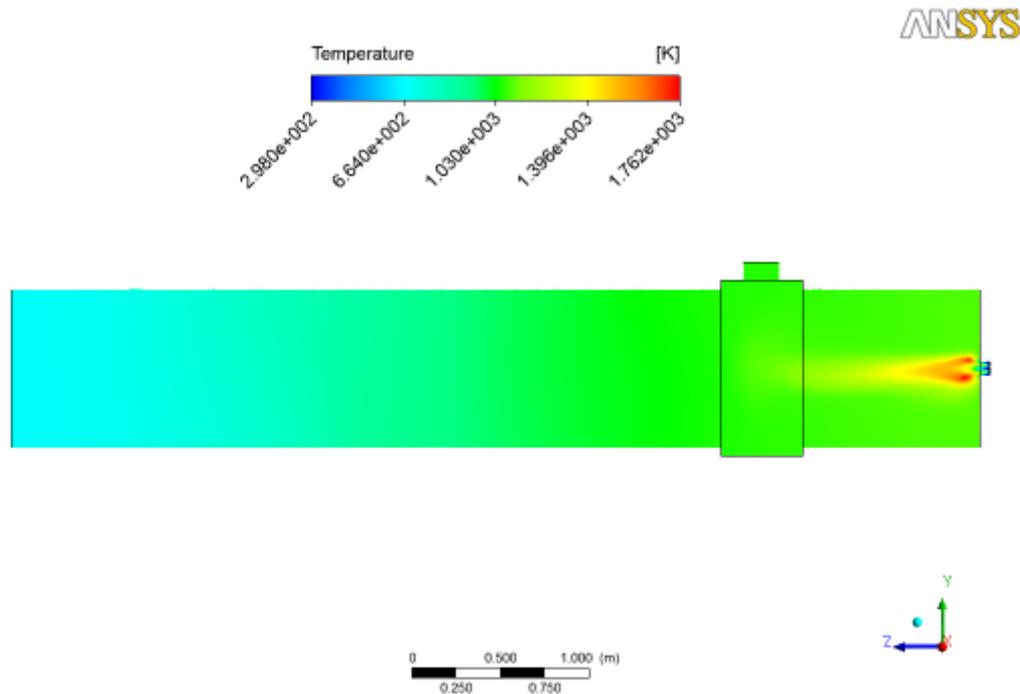


Figura 14: Campo de Temperatura no plano YZ do Forno Rotativo Contínuo (S1.1.1).

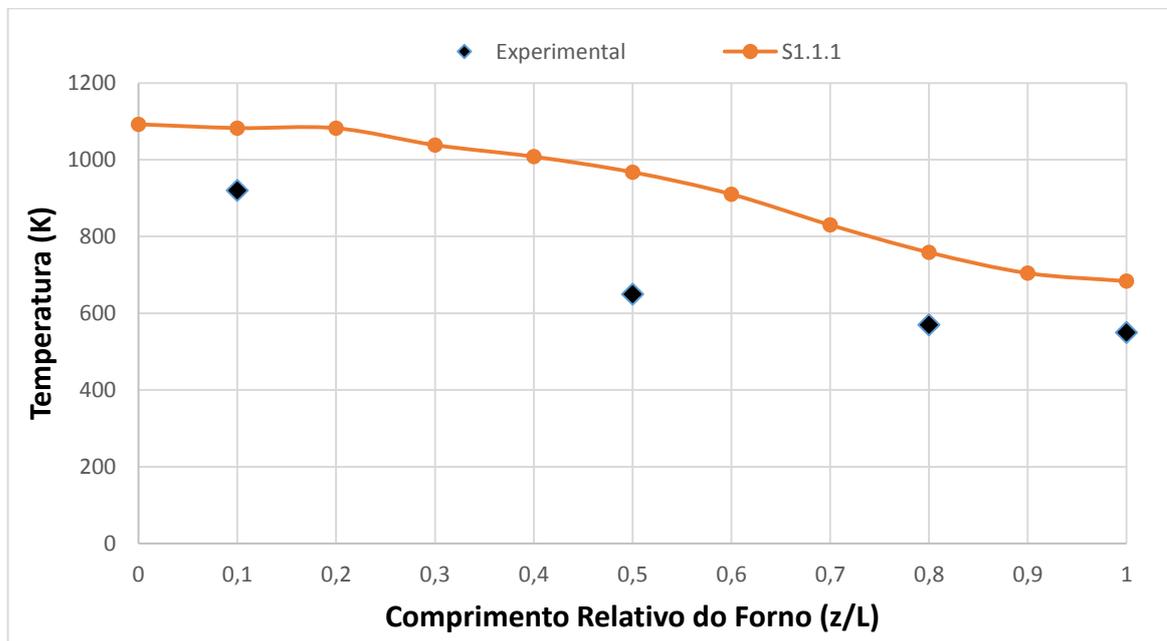


Figura 15: Gráfico Temperatura X Comprimento Relativo utilizando a combinação de modelos S1.1.1.

Para 1ª combinação de modelos foi possível observar uma  $T_{\text{máx}} = 1762,1$  K. Essa combinação de modelos obteve mais sucesso próximo à região de chama, tendo um erro percentual em relação ao valor experimental de 19% nessa região. Porém mostrou ineficiente a medida que se afastava dessa região, atingindo erro de até 44%.

- Simulação 1.1.2 ( $\kappa$ - $\epsilon$ , Eddy Dissipation e Discrete Transfer)

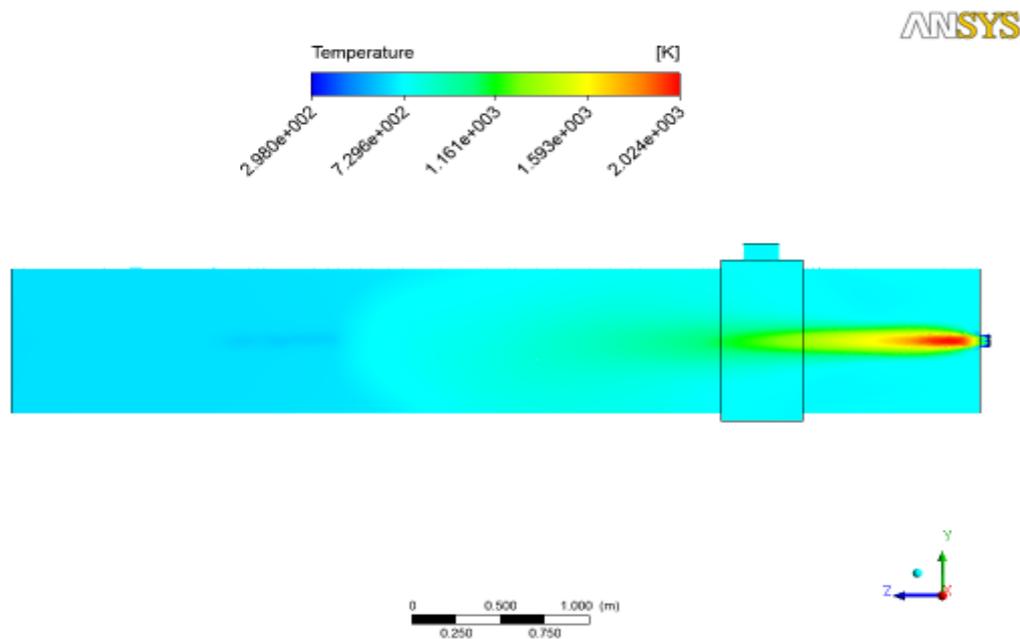


Figura 16: Campo de Temperatura no eixo YZ do Forno Rotativo Contínuo (S1.1.2).

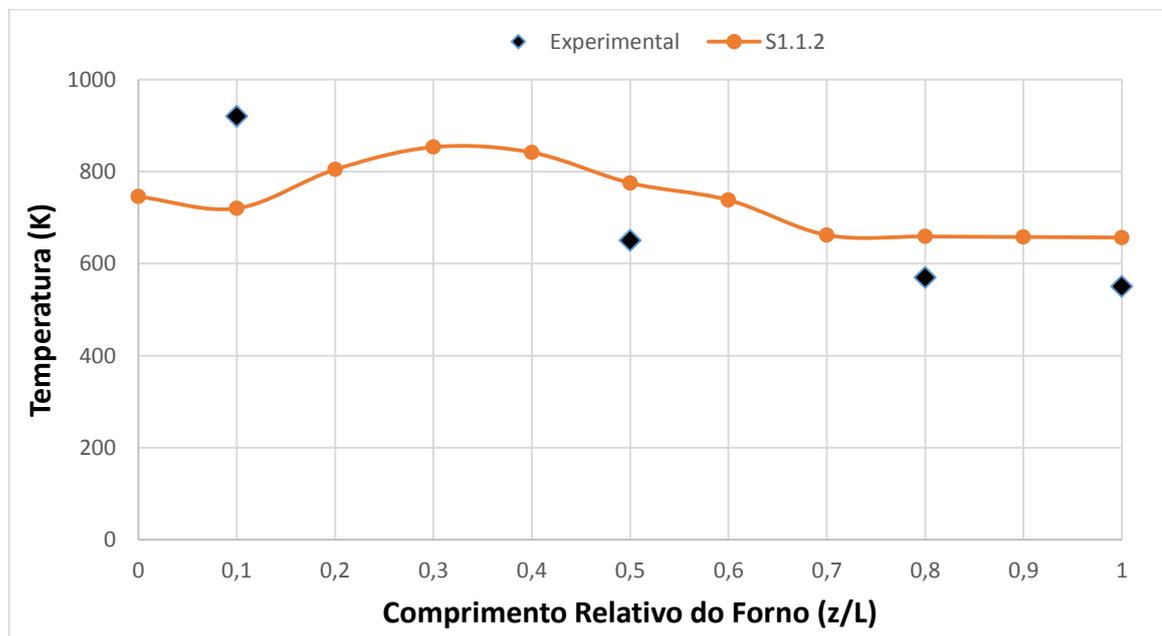


Figura 17: Gráfico Temperatura X Comprimento Relativo utilizando a combinação de modelos S1.1.2.

Para 2ª combinação de modelos foi possível observar uma  $T_{\text{máx}} = 2024,38$  K. Essa combinação de modelos obteve um bom desempenho, apresentando um erro máximo de 22% na região de chama, e um erro mínimo de 16% na zona de propagação. Dando um indicativo que o modelo P1, de radiação, representa melhor a região de chama enquanto que o Discrete Transfer se aproxima melhor do experimental na zona de propagação.

- Simulação 1.1.3 ( $\kappa$ - $\epsilon$ , Eddy Dissipation e Roseland)

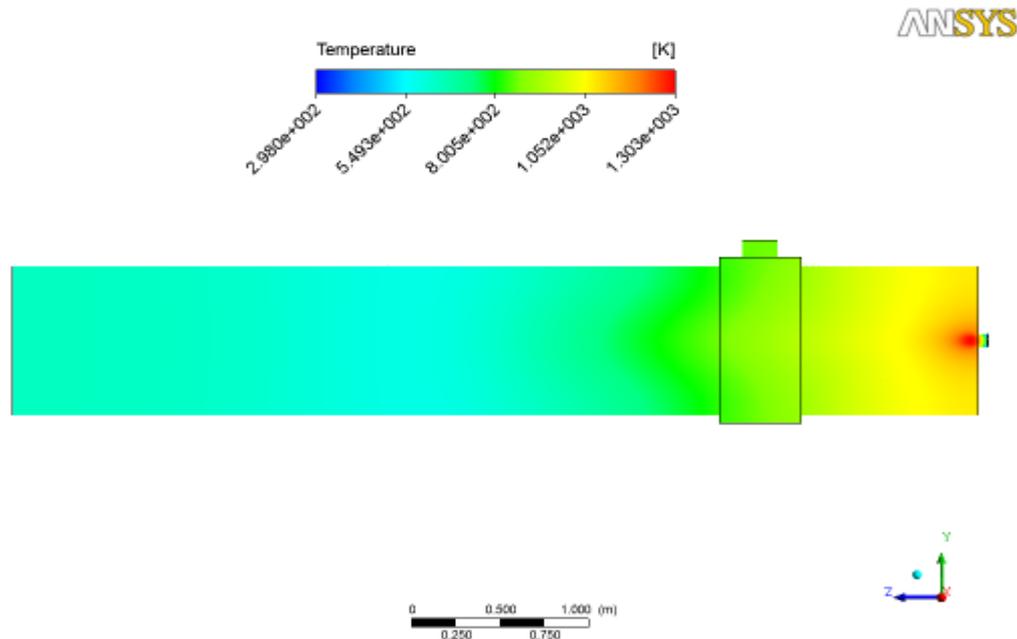


Figura 18: Campo de Temperatura no eixo YZ do Forno Rotativo Contínuo (S1.1.3).

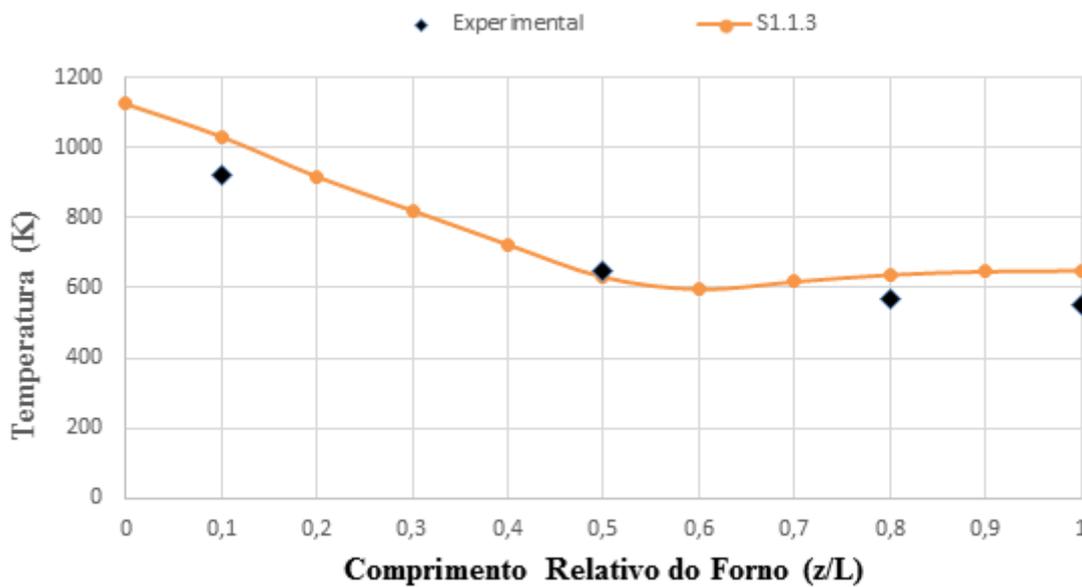


Figura 19: Gráfico Temperatura X Comprimento Relativo utilizando a combinação de modelos S1.1.3.

Para 3ª combinação de modelos foi possível observar uma  $T_{\text{máx}} = 1303$  K. Apresentou um erro de 6% na região final de chama, e um erro máximo de 22% na parte final do forno. Dando um indicativo que o modelo P1, de radiação, representa melhor a região de chama enquanto que o Discrete Transfer se aproxima melhor do experimental na zona de propagação.

- Simulação 1.2.1 ( $\kappa$ - $\epsilon$ , Finite Rate Chemistry e P1 Method)

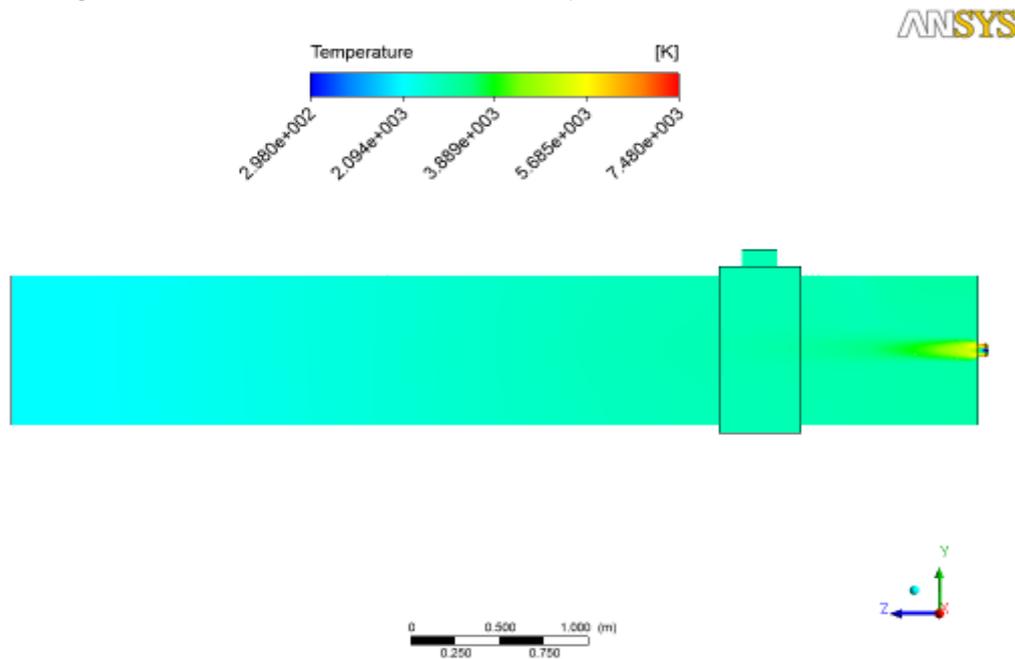


Figura 20: Campo de Temperatura no eixo YZ do Forno Rotativo Contínuo (S1.2.1).

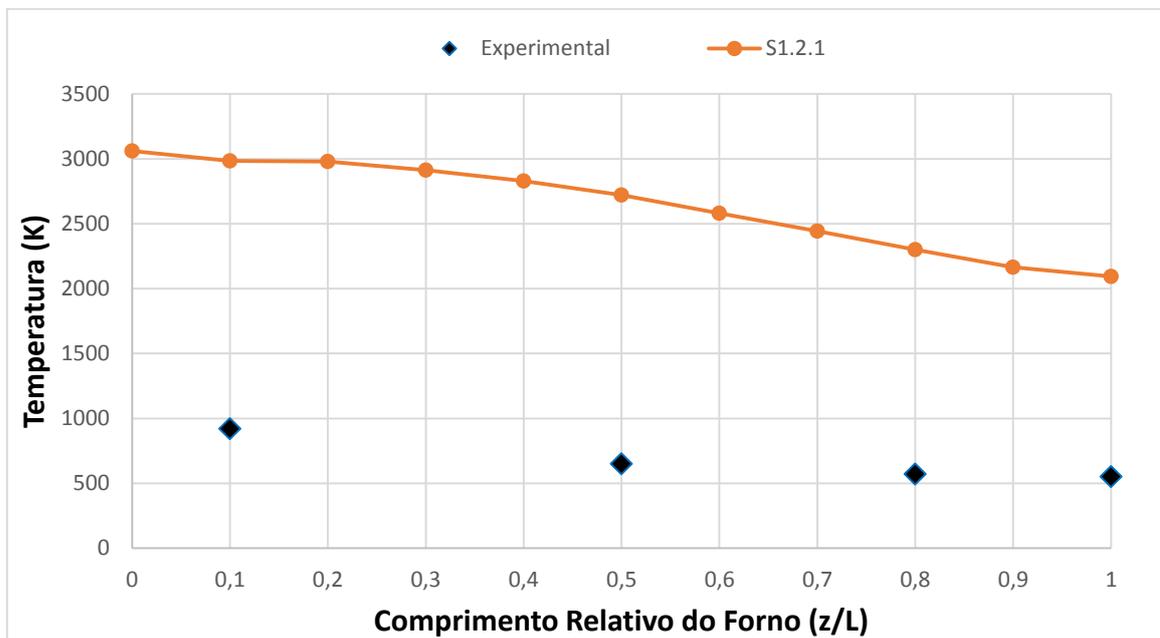


Figura 21: Gráfico Temperatura X Comprimento Relativo utilizando a combinação de modelos S1.2.1.

Para 4ª combinação de modelos foi possível observar uma  $T_{m\acute{a}x} = 7480$  K. Mostrando que a combinação não apresenta resultados aceitáveis para esse tipo de modelagem.

- **Simulação 1.2.2 ( $\kappa$ - $\epsilon$ , Finite Rate Chemistry e Discrete Transfer).**

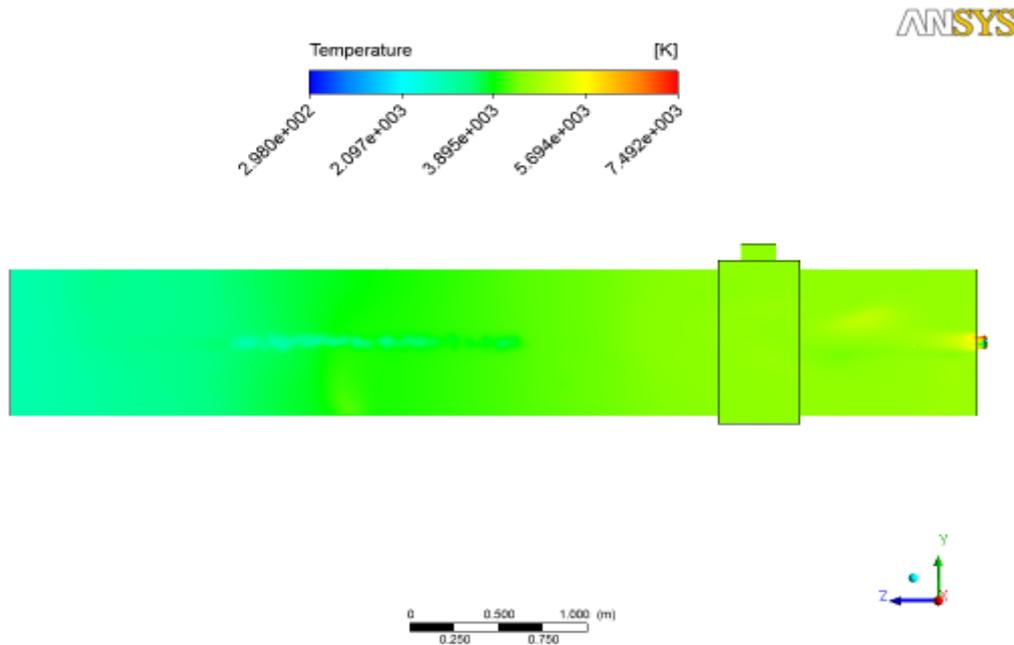


Figura 22: Campo de Temperatura no eixo YZ do Forno Rotativo Contínuo (S1.2.2).

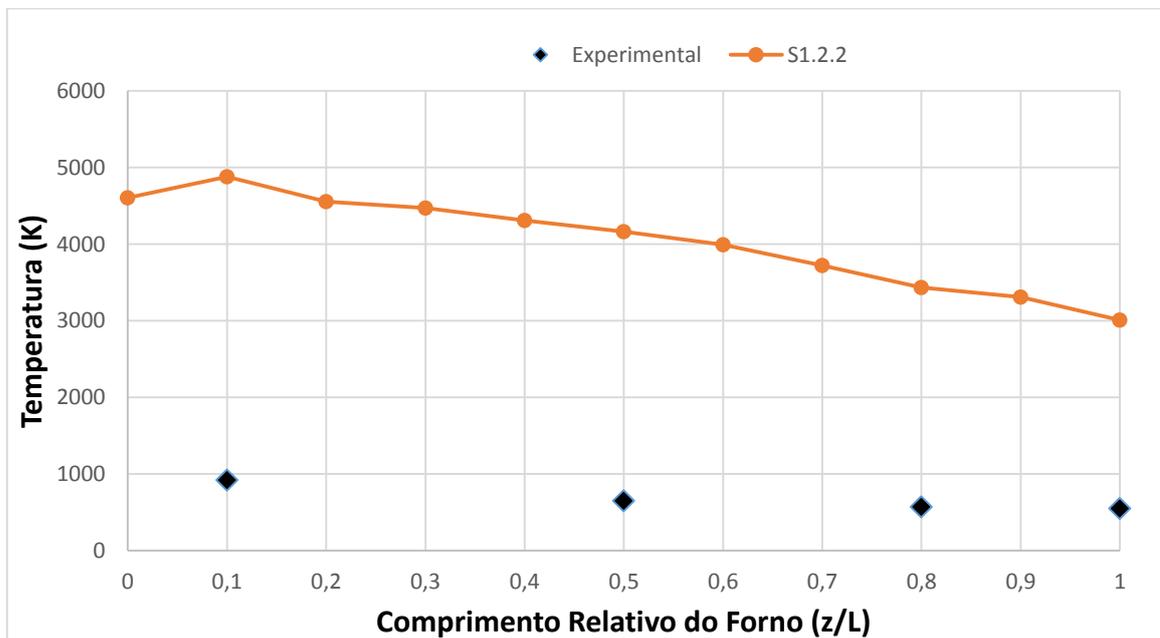


Figura 23: Gráfico Temperatura X Comprimento Relativo utilizando a combinação de modelos S1.2.2.

A 5ª combinação de modelos apresentou desempenho tão ruim quanto a combinação anterior, obtendo-se uma  $T_{\text{máx}} = 7492$  K. Mostrando que a combinação não apresenta resultados aceitáveis para esse tipo de modelagem

- Simulação 1.2.3 ( $\kappa$ - $\epsilon$ , Finite Rate Chemistry e Roseland)

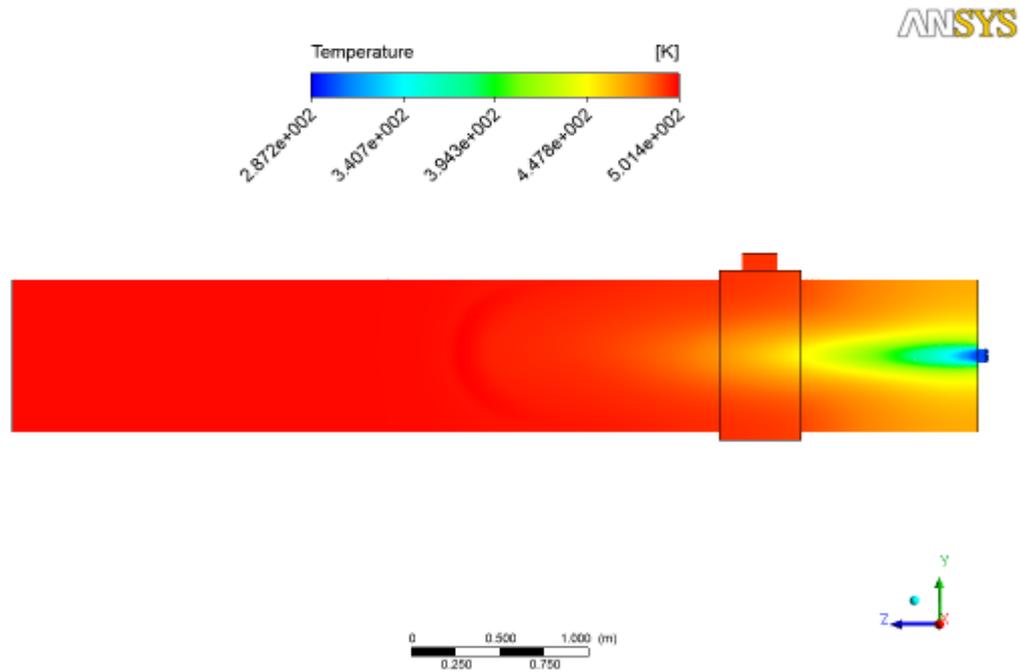


Figura 24: Campo de Temperatura no eixo YZ do Forno Rotativo Contínuo (S1.2.3).

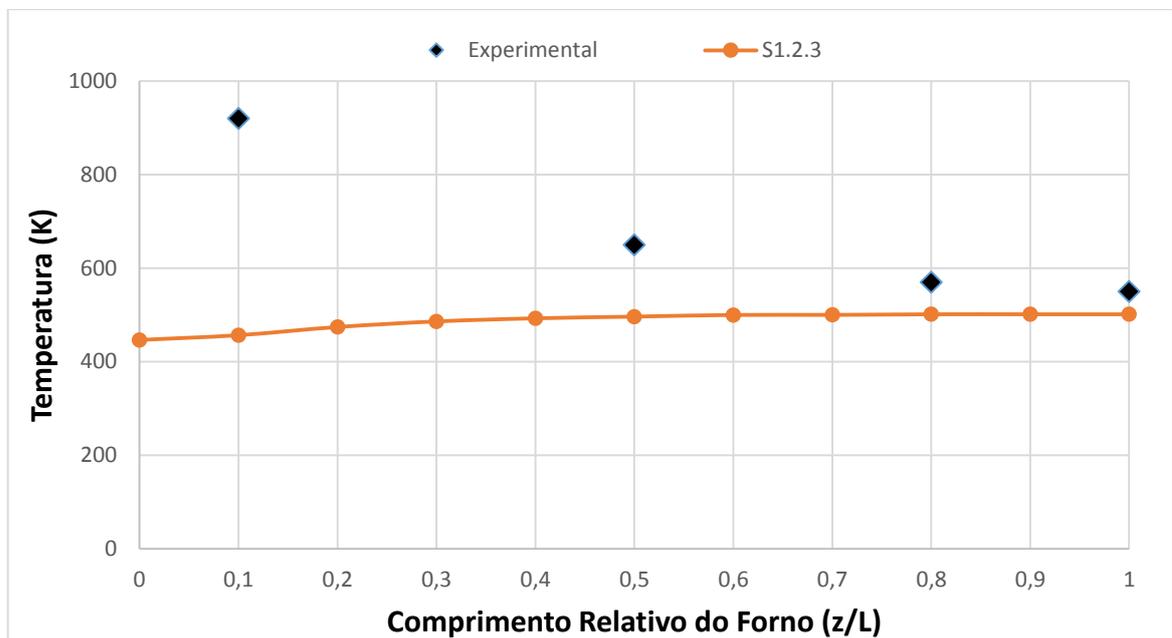


Figura 25: Gráfico Temperatura X Comprimento Relativo utilizando a combinação de modelos S1.2.3.

Já a 6ª combinação de modelos apresentou uma  $T_{\text{máx}} = 501,3$  K. Aparentemente além de ocorrer uma combustão tardia, há um indicativo que boa parte do combustível não reagiu devido às baixíssimas temperaturas. Outro ponto importante para se notar, é que, o modelo Finite Rate Chemistry não mostrou um bom desempenho quando acoplado ao modelo  $\kappa$ - $\epsilon$ , independente do modelo de radiação utilizado. Diferentemente, o Eddy Dissipation mostrou bons resultados

atingindo erros da ordem de 6%. A melhor combinação foi  $\kappa$ - $\epsilon$ , Eddy Dissipation e Discrete Transfer. Isso pode ser constatado analisando os gráficos abaixo.

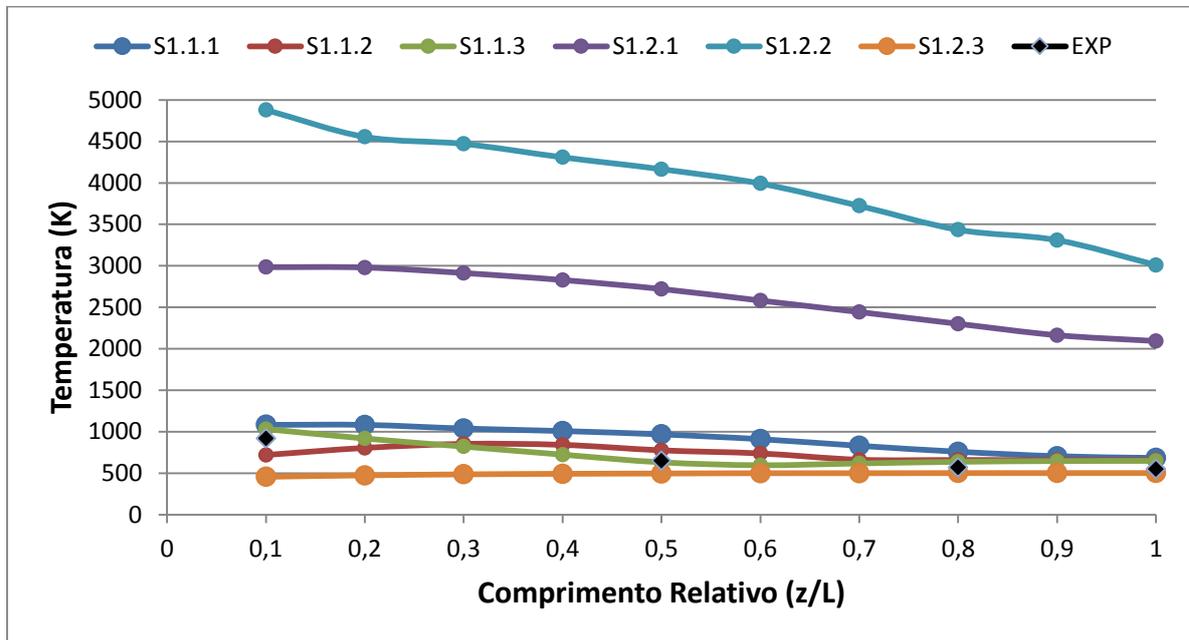


Figura 26: Gráfico Temperatura X Comprimento Relativo fixando o modelo  $\kappa$ - $\epsilon$ .

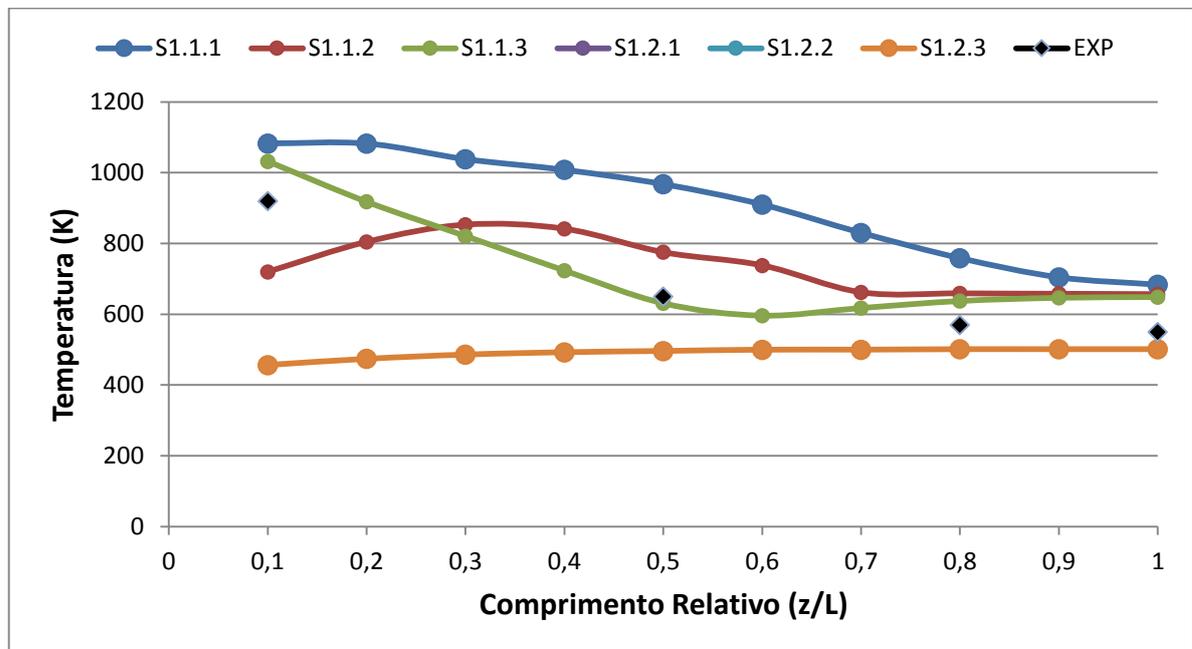


Figura 27: Gráfico Temperatura X Comprimento Relativo fixando o modelo  $\kappa$ - $\epsilon$

(Destaque da região dos valores experimentais)

## 4.2.2 Modelo SST (Shear Stress Transfer)

São apresentadas as visualizações dos perfis de temperatura ao longo do forno obtidas com o modelo SST, variando os modelos de combustão e radiação.

- **Simulação 2.1.1 (SST, Eddy Dissipation e P1 Method)**

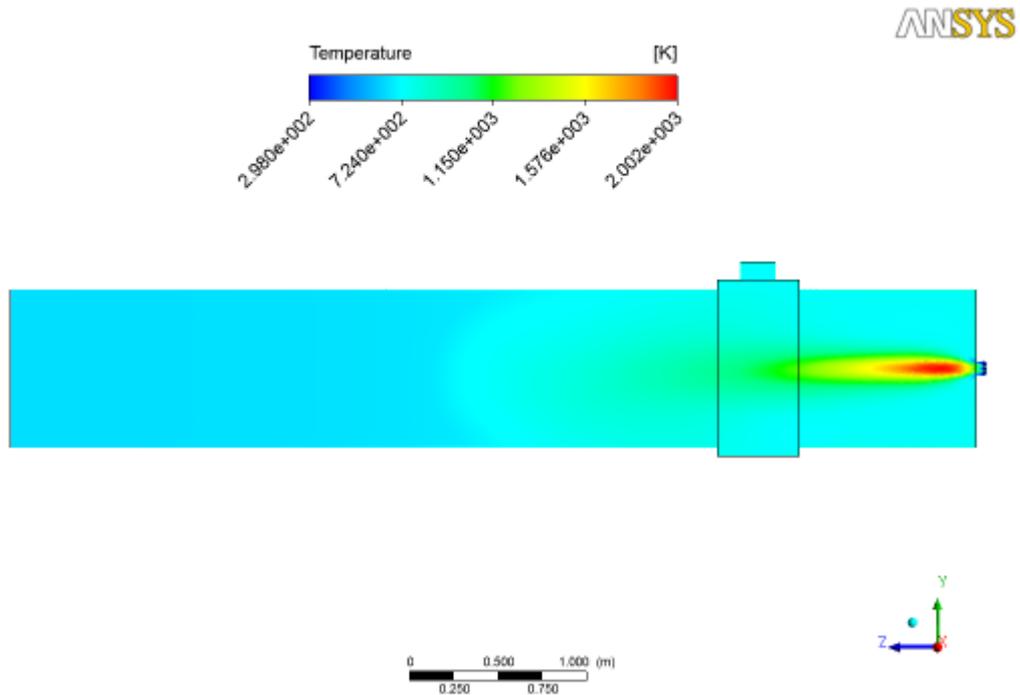


Figura 28: Campo de Temperatura no eixo YZ do Forno Rotativo Contínuo (S2.1.1).

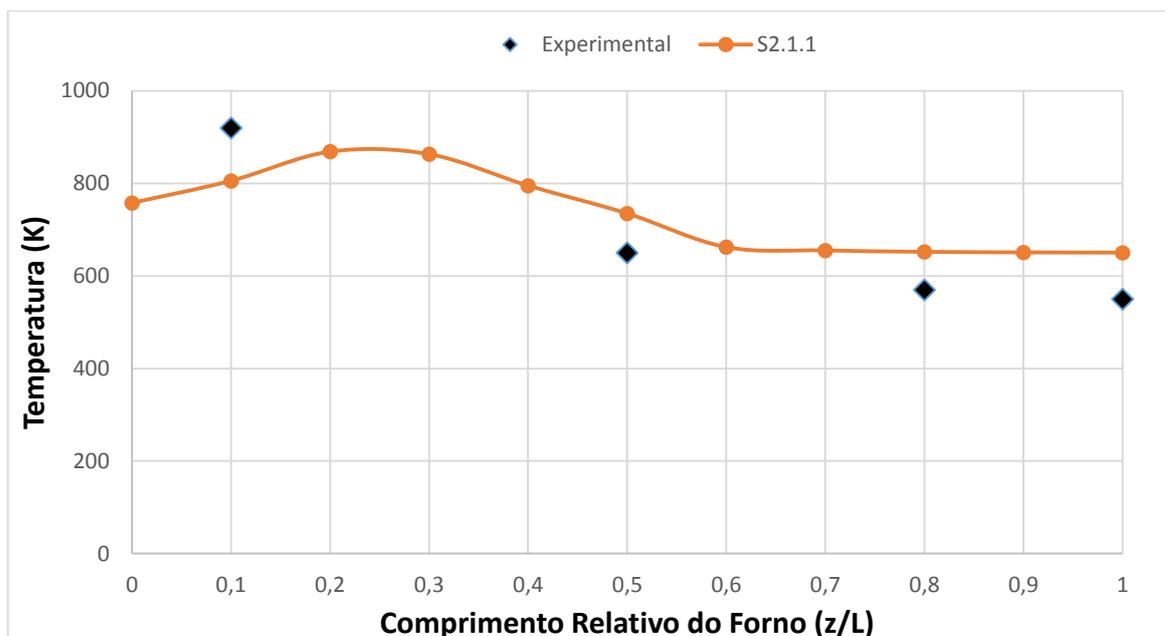


Figura 29: Gráfico Temperatura X Comprimento Relativo utilizando a combinação de modelos S2.1.1.

Para 1ª combinação de modelos utilizando o modelo SST como fixo, obteve-se uma  $T_{\text{máx}} = 2002,3 \text{ K}$ . Essa combinação apresenta um erro percentual variando entre 12 % e 18%, tendo melhor poder de modelagem na região de chama.

- **Simulação 2.1.2 (SST, Eddy Dissipation e Discrete Transfer).**

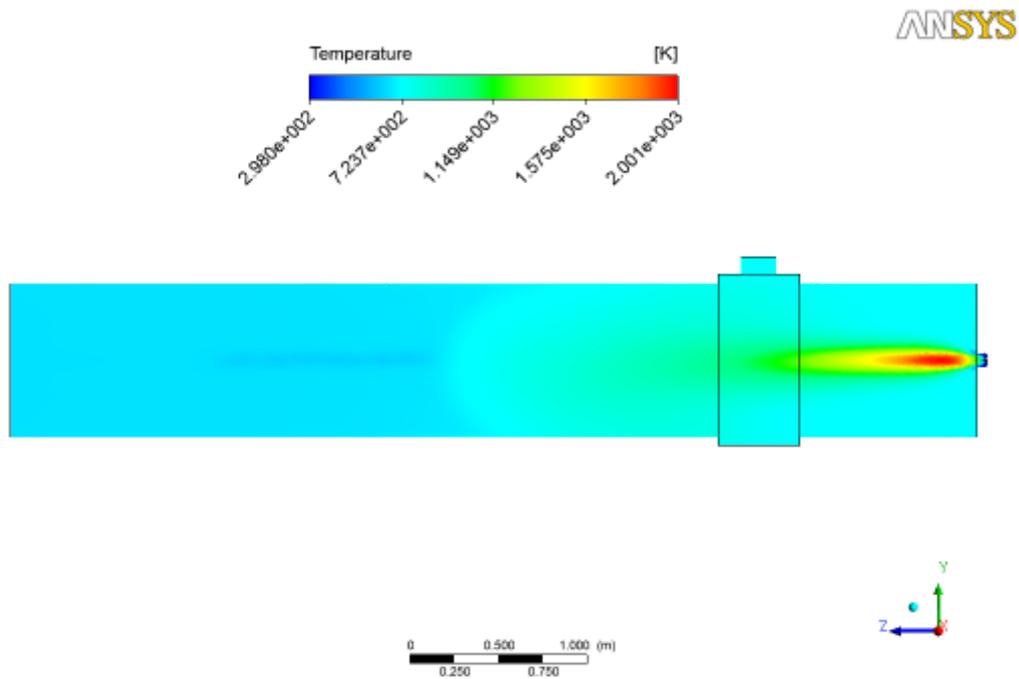


Figura 30: Campo de Temperatura no eixo YZ do Forno Rotativo Contínuo (S2.1.2).

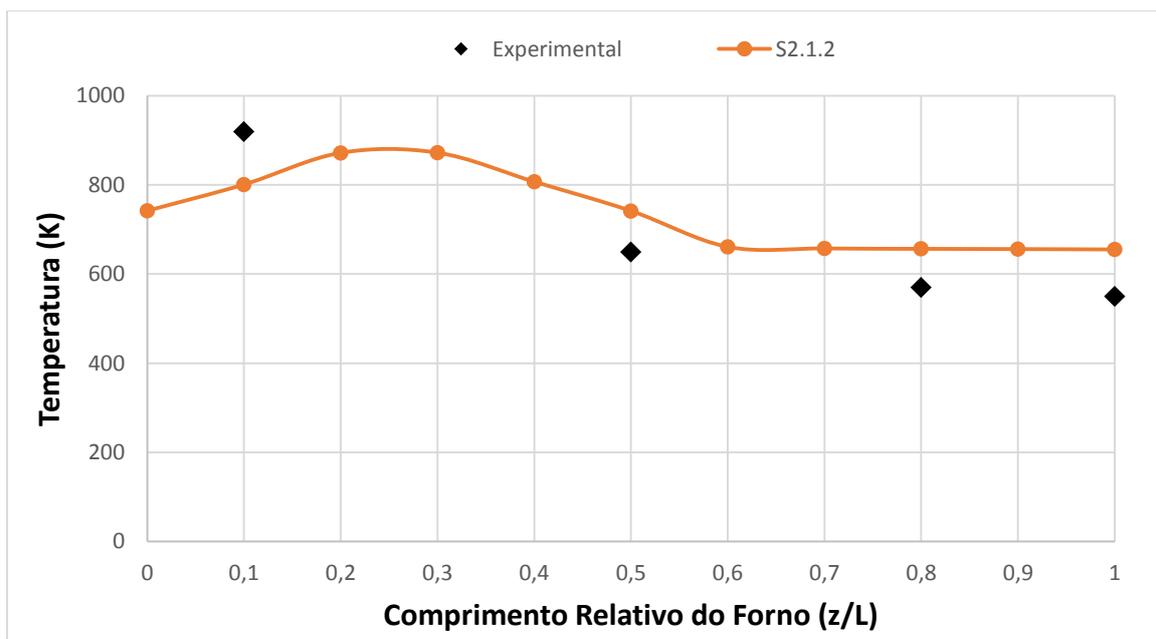


Figura 31: Gráfico Temperatura X Comprimento Relativo utilizando a combinação de modelos S2.1.2.

Já na 2ª combinação de modelos, houve uma grande aproximação da combinação anterior, apresentando uma variação de temperatura de menos de 2%, mostrando que para o acoplamento SST-Eddy Dissipation, os modelos de radiação utilizados não são tão significativos na modelagem. Essa combinação atingiu a  $T_{\text{máx}} = 2001$  K, com o erro percentual variando entre 13% a 19%.

- **Simulação 2.1.3 (SST, Eddy Dissipation e Rosseland)**

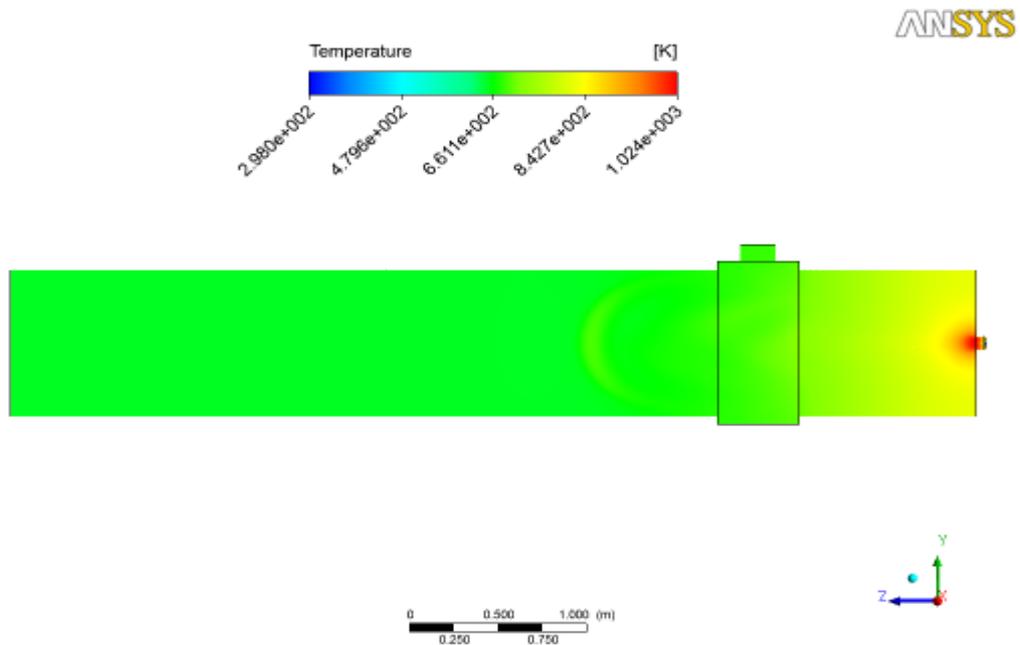


Figura 32: Campo de Temperatura no eixo YZ do Forno Rotativo Contínuo (S2.1.3).

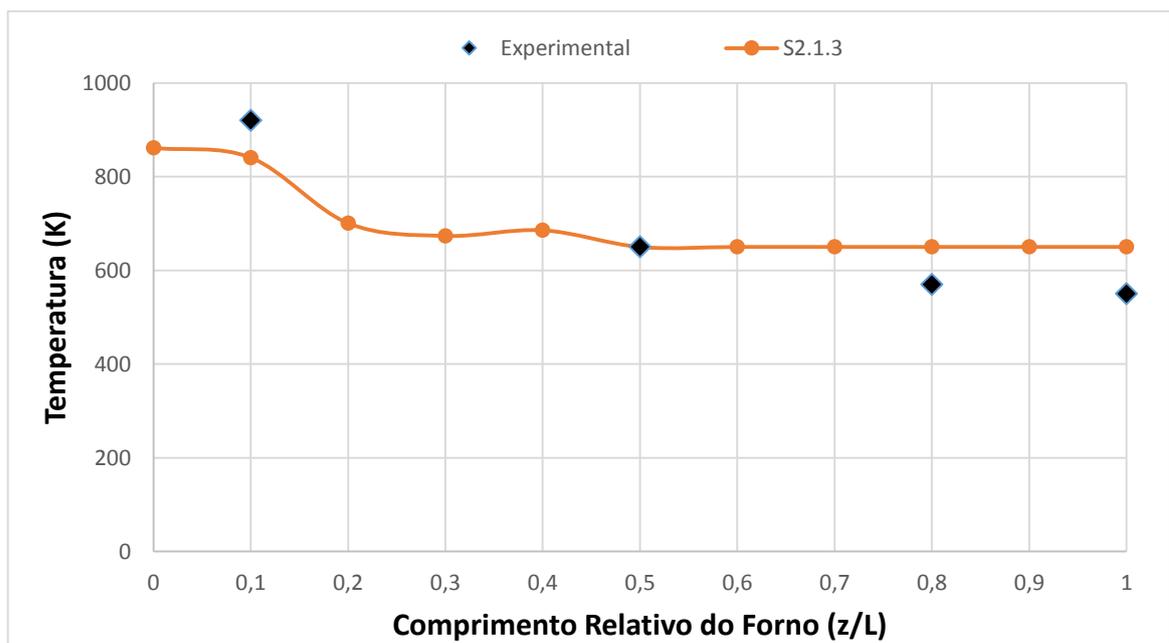


Figura 33: Gráfico Temperatura X Comprimento Relativo utilizando a combinação de modelos S2.1.3.

Na 3ª combinação de modelos, houve um excelente resultado com o erro chegando a menos de 8% até a metade do forno, porém aumentando na região final pra 18%. Mostrando a novamente que a combinação Eddy Dissipation- Rosseland é excelente para regiões de grande influência da chama. Obteve-se um valor máximo de 1024K.

- **Simulação 2.2.1 (SST, Finite Rate Chemistry e P1 Method)**

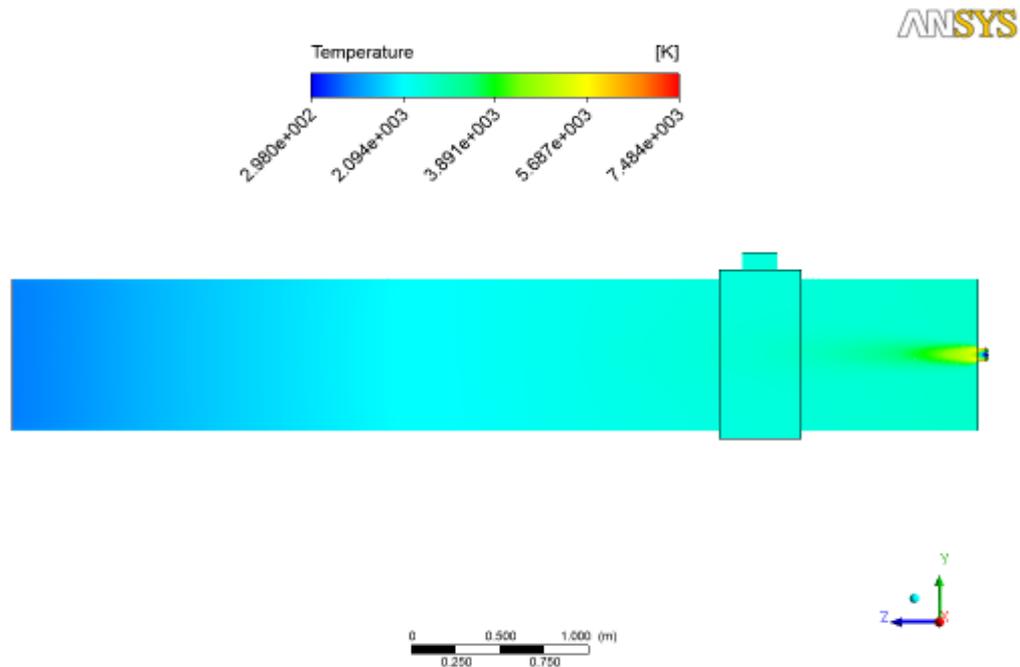


Figura 34: Campo de Temperatura no eixo YZ do Forno Rotativo Contínuo (S2.2.1).

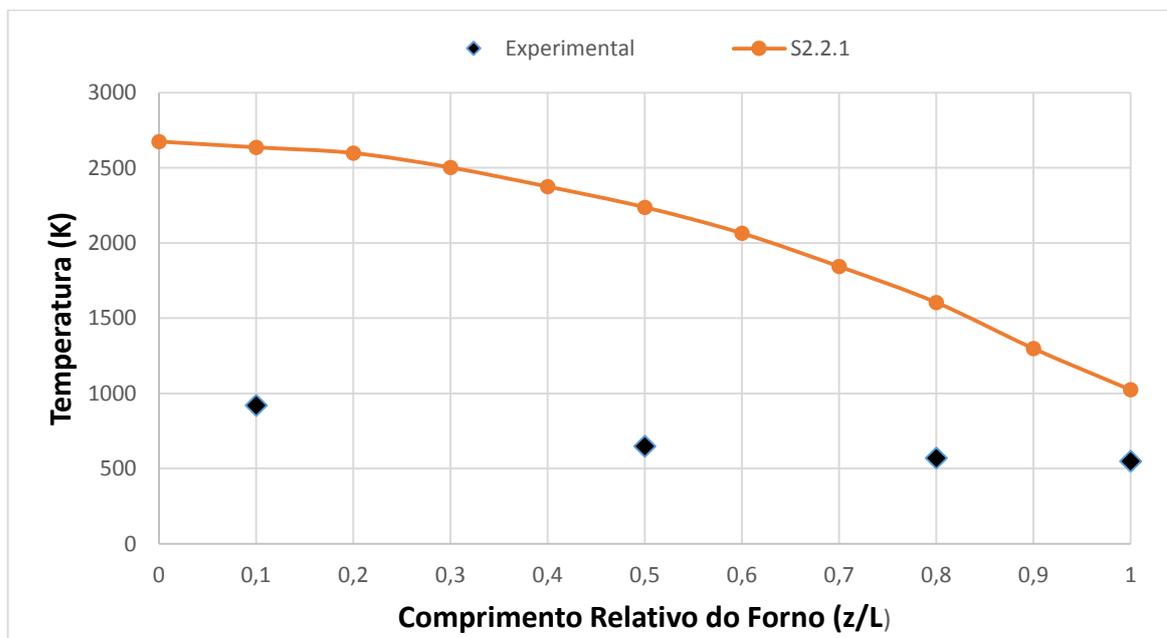


Figura 35: Gráfico Temperatura X Comprimento Relativo utilizando a combinação de modelos S2.2.1.

Para 4ª combinação de modelos foi possível observar uma  $T_{\text{máx}} = 7484$  K. Mostrando que a combinação não apresenta resultados aceitáveis para esse tipo de modelagem.

- Simulação 2.2.2 (SST, Finite Rate Chemistry e Discrete Transfer)

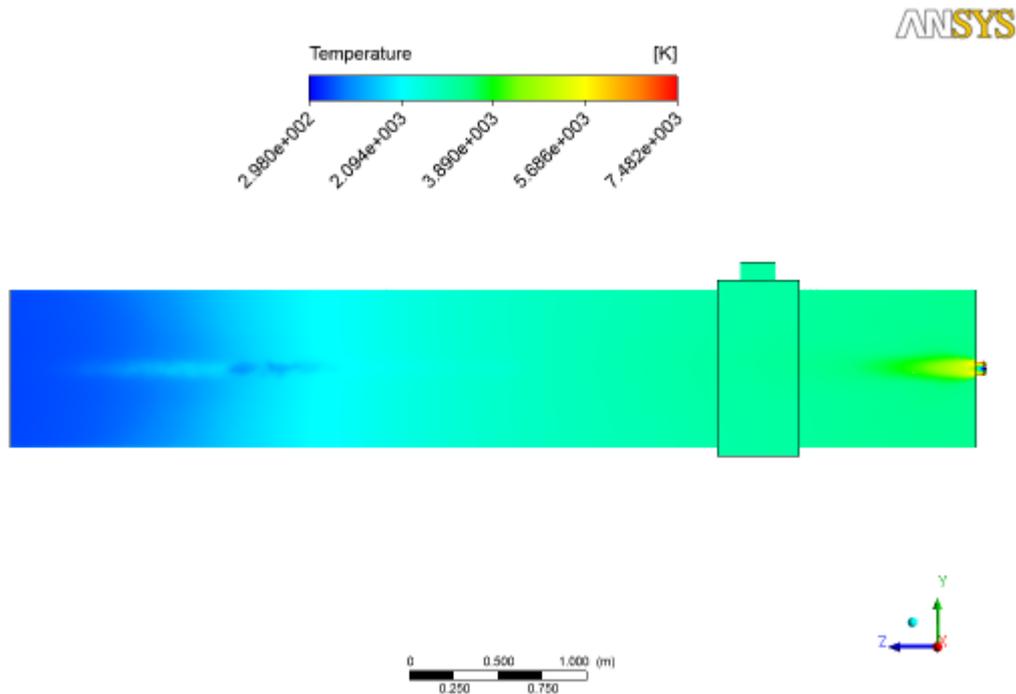


Figura 36: Campo de Temperatura no plano XZ do Forno Rotativo Contínuo (S2.2.2).

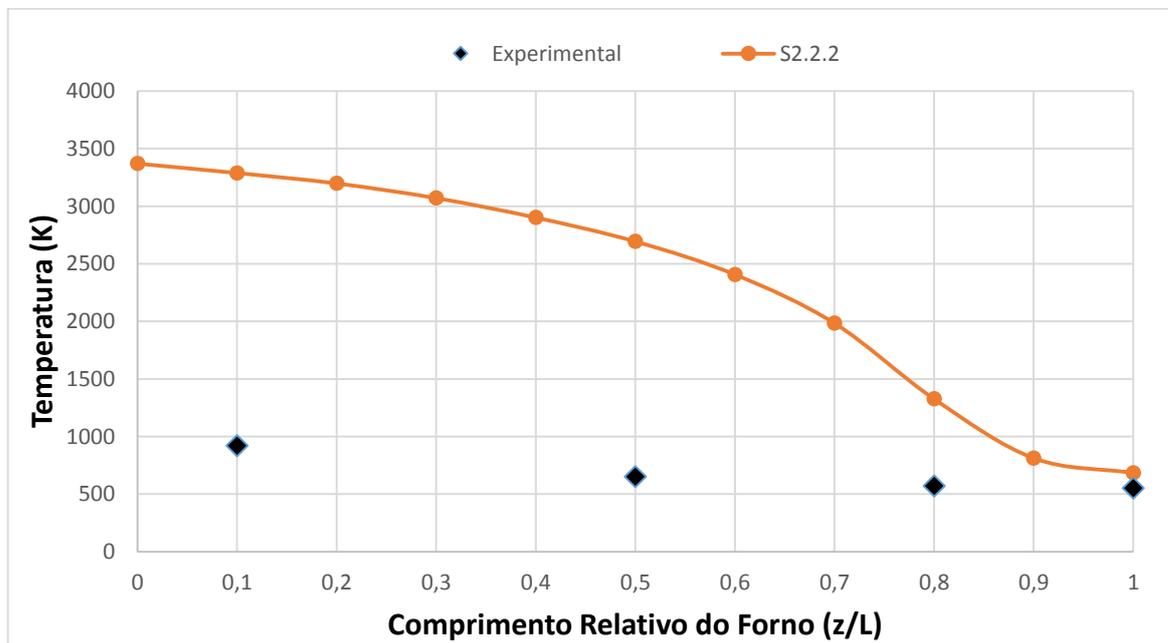


Figura 37: Gráfico Temperatura X Comprimento Relativo utilizando a combinação de modelos S2.2.2.

A 5ª combinação de modelos apresentou desempenho tão ruim quanto a combinação anterior, obtendo-se uma  $T_{\text{máx}} = 7482 \text{ K}$ . Mostrando que a combinação não apresenta resultados aceitáveis para esse tipo de modelagem

- **Simulação 2.2.3 (SST, Finite Rate Chemistry e Rosseland)**

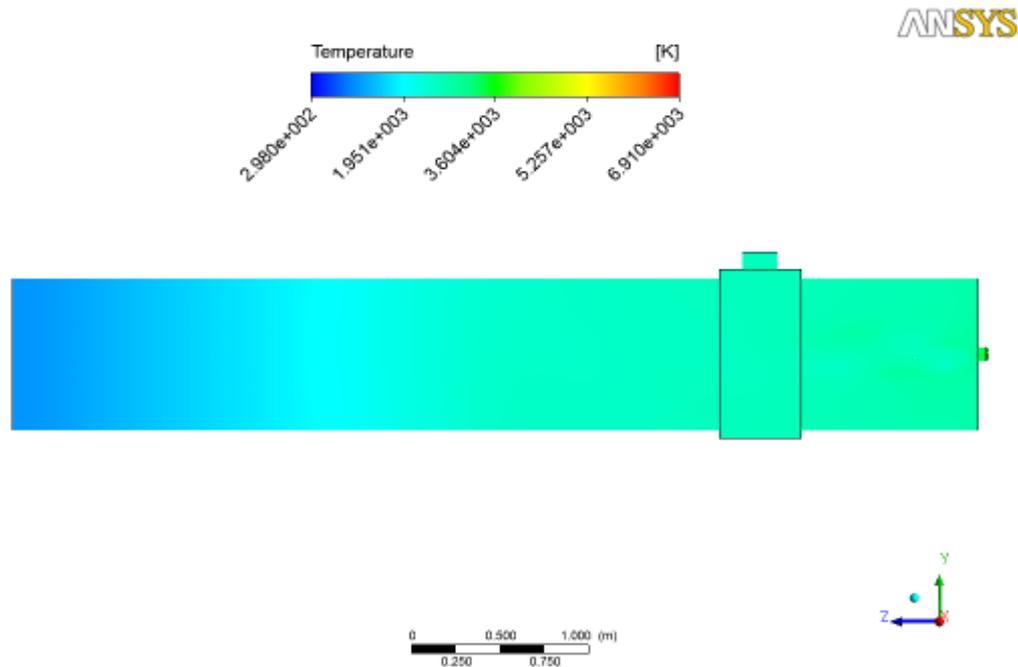


Figura 38: Campo de Temperatura no eixo YZ do Forno Rotativo Contínuo (S2.2.3).

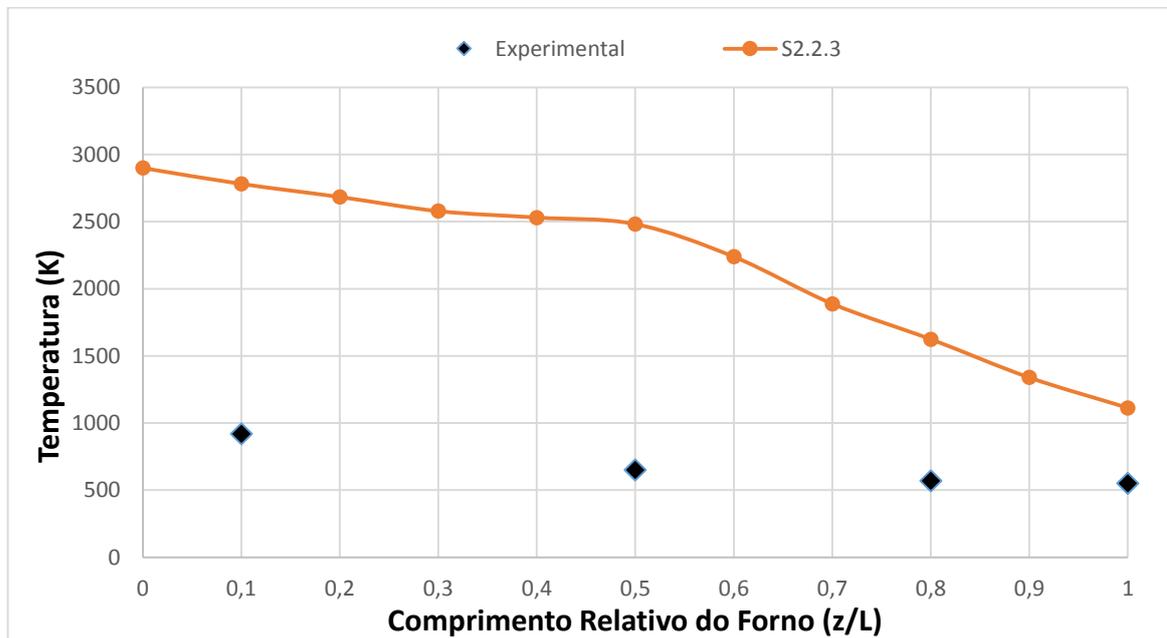


Figura 39: Gráfico Temperatura X Comprimento Relativo utilizando a combinação de modelos S2.2.3.

A 6ª combinação de modelos apresentou desempenho tão ruim quanto a combinação anterior, obtendo-se uma  $T_{\text{máx}} = 6910$  K. Mostrando que a combinação não apresenta resultados aceitáveis para esse tipo de modelagem

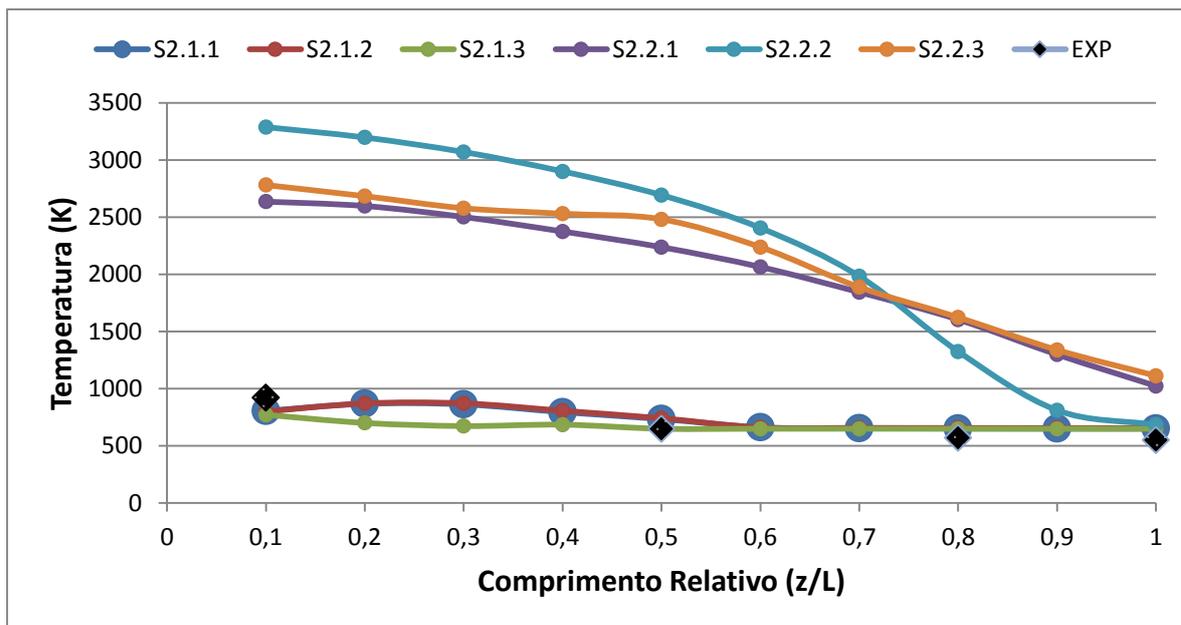


Figura 40: Gráfico Temperatura X Comprimento Relativo utilizando o modelo SST.

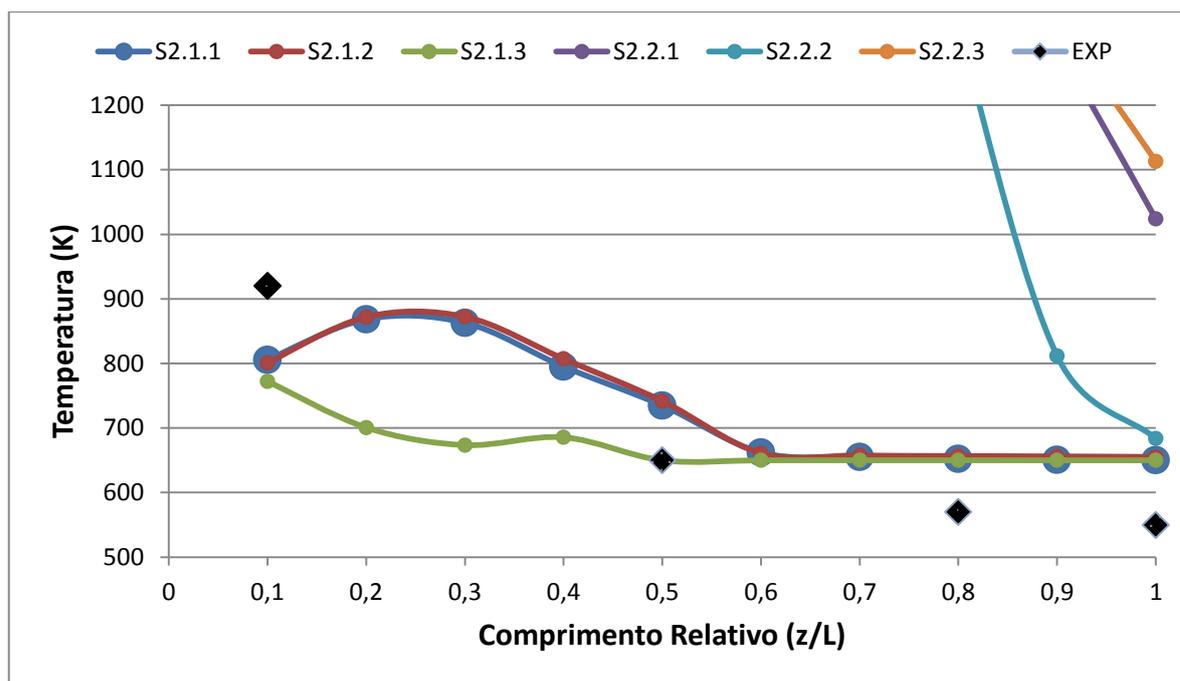


Figura 41: Gráfico Temperatura X Comprimento Relativo utilizando o modelo SST

(Destaque da região dos valores experimentais)

### 4.2.3 Modelo RNG $\kappa$ - $\epsilon$

São apresentadas visualizações dos perfis de temperatura ao longo do forno obtidas com o modelo RNG  $\kappa$ - $\epsilon$ , variando os modelos de combustão e radiação.

- **Simulação 3.1.1 (RNG  $\kappa$ - $\epsilon$ , Eddy Dissipation e P1 Method)**

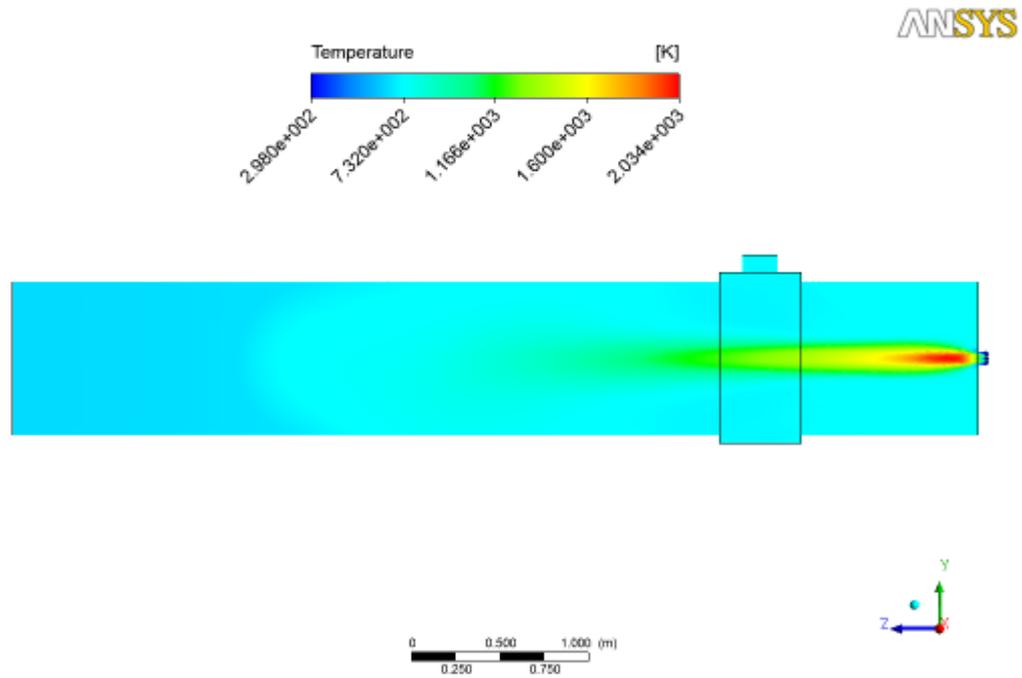


Figura 42: Campo de Temperatura no eixo YZ do Forno Rotativo Contínuo (S2.2.3).

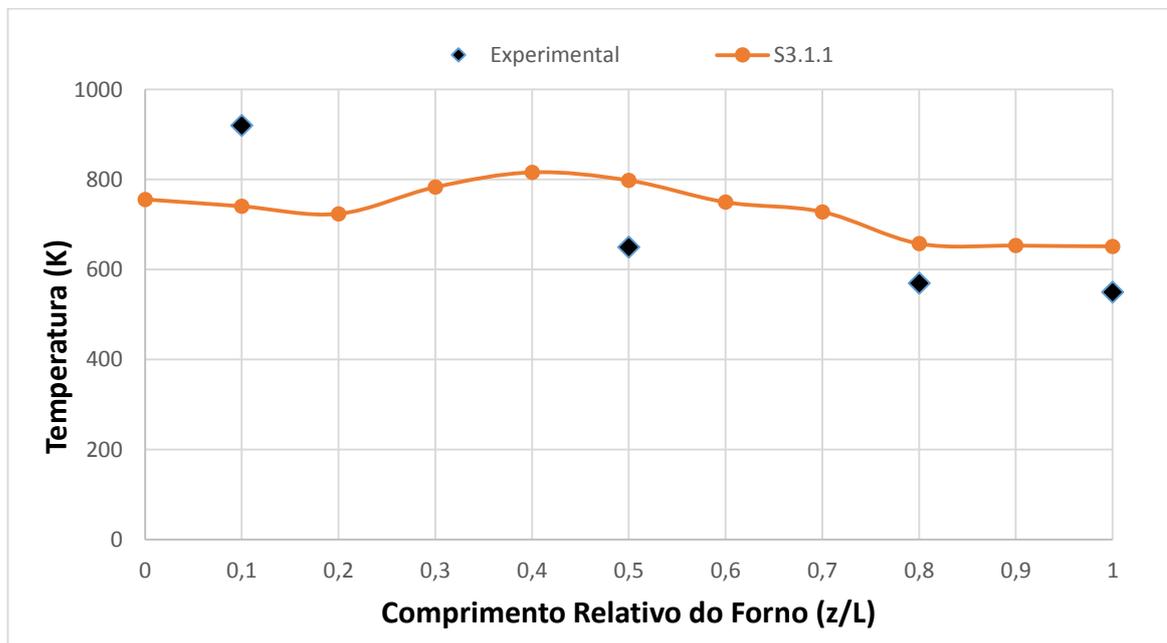


Figura 43: Gráfico Temperatura X Comprimento Relativo utilizando a combinação de modelos S3.1.1.

Para 1ª combinação de modelos com a o RNG  $\kappa$ - $\epsilon$  foi possível observar uma  $T_{\text{máx}} = 2034$  K. Mostrou-se uma combinação ruim para a modelagem da parte central, porém seu maior valor de erro foi de 19%.

- **Simulação 3.1.2 (RNG  $\kappa$ - $\epsilon$ , Eddy Dissipation e Discrete Transfer).**

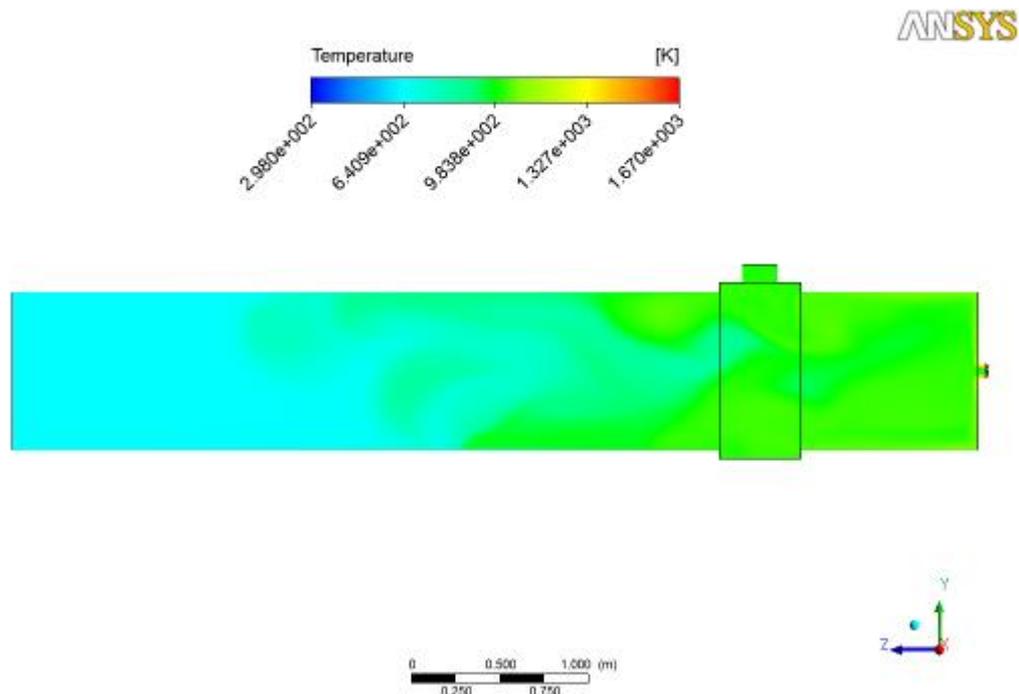


Figura 44: Campo de Temperatura no eixo YZ do Forno Rotativo Contínuo (S3.1.2).

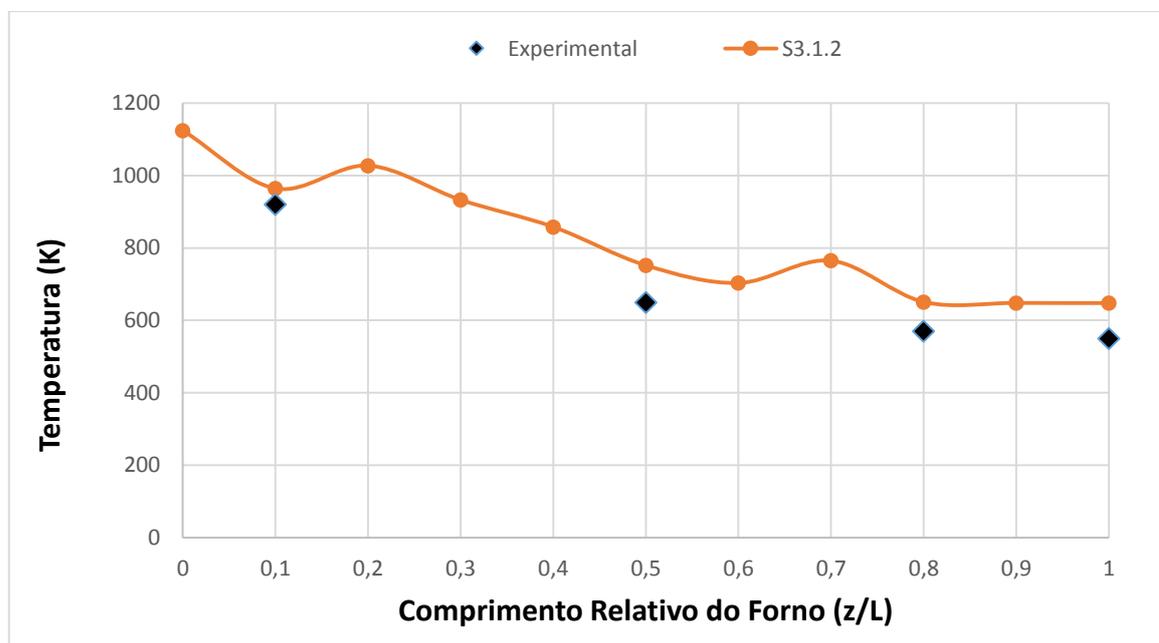


Figura 45: Gráfico Temperatura X Comprimento Relativo utilizando a combinação de modelos S3.1.2.

Essa 2ª combinação apresentou uma  $T_{m\acute{a}x} = 1670K$ , e não ultrapassando os 18% de erro.

- **Simulação 3.1.3 (RNG  $\kappa$ - $\epsilon$ , Eddy Dissipation e Rosseland).**

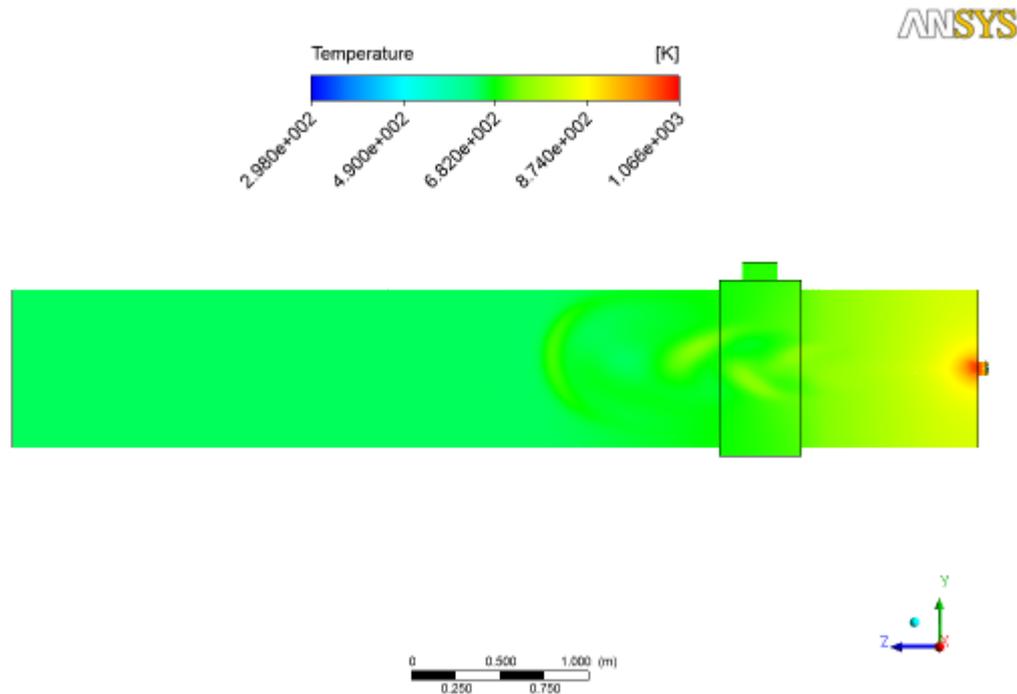


Figura 46: Campo de Temperatura no eixo YZ do Forno Rotativo Contínuo (S3.1.3).

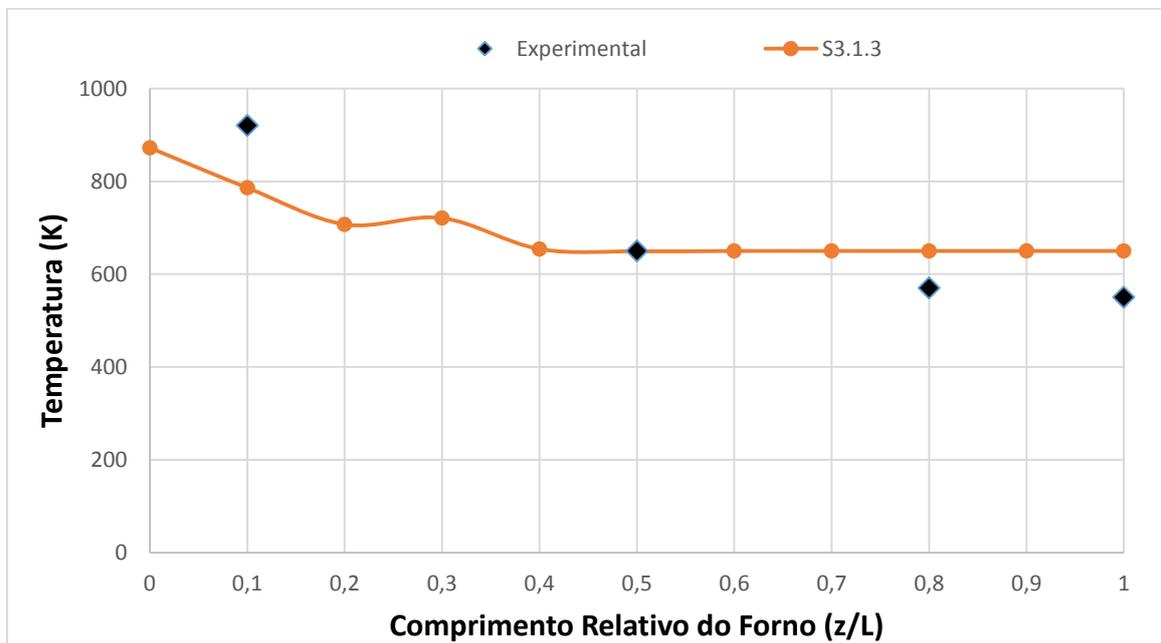


Figura 47: Gráfico Temperatura X Comprimento Relativo utilizando a combinação de modelos S3.1.3.

Essa 3ª combinação mostrou um resultado bem próximo dos resultados da 1ª e 2ª combinação com o modelo RNG, com excelente aproximação na região central porém com um erro de 18% na região final.

- Simulação 3.2.1 (RNG  $\kappa$ - $\epsilon$ , Finite Rate Chemistry e P1 Method)

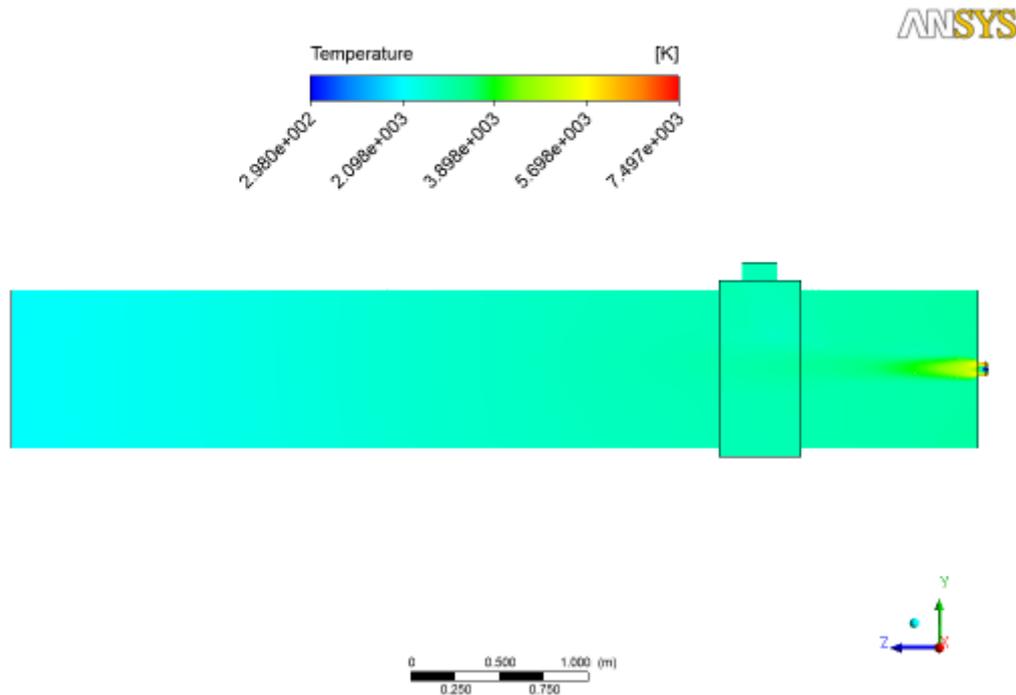


Figura 48: Campo de Temperatura no eixo YZ do Forno Rotativo Contínuo (S3.2.1).

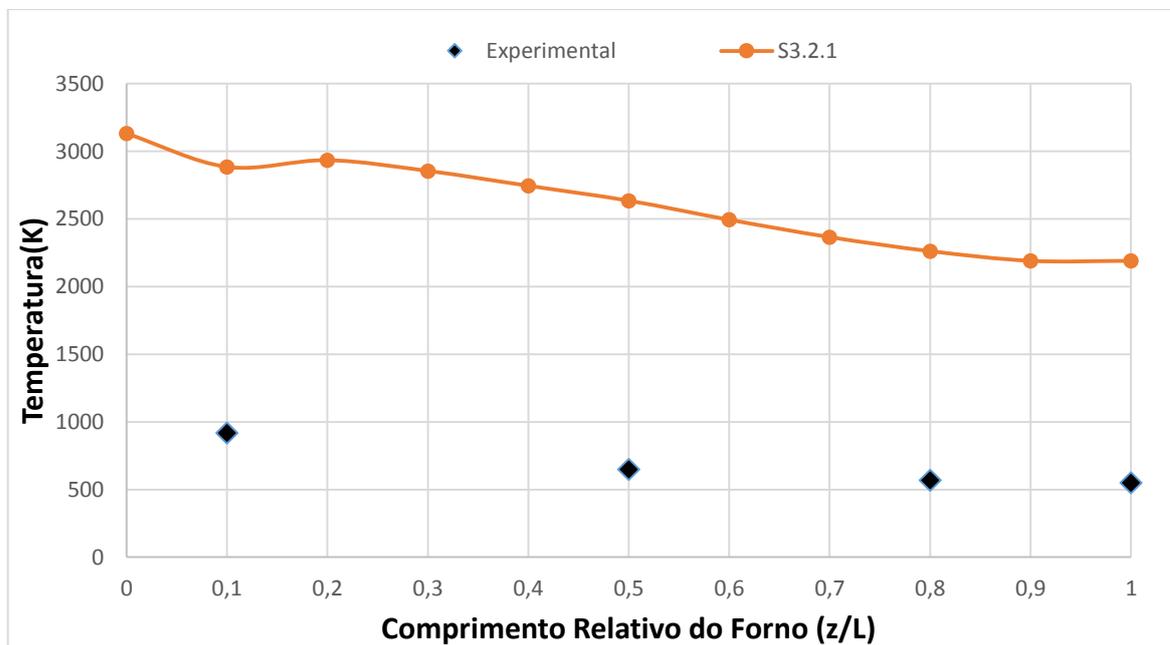


Figura 49: Gráfico Temperatura X Comprimento Relativo utilizando a combinação de modelos S3.2.1.

A 4ª combinação de modelos apresentou desempenho tão ruim quanto à combinação anterior, obtendo-se uma  $T_{m\acute{a}x} = 7497$ . Porém não apresenta resultados aceitáveis para esse tipo de modelagem

- **Simulação 3.2.2 (RNG  $\kappa$ - $\epsilon$ , Finite Rate Chemistry e Discrete Transfer)**

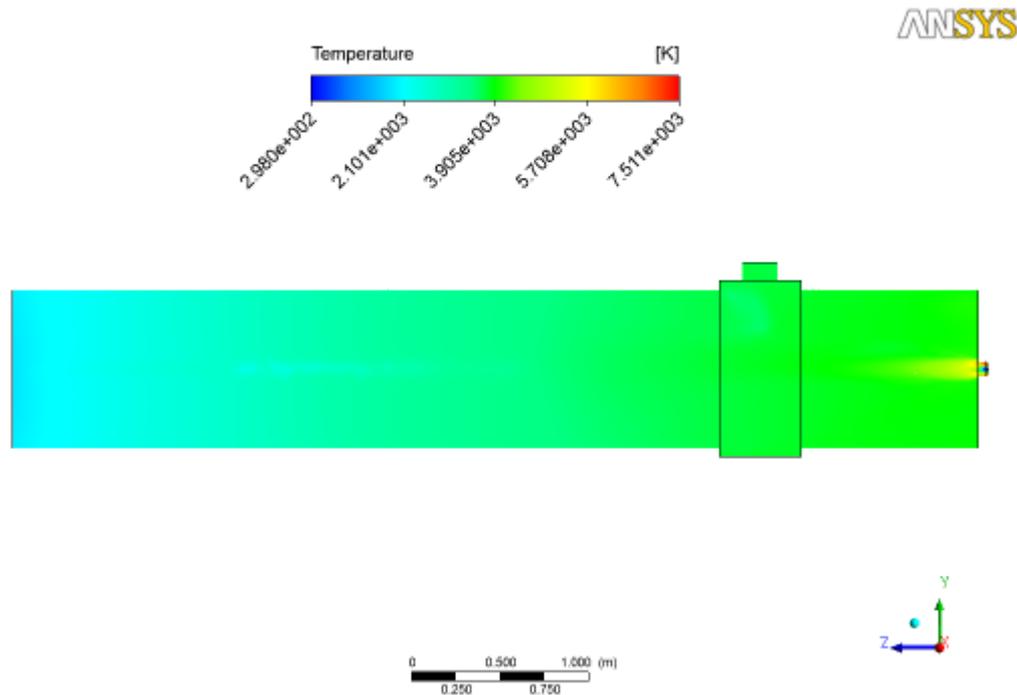


Figura 50: Campo de Temperatura no eixo YZ do Forno Rotativo Contínuo (S3.2.2).

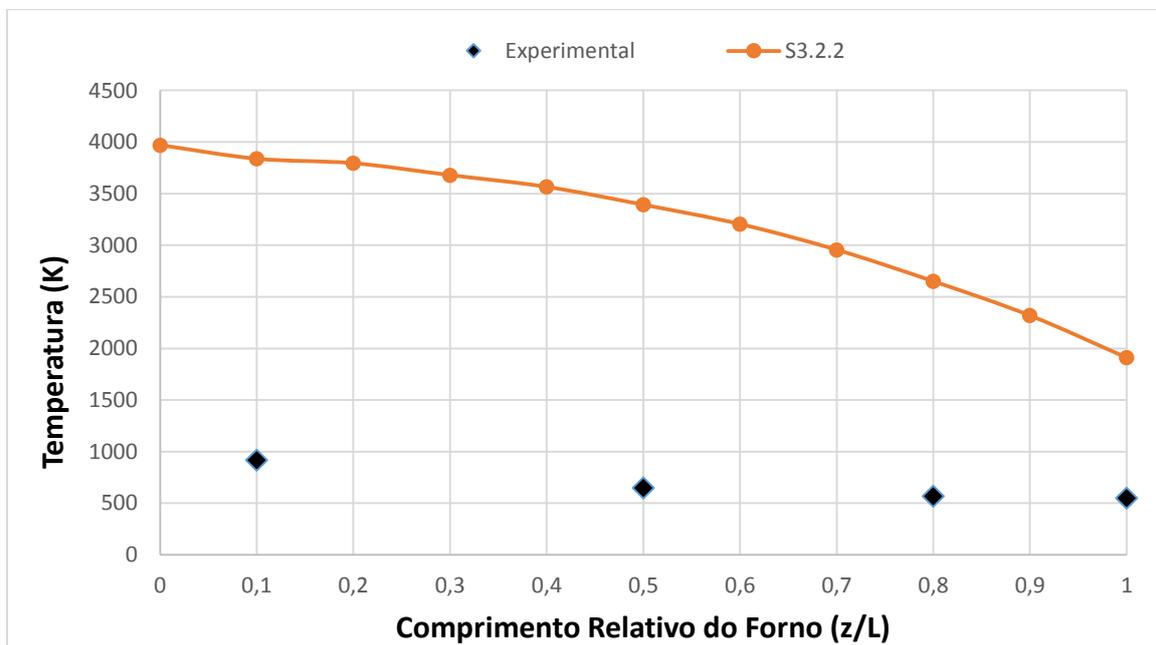


Figura 51: Gráfico Temperatura X Comprimento Relativo utilizando a combinação de modelos S3.2.2.

A 5ª combinação de modelos apresentou desempenho tão ruim quanto à combinação anterior, obtendo-se uma  $T_{\text{máx}} = 7511 \text{ K}$ , não apresentando uma aceitável para esse tipo de modelagem.

- Simulação 3.2.3 (RNG  $\kappa$ - $\epsilon$ , Finite Rate Chemistry e Roseland)

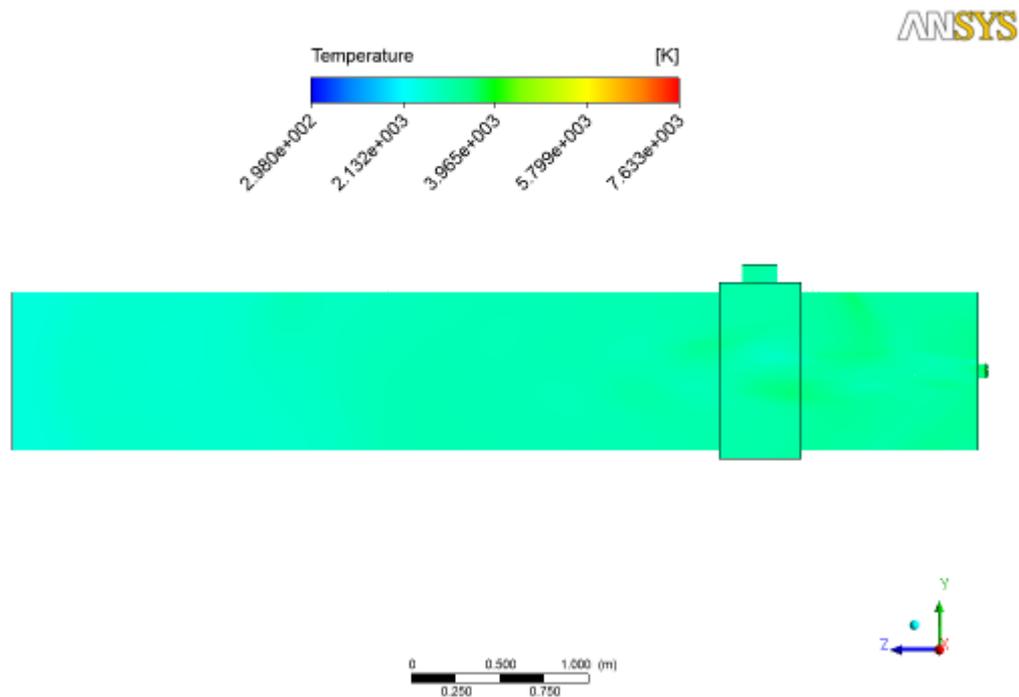


Figura 52: Campo de Temperatura no eixo YZ do Forno Rotativo Contínuo (S3.2.3).

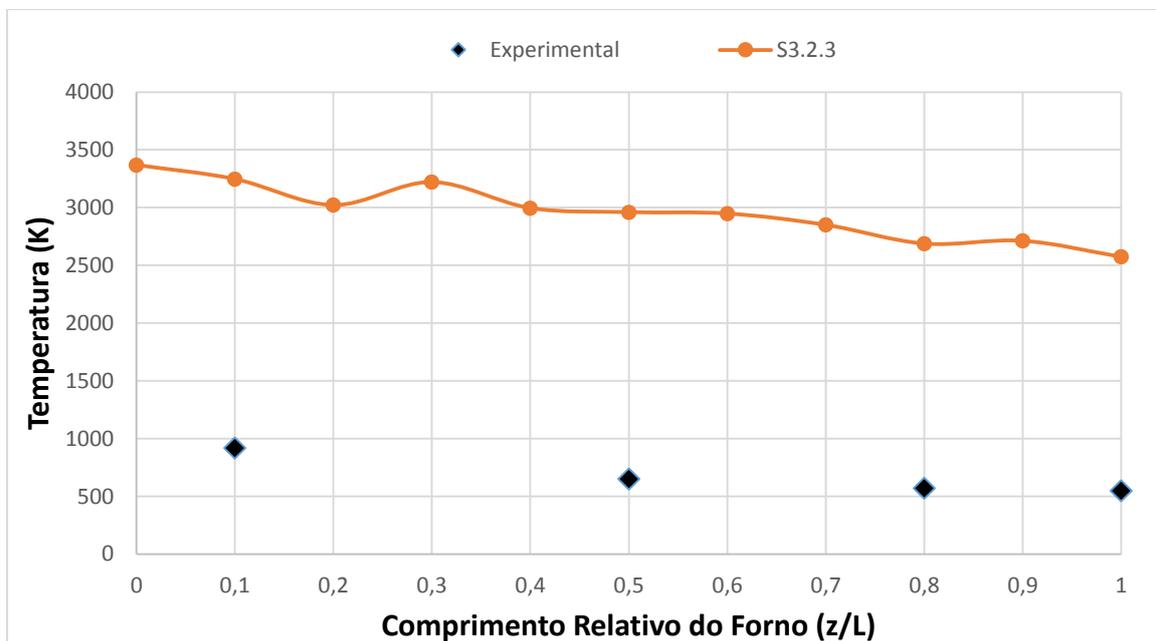


Figura 53: Gráfico Temperatura X Comprimento Relativo utilizando a combinação de modelos S3.2.3.

A 6ª combinação de modelos apresentou desempenho tão ruim quanto à combinação anterior, obtendo-se uma  $T_{\text{máx}} = 7633 \text{ K}$ , a maior temperatura alcançada. Porém não apresenta uma combinação não apresenta resultados aceitáveis para esse tipo de modelagem.

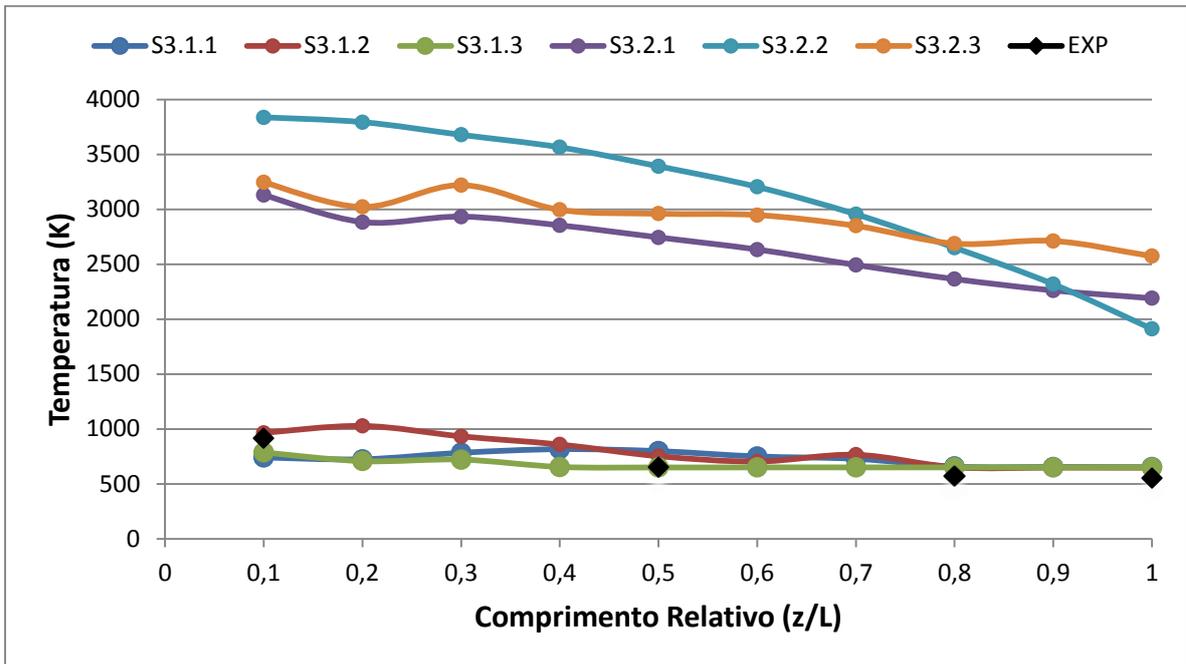


Figura 54: Gráfico Temperatura X Comprimento Relativo utilizando o modelo RNG  $\kappa$ - $\epsilon$

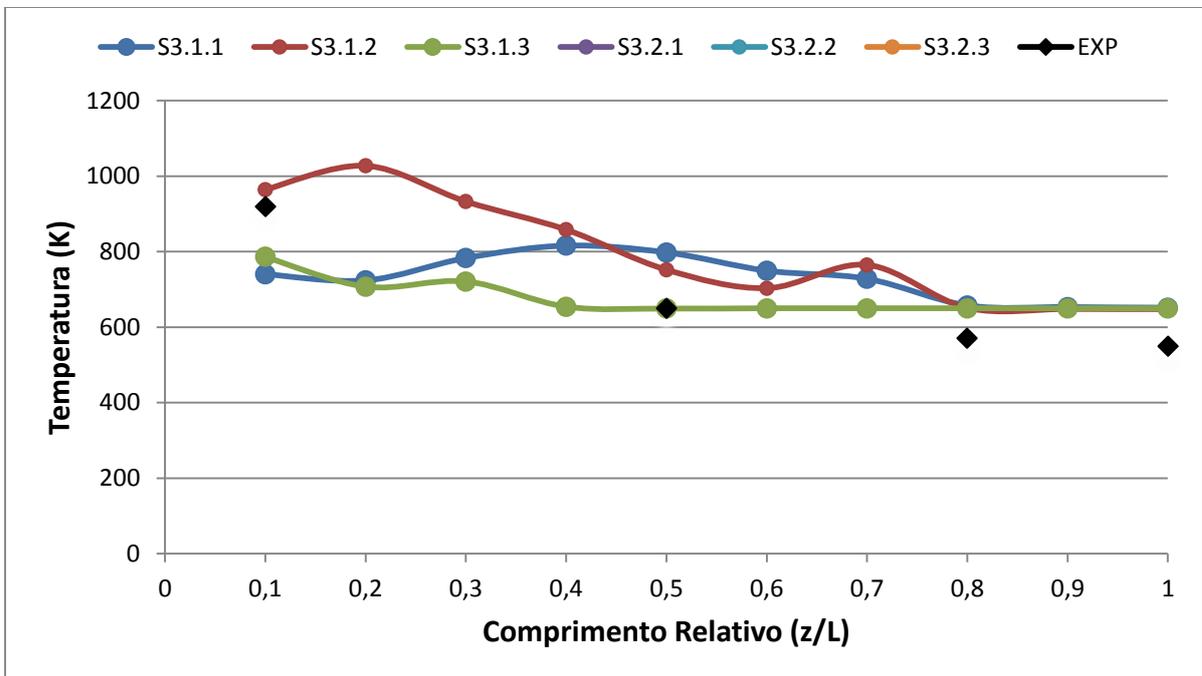


Figura 55: Gráfico Temperatura X Comprimento Relativo utilizando o modelo RNG  $\kappa$ - $\epsilon$

(Destaque da região dos valores experimentais)

A seguir é apresentada uma tabela que compara as melhores combinações de modelos para diferentes modelos de turbulência.

Tabela 8: Comparativo dos melhores valores simulados com o experimental

S1.1.3	Experimental (K)	Simulado (K)	Desvio (%)
	920	1032,070	12%
	650	630,914	3%
	570	637,447	12%
	550	648,620	18%
S2.1.3	Experimental (K)	Simulado (K)	Desvio (%)
	920	842,7	8%
	650	649,94	< 1%
	570	650	14%
	550	650	18%
S3.1.3	Experimental (K)	Simulado (K)	Desvio (%)
	920	786,222	14%
	650	649,233	< 1%
	570	659,058	16%
	550	656,690	19%

A partir dos resultados apresentados podemos observar que a melhor modelagem foi obtida utilizando a combinação **SST-Eddy Dissipation-Roseland**. Em relação aos modelos de turbulência, o SST como esperado mostrou-se o mais satisfatório, mas com uma pequena diferença, isso se deve ao fato do mesmo apresentar uma equação a mais do que os outros, equação de tensões de cisalhamento, permitindo-o ser mais robusto em turbomáquinas e/ou processos de combustão. O modelo SST apresentou um bom desempenho para predição do campo de temperatura tanto na região próxima da chama, devido seu uso do modelo  $\kappa-\omega$ , quanto fora da região de chama devido ao seu uso do modelo  $\kappa-\epsilon$ . Ele é um modelo mais recomendado em simulações onde se requer uma grande precisão das condições nas diferentes camadas de escoamento. O modelo RNG  $\kappa-\epsilon$  não demonstrou a mesma eficiência do SST, devido principalmente que em escoamentos turbulentos, o tempo característico de reação é determinado principalmente pelas propriedades das estruturas turbulentas, os vórtices.

Em relação aos modelos de combustão, o Eddy Dissipation se mostrou muito mais eficiente, já o FRCM mostrou um modelo impróprio pra esse tipo de problema nessas condições, apresentando temperaturas surpreendentes, muito devido às condições de alimentação, na qual pra determinadas porcentagem de excesso de ar ele se mostra pouco eficiente. Talvez os resultados seriam bem melhores em condições estequiométricas.

Em relação aos modelos de radiação, o Rosseland se mostrou um pouco mais eficiente, estando presente em todos os três melhores resultados. Os modelos se mostraram bastantes eficientes na região de chama ou até metade do forno rotativo, porém depois da metade do forno, apesar de apresentarem um comportamento com tendência a uma temperatura constante, algo verificado tanto na parte experimental quanto simulado, foi visto um desnível, onde os resultados obtidos numericamente sempre estiveram nessas regiões com uma temperatura

maior. Depois de determinado a melhor combinação de modelos, foi utilizada a mesma para prever grandezas que são de difícil obtenção experimental. Dessa forma, essa combinação servirá como parâmetro para oferecer a determinação de algumas outras grandezas como:

- **Variação da Densidade da Mistura Gasosa ao longo do Forno:**

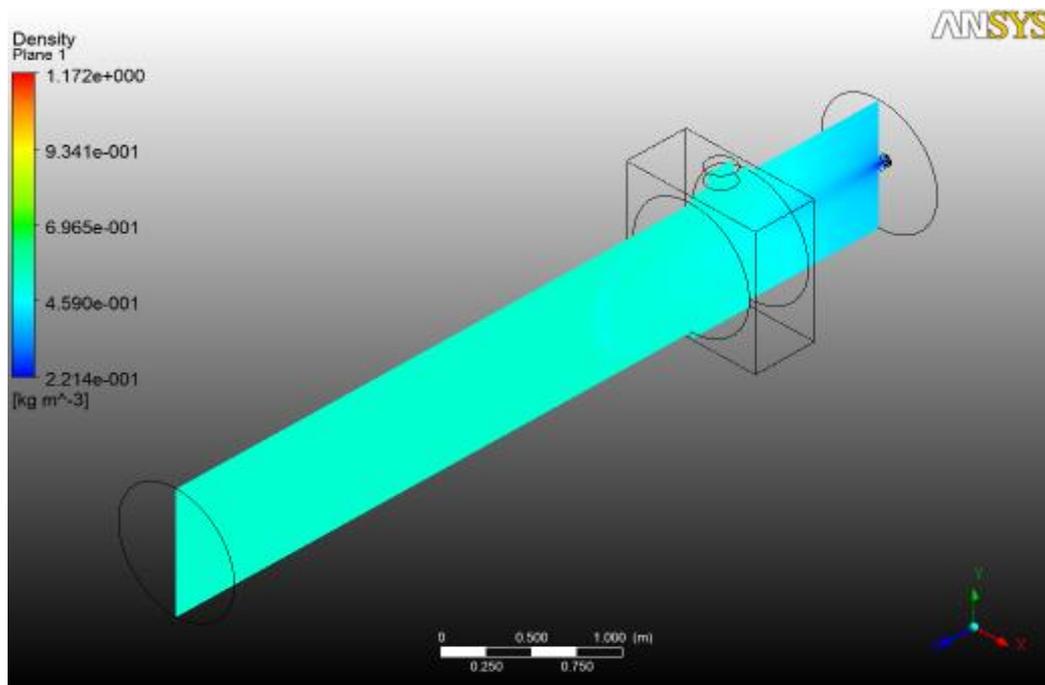


Figura 56: Campo de Densidade ao longo do Forno Rotativo Contínuo (Plano YZ).

- **Variação da Velocidade da Mistura Gasosa ao longo do Forno:**

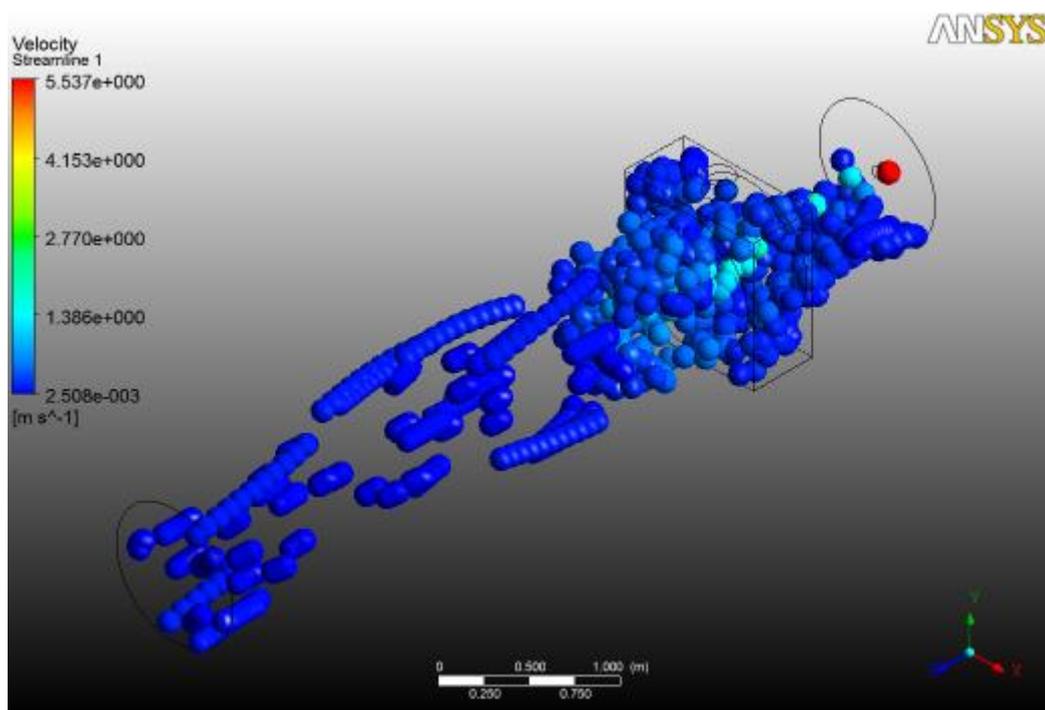


Figura 57: Campo de Velocidade ao longo do Forno Rotativo Contínuo (Plano YZ).

- **Variação da Fração de CO<sub>2</sub> gerada na Mistura Gasosa ao longo do Forno:**

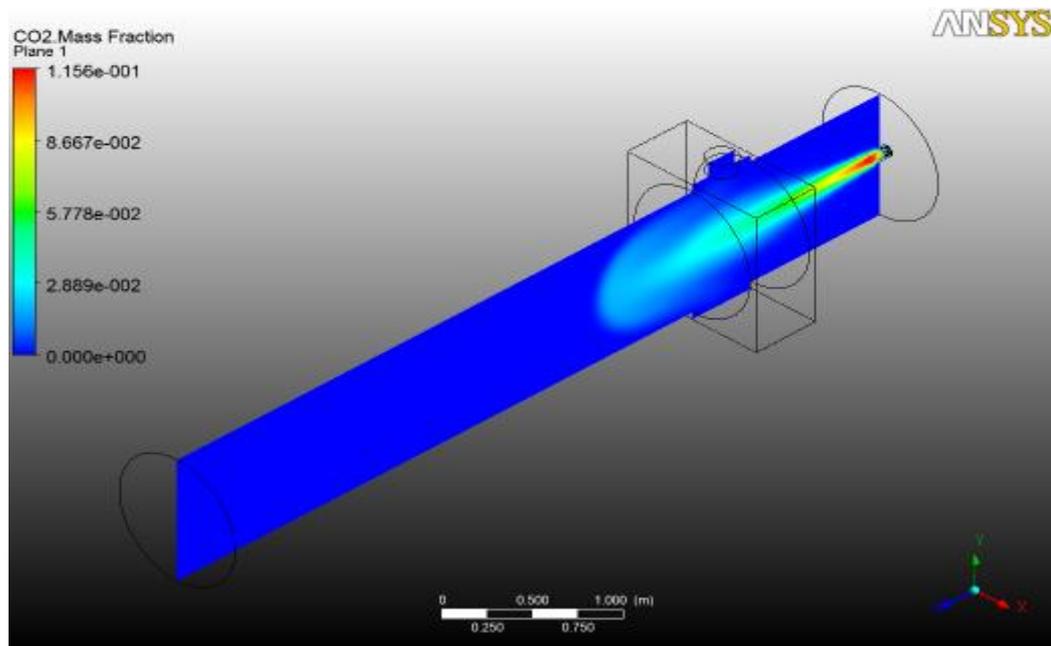


Figura 58: Campo de Fração Mássica de CO<sub>2</sub> ao longo do Forno Rotativo Contínuo (Plano YZ).

- **Variação da Fração de NO gerada na Mistura Gasosa ao longo do Forno:**

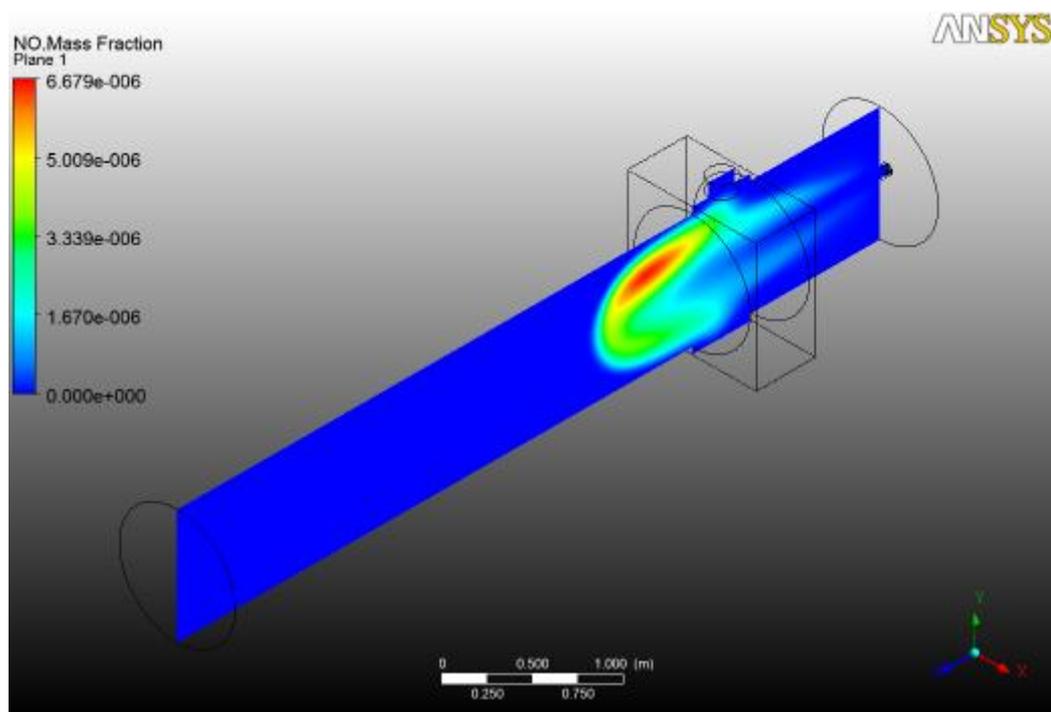


Figura 59: Campo de Fração Mássica de NO ao longo do Forno Rotativo Contínuo (Plano YZ).

- **Variação da Fração de H<sub>2</sub>O gerada na Mistura Gasosa ao longo do Forno:**

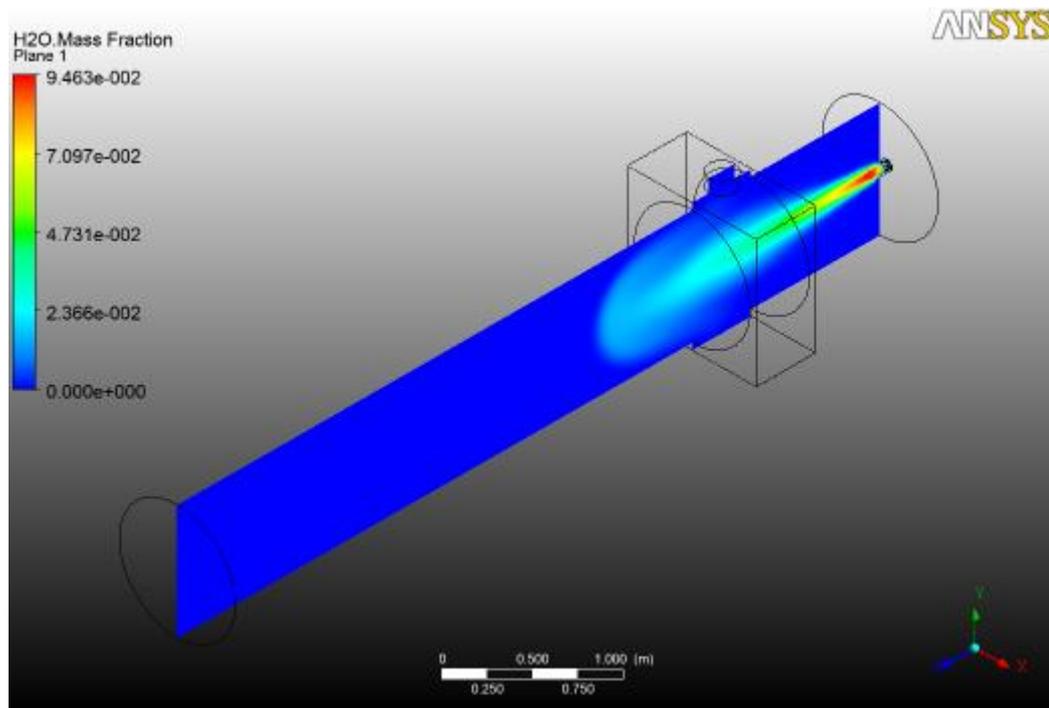


Figura 60: Campo de Fração Mássica de H<sub>2</sub>O ao longo do Forno Rotativo Contínuo (Plano YZ).

Com relação à densidade, é possível observar que na região mais quente a densidade assume seu valor mínimo,  $d = 0.22 \text{ kg/m}^3$ , e à medida que se afasta da região da chama aumenta para um valor máximo de  $d = 0.67 \text{ kg/m}^3$ . Já com relação à velocidade, percebe-se a velocidade da mistura gasosa tendo valores  $v_{\text{mín}} = 0.0025 \text{ m/s}$  até valores de  $v_{\text{máx}} = 5,537 \text{ m/s}$  na região de chama. A partir disso, pode-se estimar o valor do número de Reynolds que varia de  $10^5$ , na região da chama, até valores de  $10^2$  na região mais afastada da chama. É possível notar a grande quantidade de vórtices até quase metade do forno, zona onde ocorre um expressivo gradiente de temperatura, caracterizando um escoamento turbulento. Já na região mais afastada como o gradiente de temperatura não é tão grande o regime tende a um escoamento laminar.

São mostrados também os perfis de geração de CO<sub>2</sub>, NO e H<sub>2</sub>O. Importante salientar que esses perfis estão associados à região onde são geradas essas substâncias. No caso do CO<sub>2</sub> é importante notar que é formado em sua maioria na região da chama podendo atingir 11% de fração mássica, e sendo gerado até  $z = 0,4$  (comprimento relativo). Já o NO é da ordem de  $10^{-6}$ , sendo formado em sua maioria na região logo após a chama. A H<sub>2</sub>O, assim como o CO<sub>2</sub>, tem sua maior geração também na região próxima à chama, atingindo valores de 9% em fração mássica. Isso se deve ao CO<sub>2</sub> e H<sub>2</sub>O serem formados pela reação de combustão de hidrocarbonetos, já a formação do NO se dá por uma reação paralela.

## 2ª Parte: Análise com Relação aos Valores Teóricos

### 4.3 Comparação com Valores Teóricos

A seguir são apresentados todos os valores de temperatura de chama adiabática obtidos teoricamente e através das simulações:

Tabela 9: Valores da Temperatura Teórica de Chama Adiabática em função do Excesso de Ar.

<b>Excesso de Ar (%)</b>	<b>Temperatura da Chama (K)</b>
<b>0</b>	2308,75
<b>5</b>	2241,73
<b>10</b>	2179,01
<b>15</b>	2120,18
<b>20</b>	2064,89
<b>25</b>	2012,85
<b>30</b>	1963,76

Tabela 10: Comparativo do melhor valor simulado com o teórico.

<b>Combinação de Modelos</b>	<b>Temperatura de Chama (K)</b>	<b>Combinação de Modelos</b>	<b>Temperatura de Chama (K)</b>	<b>Combinação de Modelos</b>	<b>Temperatura de Chama (K)</b>
<b>S1.1.1</b>	1762	<b>S2.1.1</b>	2002	<b>S3.1.1</b>	2034
<b>S1.1.2</b>	2024	<b>S2.1.2</b>	2001	<b>S3.1.2</b>	1670
<b>S1.1.3</b>	1303	<b>S2.1.3</b>	1024	<b>S3.1.3</b>	1066
<b>S1. 2.1</b>	7480	<b>S2.2.1</b>	7484	<b>S3.2.1</b>	7497
<b>S1. 2.2</b>	7492	<b>S2.2.2</b>	7482	<b>S3.2.2</b>	7511
<b>S1.2.3</b>	501	<b>S2.2.3</b>	6910	<b>S3.2.3</b>	7633

Analisando as tabelas é possível constatar que para excesso de ar de 15%, a modelagem que apresentou a melhor adequação aos valores de temperatura teórica de chama adiabática foi a combinação S3.1.1 (RNG k-e, Eddy Dissipation e P1). Seu valor foi de  $T_{sim} = 2034$  K, enquanto que a temperatura teórica foi de 2120,18 K, ou seja, um desvio de aproximadamente 4%.

Isso pode ser explicado por alguns fatores característicos aos modelos, como o fato de que o modelo de combustão Eddy Dissipation considera a combustão completa do combustível, representando uma quantidade de calor bem próximo aos valores de TTCA. Com relação ao modelo de turbulência, o RNG k-e levou vantagem por sua capacidade de prever as menores escalas de turbulência, sendo mais representativo quando se analisa apenas a zona de combustão, que apresenta gradientes de temperatura expressivos, além de muitos vórtices. Com relação ao modelo radiativo, o P1 Method mostrou-se mais eficiente devido principalmente a sua capacidade de minimizar uma previsão excessiva de calor gerado pelo modelo Eddy Dissipation.

Determinado a melhor combinação de modelos, foi possível estudar qual representativo é essa modelagem na representação da temperatura teórica de chama adiabática, para isso variou-se o excesso de ar, comparando os dados simulados de temperatura de chama com os dados teóricos.

Tabela 11: Comparativo dos melhores valores simulados com o valor teórico.

Excesso de Ar (%)	TTCA (K)	Temperatura Simulada (K)	Desvio (%)
0	2308,75	1942	16
5	2241,73	1956	13
10	2179,01	1969	10
15	2120,18	2034	4
20	2064,89	2001	3
25	2012,85	1891	6
30	1963,76	2025	3

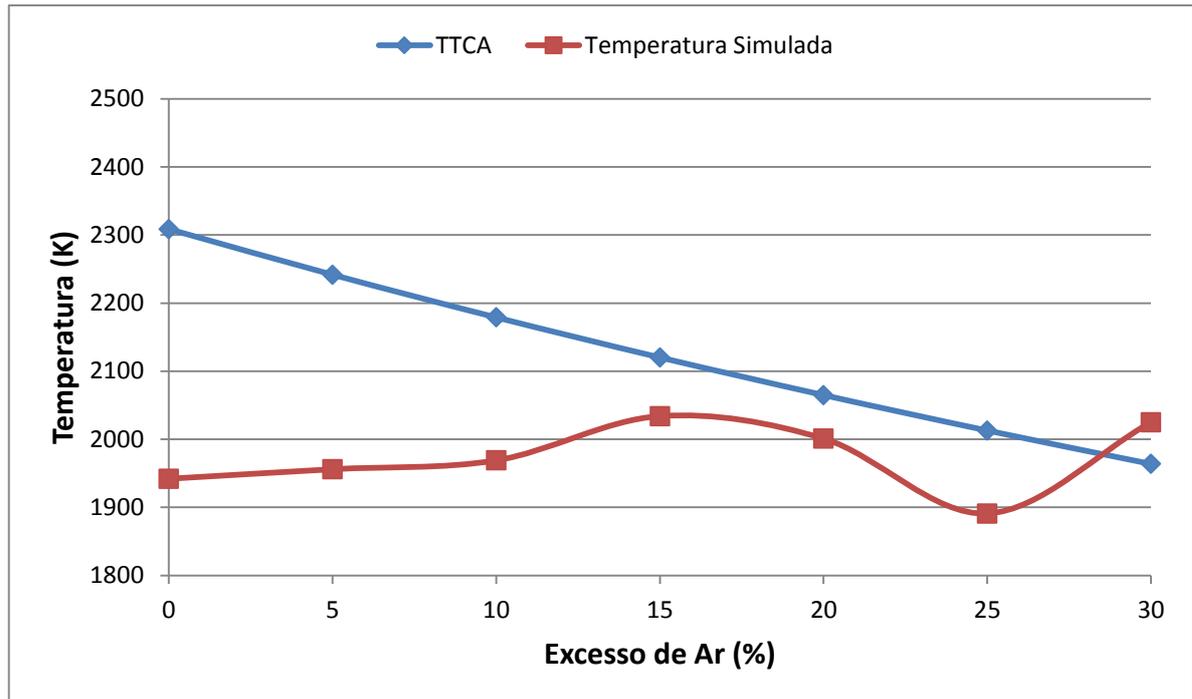


Figura 61: Gráfico Temperatura X Excesso de Ar utilizando o modelo RNG  $\kappa$ - $\epsilon$ .

É importante notar que para vazão estequiométrica de ar, o desvio entre a temperatura teórica e a simulada atinge seu valor máximo, 16%. Isso ocorre devido à modelagem suficiente não reagir todo o combustível na região de chama. Porém à medida que se aumenta os valores de excesso de ar, observa-se uma aproximação entre os valores da temperatura teórica com os valores simulados. Isso ocorre porque à medida que se aumenta o excesso de ar, aumenta-se também a quantidade de combustível que reage na região da chama. Outro ponto importante a ser identificado, é que pra valores de excesso de ar acima de 10% a modelagem apresenta um desvio de 10%, atingindo um valor mínimo quando se usa 20% em excesso de ar.

## 5 CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS

A partir deste trabalho foi possível concluir:

- Dos modelos utilizados a melhor combinação para representação foi SST-Eddy Dissipation-Rosseland;
- Essa combinação é capaz de prever os campos de temperatura de forma bastante eficiente, com desvio máximo de 8% da temperatura experimental, até a metade do forno;
- Para regiões mais afastadas, o desvio sobe para um valor máximo de até 18%;
- Foi possível a obtenção de dados de velocidade e densidade da massa gasosa;
- Foi possível prever até que região ocorre à liberação de H<sub>2</sub>O, CO<sub>2</sub> e NO, bem como identificando seus respectivos valores de frações mássicas;
- É possível identificar que para modelagem do valor da temperatura teórica de chama adiabática a melhor modelagem foi à simulação com os modelos RNG  $\kappa$ - $\epsilon$  – Eddy Dissipation e P1 Method;
- Foi possível constatar que à medida que se aumenta o valor do excesso de ar, os valores simulados se aproximam dos valores teóricos, atingindo um desvio de 3% quando se tem 20% de excesso de ar;

Dentre as perspectivas para trabalhos futuros, pode-se citar:

- Estender a metodologia desenvolvida neste trabalho para outros tipos de fornos;
- Testar o modelo com predições para temperatura da gipsita;
- Verificar a qualidade do modelo, através de testes com várias vazões de combustível e valores de excesso de ar diferentes;
- Analisar qualitativamente os campos de temperatura com medidas através de uma câmera de infravermelho;
- Aplicar a Fluidodinâmica Computacional (CFD) para análise de outros componentes do forno, como o ciclone e a torre de lavagem, analisando a eficiência dos mesmos;

## 6 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ALENCAR, Harley Souza. **Estudo da Termo-Aerodinâmica de Câmaras de Combustão para Turbina à Gás: Aplicação ao caso de Micro Turbinas**. Tese de Doutorado. Itajubá, MG: UNIFEI, 2007.

ANGELERI, F.B., CARDOSO, S.R., SANTOS, P.S. **As gipsitas Brasileiras e sua Aplicação na Indústria da Cerâmica – Parte I**, 1982.

ANSYS COMPANY. **CFX Solver Theory Manual**. Oxfordshire: CFX, 2013.

ARIMA, M.N.; KRIEGER, G.C. Formação de CO e CO<sub>2</sub> em chamas de difusão de Metano utilizando-se os métodos EDDY BREAK UP, EDDY DISSIPATION e PDF com formas pré-assumidas. In: **Encit- Encontro Nacional de Ciências Térmicas**. Porto Alegre, RS.

BALTAR, C. A. M; BASTOS, F. F.; BORGES, L. E. P. Variedades Mineralógicas e Processos Utilizados na Produção dos Diferentes Tipos de Gesso. In: Encontro nacional de tratamento de minérios e metalurgia extrativa. **Anais**: Florianopolis. p. 329, 2004.

BARR, P.V.; BRIMACOMBE, J.K.; WATKINSON, A.P.; A heat-transfer model for the rotary kiln: Part I. Pilot kiln Trials. In: **Metallurgical Transactions B**. v. 20B, p. 391-402.

BASTOS, F. F.; BALTAR, C. A. M., Avaliação dos processos de calcinação para produção de gesso Beta. In: **XLIII Congresso Brasileiro de Química**. Anais do Congresso. Minas Gerais, 2003.

BASTOS, Jaci Carlo Schramm; **Simulação do Escoamento Gás-Sólido em um Duto Cilíndrico Vertical em Leito Fluidizado Rápido aplicando a técnica CFD**. Dissertação de Mestrado. Campinas, SP: UNICAMP, 2005.

BAUKAL, C.E.; Industrial Burners Handbook. **Industrial Combustion Series**.2001.

BENACHOUR, M.; PERES, L. S.; SANTOS, V. A. **Gesso: aplicação na construção civil**. Recife: Editora Bagaço, 2008.

BINELI, Aulus Roberto Romão. **Simulação Numérica CFD no Processo de Têmpera**. Dissertação de Mestrado. Campinas, SP: UNICAMP, 2009.

BIRD, R. B., STEWART, W. E., LIGHTFOOT, E. N.; **Transport Phenomena**. John Wiley & Sons. LTC, 2004.

BOLOGNA, J.; **Illuminated Manuscripts: The Book Before Gutenberg**. Ed.C.M. Lamb, 2<sup>a</sup> ed., New York, Pentallie, 1976.

CFD-online. **Apresenta informações sobre CFD**. Disponível em: <<http://www.cfd-online.com>>. Acesso em: 06 de março de 2011.

CHARRO, Rodrigo. **Simulação Numérica da Transferência de Calor em Fornos e Caldeiras**. Projeto de Termodinâmica Aplicada. Instituto Superior de Tecnologia, 2002.

CONAMA, (Conselho Nacional do Meio Ambiente), Resolução 307, 5 de Julho de 2002  
**Diretrizes, critérios e procedimentos para a Gestão dos Resíduos da Construção Civil**.

COPERGÁS. **Companhia Pernambucana de Gás**. Publicado em: 2009. Disponível em: <<http://www.copergas.com.br>>. Acesso em: 12 de outubro de 2011.

COSTA, Aldir Pimentel. **Simulação Numérica da Penetração de Fluido de Perfuração em Reservatórios de Petróleo**. Monografia. Rio de Janeiro, RJ: UFRJ/EQ, 2009.

DALL'AGNOL, Anderson. **Simulação Numérica do Processo de Combustão de Metano em um Queimador Cilíndrico**. Monografia. Porto Alegre, RS: UFRGS, 2010.

DAVIDSON, L.; **An Introduction to Turbulence Models**. Publication n° 97/2, Department of Thermo and Fluid Dynamics, Chalmers University of Technology, Goteborg, Suécia, 48 p, 2003.

DIAS, Daniel B. **Avaliação de Técnicas de Fluidodinâmica Computacional em Ciclones**. Dissertação de Mestrado. Campinas, SP: Unicamp, 2009.

DICKOW, Marcela Ferraz. **Análise da Eficiência Energética em Sistemas de Combustão a Gás Natural**. Monografia. Porto Alegre, RS: UFRGS, 2011.

DECKER, Rodrigo Koerich. **Modelagem e Simulação Tridimensional Transiente do Escoamento Gás-Sólido**. Dissertação de Mestrado. Campinas, SP: Unicamp, 2003.

DONOSO, J. P.; **Transferência de Calor por Radiação**. Apostila. São Paulo, SP: IFSC-USP, 2008.

DUPONT, V., WILLIAMS, A. NOx Mechanisms in Rich Methane-Air Flames. **Combustion and Flame**. Volume 114, Issues 1-2, pp.103-118, 1998.

FABIÃO, Priscila Nunes. **Análise Experimental e Numérica do Escoamento Multifásico Gás-Sólido em Ciclones**. Dissertação de Mestrado. Blumenau, SC: Universidade Regional de Blumenau, 2010.

FAETH, G.M., GORE, J.P., CHURCH, S.G., JENG, S.M. Radiation from Turbulent Diffusion Flames. In: **Annual Review of Numerical Fluid mechanics and Heat Transfer**. C.L. Tein and T.C.

FALCÃO, A. F.O; **Apostila sobre Turbomáquinas**. 2002.

FORTUNA, A. O., **Técnicas Computacionais para Dinâmica dos Fluidos: Conceitos Básicos e Aplicações**; Editora as Universidade de São Paulo, São Paulo, 2000.

FUDIHARA, T.J., MORI, M., LAURITO, J., SPITNER Jr, R. Perfis axiais de temperatura e análises da sensibilidade paramétrica em um incinerador tipo forno rotativo. In: **Revista de Ciência e Tecnologia**. UNIMEP - Piracicaba - SP, v. 6, n. 1, p. 29-46, 1997.

GAS NET. **Apresenta informações técnicas referentes ao gás natural**. Publicado em: 2009. Disponível em: <<http://www.gasnet.com.br>>. Acesso em: 02 novembro 2011.

GAZONI, Leandro Carlos. **Um Arcabouço para Suporte a Técnicas de Refinamento Local em Malhas Não Estruturadas**. Dissertação de Mestrado. Rio de Janeiro, RJ: COPPE/UFRJ, 2011.

GLAUCO, C. S.; SILVA, E. L.; HAPP, J. F; **Tecnologia da Combustão**. UNICAMP. Disponível em < <ftp://ftp.fem.unicamp.br/pub/IM351>> Acesso em: 10 agosto 2012.

GONÇALVES, N.D.F.; **Método dos Volumes Finitos em Malhas Não-Estruturadas**. Dissertação de Mestrado. Faculdade de Ciências da Universidade do Porto. 2007.

GRECO, C. A burning Advantage. In: **World Cement**. v.31, n. 12, p 67-70, 2000.

HILSDORF, J. W.; BARROS, N. D.; TASSINARI, C.A.; COSTA, I. – Química Tecnológica. In: **Thomson Learning**. 3-16, 175-185, 2004.

HOERLLE, Cristian A. Estudo da Influência do espalhamento radiante em câmaras de combustão de metano. GESTE- Grupo de Estudos Térmicos e Energéticos. UFRGS

HOLDRIGE, D.A. The characterization of plaster. **Trans. of the British Ceram Society**.v.64, n.4, 1975.

HONK, B. J.; CUTLER, I. B.; WADSWORTH, M. E., Rate of thermal dehydration of kaolinite in vacuum, **J. Am. Ceram. Soc.**, 45 (3), 133-136, 1962.

HOLMAN, J.P.; LOYD, J.; **An introduction to Combustion – Concepts and Applications**. McGraw-Hill Series in Mechanical Engineer, 2000.

HUAPAYA, L.E.A.; **Caracterização numérica e experimental de uma chama pré-misturada**. Dissertação de Mestrado. Rio de Janeiro, RJ: PUC, 2008.

JOAQUIM JUNIOR, Celso Fernandes. **Desenvolvimento e otimização de misturador estático com o uso da fluidodinâmica computacional**. Dissertação de Mestrado. Campinas, SP: UNICAMP, 2008.

JONES, A.K., CHAPMAN, P.J. Computational fluid dynamics combustion modeling – a comparison of secondary air system designs. In: **TAPPI Journal**, vol. 76, nº 7, p.195-202, 1993.

- KUO, K.K.; **Principles of Combustion**. John Wiley & Sons Edition, New York, EUA.
- KOLYFETIS, V. E., MARKATOS, N. C.; Aerodynamics and coal – Flame modelling in the burning zone of cement Rotary kiln, Part 1. In: **ZKG International**, n.4, 1996.
- KOLYFETIS, V.E.; MARKATOS, N.C.; Aerodynamics and coal- Flame modelling in the burning zone of cement rotary kiln, Part 2. In: **ZKG International**, n.6, 1996.
- KOUTMOS, P.; Damkohler Number Description of Local Extinction in Turbulent Methane Jet Diffusion Flames. **Journal of Fuel**, No 78, p623-626, Elsevier. 1999.
- LAVICH, Rodrigo Ramos. **Simulação de uma Coluna de Adsorção em Leito Fixo para a Remoção de Poluentes de Gás e Petróleo**. Monografia Final. Santa Catarina, SC: UFSC, 2003.
- LIU, H.; ZAILANI, R.; GIBBS, B.M.; Comparisons of pulverized coal combustion in air and in mixtures of O<sub>2</sub>-CO<sub>2</sub>. **Fuel**. Vol. 84, pp. 833-840, 2005.
- LEFEBVRE, A.H.; The Role of Fuel Preparation in Low Emission Combustion. In: **ASME Journal of Engineering for Gas Turbines and Power**, vol. 117, pp. 617-654, 1995.
- LEFEBVRE, A.H., BALLAL, D.R. Gas Turbine Combustion: Alternative Fuels and Emissions. 3<sup>rd</sup> ed., **CRC Press**, Boca Raton, 2010.
- LOUIS, J.J.J., KOK, J.B.W., KLEIN, S.A. Modeling and Measurements of a 16-kW Turbulent Non-adiabatic Syngas Diffusion Flame in a Cylindrical Combustion Chamber. In: **Combustion Flame**. Vol.125, pp. 1012-1031, 2001.
- LYCKAMA, N.J.A., KOMEM, E.M.J., HERMANNNS R.T.E., GOEY, L.P.H, VAN BEEK, M.C., VERHAGE, A.J.L. CFD modeling of biogas Co firing in a gas turbine. In: **Proceedings of ASME Turbo Expo, Power for Land, Sea and Air**. Amsterdam, The Netherlands, GT 2002-30103, June 03-06, 2002.
- MALASEKERA, W., VERSTEEG, H. K.; **An introduction to Computational Fluid Dynamics**. Prentice Hall. Pearson Education Limited, 1995.
- MASTORAKOS, E., MASSIAS, A., TSAKIROGLOU, C.D., PAYATAKES, A.C. CFD for cement kilns including flame modeling, heat transfer and clinker chemistry. In: **Applied Mathematical Modelling**. v.23, p.55-76, 1999.
- MALISKA, C. R., **Transferência de calor e mecânica dos fluidos computacional**. Rio de Janeiro: Livros Técnicos e Científicos, 2004.
- MIGUEZ, M.F.; **Estudo em CFD do escoamento de líquido e da geração de área efetiva de recheios estruturados**. Projeto Final de Curso. Rio de Janeiro, RJ: UFRJ/EQ, 2008.
- MOKHATAB, Saeid; POE, William A.; SPEIGHT, James G. **Handbook of natural gas transmission and processing**. 1.ed. Burlington: Gulf Professional Publishing. 672 p. , 2006.
- MOREIRA G. A. M., VENSON G. G., BARROS J. E. M., VALLE R. M. Análise do Comportamento do Escoamento de Ar em uma Câmara de Combustão Tubular usando CFD. **Proceedings of the 11th Brazilian Congress of Thermal Sciences and Engineering**, ENCIT. Curitiba, Brazil. 2006.

MOURA, Helder Lima de. **Análise do Fenômeno da Cavitação em Válvula de Controle utilizando Fluidodinâmica Computacional**. Trabalho de Conclusão de Curso. Recife, PE: UFPE, 2010.

MOURA, Newton Reis de. **Simulação Fluidodinâmica Computacional de Desempenho de um Impelidor de um Compressor Centrífugo**. Dissertação de Mestrado. Rio de Janeiro, RJ: COPPE/UFRJ, 2008.

NALLASAMY, M., Turbulence models and their applications to the prediction of internal flow: a review. In: **Computers & Fluids**, 15, 151-194, 1987.

NAVARRO, Fredy Antonio Cabrales. **Análise da Influência de Impelidores Laterais no Tempo de Mistura em Tanques de Estocagem de Diesel com o Uso da Fluidodinâmica Computacional**. Dissertação de Mestrado. Campinas, SP: UNICAMP, 2011.

NIECKELE, A. O.; NACCACHE, M. F.; GOMES, M. S. P.; CARNEIRO, J. E.; SERFATY, R.; Evaluation of models for combustion processes in a cylindrical furnace. ASME-IMECE, **International Conference of Mechanical Engineering**, New York, 2001.

OLIVEIRA, Julierme Gomes C. **Estudo Teórico-Computacional por via CFD e Experimental da Combustão do Gás Natural para Tratamento de Efluentes Orgânicos Líquidos aplicando a nova tecnologia DICTT**. Dissertação de Mestrado. Recife, PE: UFPE, 2009.

OZISIK, M.N.; **Transferência de Calor: Um texto básico**. Rio de Janeiro: Guanabara-Koogan, 1990.

PETROBRÁS. **Página de apresentação de produtos e serviços**. Publicado em: 2009. Disponível em: <[http://www.petrobras.com.br/produtos\\_servicos/port/index.asp](http://www.petrobras.com.br/produtos_servicos/port/index.asp)>. Acesso em: 13 de março de 2011.

PIAIA, Julio Cezar Sanchet; **Secagem da Linguiça Calabresa: Experimentação e Modelagem 3D Aplicadas a Fornos Industriais**. Tese de Doutorado. Florianópolis, SC: UFSC, 2009.

PINHEIRO JÚNIOR, José Lúcio. **Estudo Numérico de uma Câmara de Combustão de Microturbina a Gás de Baixa Emissão de Poluentes**. Dissertação de Mestrado. Brasília, DF: UnB, 2010.

PISCHE, Ana Carolina G. **Desenvolvimento de Metodologia Experimental para Estudo de Validação de Modelos de CFD para o Escoamento Multifásico em Coluna de Bolhas**. Dissertação de Mestrado. Blumenau, SC: Universidade Regional de Blumenau, 2011.

RIDLUAN, A.; EIAMSA-ARD, S.; PROMVONGE, P.; Numerical Simulation of 3D turbulent isothermal flow in a vortex combustor. **International Communications in Heat and Mass Transfer**. Vol. 34, pp. 860-869, 2007.

RIBEIRO, A. S., Produção de Gesso Reciclado a Partir de Resíduos Oriundos da Construção Civil. **Dissertação de Mestrado**. Programa de Mestrado em Engenharia Urbana da Universidade Federal da Paraíba. 105 p. , 2006.

RIBEIRO, Carlos Adriano C. **Uso combinado do software comercial CFX e técnicas de problemas inversos em transferência de calor**. Dissertação de Mestrado. Itajubá, MG: UNIFEI, 2012.

RODRIGUES, Clarissa P. **Modelagem e Simulação da Câmara de reação de uma caldeira a carvão pulverizado**. Dissertação de Mestrado. Porto Alegre, RS:UFRGS, 2004.

RONCHETTI, Bernardo. **Simulação Numérica da Combustão de Metano em Câmara Cilíndrica utilizando o CFX 10.0**. Dissertação de Mestrado. Porto Alegre, RS: UFRGS, 2008.

SANTOS, Valdemir Alexandre. **Análise cinética da reação de desidratação térmica da gipsita na obtenção do gesso beta**. Tese de Doutorado. Departamento de Engenharia de Sistemas Químicos e Informática. Universidade Estadual de Campinas. Campinas: 170 p., 1996.

SERFATY, R.; **Combustão e Queimadores**. CENPES, 2007.

SHAMES, I. H.; CLIVE, L. D.; **Solid Mechanics: a variational approach**. McGraw-Hill, 1973.

SINDUSGESSO. Apresenta informações sobre a produção de Gesso. Disponível em: <<http://www.sindusgesso.org.br/>>. Acesso em 10 de novembro de 2011.

SILVA, Cristiano Vitorino. **Simulação Numérica da Combustão Turbulenta de Gás Natural em câmara Cilíndrica**. Tese de Doutorado. Porto Alegre, RS: UFRGS, 2005.

SILVA, C.V.; FRANÇA, F.H.R.; VIELMO, H.A.; Analysis of the Turbulent, Non-Premixed Combustion of Natural Gas in a Cylindrical Chamber with and without Thermal Radiation. In: **Combustion Sci. Technology**. Vol. 179, pp. 1605-1630, 2007.

SIMÕES, Marcelo Rodrigues. **Simulação Computacional de um escoamento Turbulento em Compressor Axial utilizando Ferramenta CFD**. Rio de Janeiro, RJ: COPPE/UFRJ, 2009.

SKLAVOUNOS, S.; RIGAS, F.; Validation of Turbulence Models in Heavy Gás Dispersion Over Obstacles. **Journal of Hazardous Materials**, No 108, p9-20, Elsevier. 2004.

SMITH, D.A., COX, G. Major Chemical Species in Turbulent Diffusion Flames. **Combustion and Flame**, Number 91, pp.226-238, 1992.

SOBRINHO, A.C.P., AMARAL, A.J., DANTAS, J.O. **Balanco mineral Brasileiro**, 2001.

SOUZA, Jaime Neiva Miranda. **Modelagem e Simulação de Escoamento Multifásico em Dutos de Produção de Óleo e Gás Natural**. Tese de Doutorado. Rio de Janeiro, RJ: UFRJ/Escola de Química, 2010.

SOUZA, Marcelo Eduardo A. O. **Estudo de um processo de Combustão de Gás Totalflex para Calcinação de Gipsita em Regiões Remotas**. Dissertação de Mestrado. Recife, PE: UFPE, 2006.

SOUZA, Marcelo Alexandre. **Estudo Hidrodinâmico da Estaca Torpedo através do software ANSYS CFX**. Trabalho de Conclusão de Curso. Recife, PE: UFPE, 2011.

SOUZA, Valter César. **Bicos dispersores da indústria do petróleo-análise bidimensional aplicando fluidodinâmica computacional**. Dissertação de Mestrado. Campinas, SP: Unicamp, 2001.

SYNDICAT NATIONAL DÈS INDUSTRIES DU PLÂTRE. **Le Plâtre - Physico-Chimie et Fabrication**. Paris, France, 1982. Disponível em [www.gessotopline.com.br/historia](http://www.gessotopline.com.br/historia). Acessado em 20 de outubro de 2011.

TELEKEN, Joel Gustavo. **Análise da Fluidodinâmica do Prato Perfurado de uma Unidade Piloto de Destilação**. Dissertação de Mestrado. Florianópolis, SC: UFSC, 2009.

THOMPSON Jr, D.V.; **The Materials and Techniques of Medieval Painting**, New York Dover, 1956.

URNS, S.R.; **An Introduction to Combustion, Concepts and Applications**. Second Edition, McGraw-Hill, 2000.

VERSTEEG, H.K.; MALALASEKERA, W.; **An introduction to Computational Fluid Dynamics (The Finite Volume Method)**. Prentice Hall, 1995.

VEYNANTE, D.; VERVISCH, L.; Turbulent Combustion Modeling. **Prog. Energy Combustion Sci.** vol.28, pp. 193-266, 2002.

VIEIRA, Camila Braga. **Simulação Computacional da Convecção Natural em Cavidades contendo um Fluido com Geração Interna de Calor**. Dissertação de Mestrado. Rio de Janeiro, RJ: COPPE/UFRJ, 2010.

VISKANTA, R. Computation of Radiative Transfer in Combustion Systems. In: **Numerical Methods Heat Fluid Flow**. vol. 18, no.3/4, pp.415-442, 2008.

ZIMONT, V.L.; POLIFKE, W.; BETTELINI, M.; WEISENSTEIN, W.; An Efficient Computational Model for Premixed Turbulent Combustion at High Reynolds Numbers Based on a Turbulent Flame Speed Closure. **J. Engineering for Gas Turbines and Power**. Transactions of the ASME, Vol. 120, pp. 526-532, 1998.

YADIGAROGLU, G.; XIA, J.L.; LIU, Y.S.; SCHMIDLI, J.; SMITH, B.L.; Numerical and Experimental Study of Swirling Flow in a Model Combustor. **Heat Mass Transfer Journal**. Vol. 41, No. 11, pp. 1485-1497, 1998.

YEOH, G.H.; YUEN, K.K.; **Computational Fluid Dynamics in Fire Engineering**. Elsevier. 2009.

WESTBROOK, C., DRYER, F.; Simplified Reaction Mechanisms For the Oxidation of Hydrocarbon Fuels in Flames. In: **Combustion Sci. Technology**, vol. 27, pp. 31-43, 1981.

WAKABAYASHI, T.; Performance of a Dry Low Nox Gas Turbine Combustor Designed with a New Fuel Supply Concept. **Engineering for Gas Turbines and Power Journal**. ASME, Vol. 124, pp. 771-775, 2002.

## 7 ANEXOS

### 7.1 CÁLCULOS DO EXCESSO DE AR

Os cálculos aqui apresentados (Oliveira, 2009), são realizados levando em consideração que os hidrocarbonetos (HC) e o ar, no momento da combustão, apresentam o comportamento de gases ideais, sendo então possível propor a relação seguinte:

$$n_i = \frac{P V_i}{R T}$$

sendo  $n_i$  a vazão molar da espécie “i” em condições estequiométricas, e  $V_i$  a vazão volumétrica da mesma. Uma vez que no momento da reação, a mistura dos gases se encontram nas mesmas condições de temperatura e pressão, e em condições estequiométricas, obtêm-se a seguinte relação:

$$\frac{\dot{n}_{HC}}{\dot{n}_{ar}} = \frac{\dot{V}_{HC}}{\dot{V}_{ar}}$$

Ou,

$$\frac{\dot{n}_{HC}}{\dot{n}_{ar}} = \frac{Q_{HC}}{Q_{ar}^{esteq}}$$

Segundo HILSDORF (2004), o excesso de ar pode ser calculado pela seguinte equação:

$$Q_{ar} = Q_{ar}^{esteq} + E \times Q_{ar}^{esteq}$$

ou,

$$E = \frac{Q_{ar}}{Q_{ar}^{esteq}} - 1$$

Fazendo uso da equação (1.03), obtém:

$$E = \frac{\dot{n}_{HC}}{\dot{n}_{ar}} \left( \frac{Q_{ar}}{Q_{HC}} \right) - 1$$

Por sua vez, a razão equivalente ( $\phi$ ) é definida pela expressão (HILSDORF, 2004):

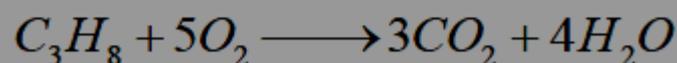
$$\phi = \frac{1}{1+E}$$

Ou,

$$\phi = \frac{\dot{n}_{ar}}{\dot{n}_{GN}} \left( \frac{Q_{GN}}{Q_{ar}} \right)$$

Em processos industriais, o oxigênio necessário para a combustão é fornecido pela injeção de ar na corrente que alimenta o queimador. O ar, por sua vez, é constituído por apenas 21% de oxigênio, e 79% de uma mistura de nitrogênio, hidrogênio, argônio e dióxido de carbono.

Então, num mecanismo reacional simplificado, a combustão do gás natural é considerada composta pelas seguintes reações:



De uma maneira geral, pode-se dizer que:



sendo que  $v_i$  corresponde ao coeficiente estequiométrico da espécie “i”, e  $C_n H_{2n+2}$  representa um determinado hidrocarboneto. Pela estequiometria da reação, para oxidar, por meio de combustão,  $v_{HC}$  moles do hidrocarboneto  $C_n H_{2n+2}$ , é necessário  $v_{O_2}$  moles de Oxigênio. Como

o ar é composto de 21% de Oxigênio, para a mesma reação é necessário  $\left(\frac{v_{O_2}}{0,21}\right)$  moles de ar. Então:

$$N_{AR}^{CH_4} = \frac{2}{0,21} = 9,524;$$

$$N_{AR}^{C_2H_6} = \frac{3,5}{0,21} = 16,667;$$

$$N_{AR}^{C_3H_8} = \frac{5}{0,21} = 23,810;$$

Segundo a tabela 4, a composição do gás natural comercializado no estado de Pernambuco é constituída de aproximadamente 89%, 7% de etano, 0,3% de propano e 3% de nitrogênio e dióxido de carbono. Sabendo a composição do combustível é possível calcular o número de moles de ar necessário para a combustão estequiométrica do Gás natural:

$$n_{AR} = 0,890 \times n_{AR}^{CH_4} + 0,080 \times n_{AR}^{C_2H_6} + 0,003 \times n_{AR}^{C_3H_8} ;$$

$$n_{AR} = 9,881 \text{ moles ;}$$

ou seja, para cada mol de gás natural a ser oxidado por processo de combustão, é necessário, em condições estequiométricas, 9,881 moles de AR, podendo ser escrita a seguinte relação:

$$n_{AR} = 9,881 n_{GN}$$

- Para o Gás Natural:

$$E = \frac{1}{9,881} \left( \frac{Q_{AR}}{Q_{GN}} \right) - 1$$

$$\phi = 9,881 \left( \frac{Q_{GN}}{Q_{AR}} \right)$$

Tabela 12: Valores da Temperatura Teórica de Chama Adiabática em função do Excesso de Ar.

E (%)	Q <sub>GN</sub> (m <sup>3</sup> /h)					φ
	1	2	3	4	5	
	Q <sub>AR</sub> (m <sup>3</sup> /h)					
-90	0,99	1,98	2,96	3,95	4,94	10,00
-80	1,98	3,95	5,93	7,90	9,88	5,00
-70	2,96	5,93	8,89	11,86	14,82	3,33
-60	3,95	7,90	11,86	15,81	19,76	2,50
-50	4,94	9,88	14,82	19,76	24,70	2,00
-3	5,93	11,86	17,79	23,71	29,64	1,67
-25	6,92	13,83	20,75	27,67	34,58	1,43
-15	7,90	15,81	23,71	31,62	39,52	1,25
-5	8,89	17,79	26,68	35,57	44,46	1,11
0	9,88	19,76	29,64	39,52	49,41	1,00
10	10,87	21,74	32,61	43,48	54,35	0,91
20	11,86	23,71	35,57	47,43	59,29	0,83
30	12,85	25,69	38,54	51,38	64,23	0,77
40	13,83	27,67	41,50	55,33	69,17	0,71
50	14,82	29,64	44,46	59,29	74,11	0,67
60	15,81	31,62	47,43	63,24	79,05	0,63
70	16,80	33,60	50,39	67,19	83,99	0,59
80	17,79	35,57	53,36	71,14	88,93	0,56
90	18,77	37,55	56,32	75,10	93,87	0,53
100	19,76	39,52	59,29	79,05	98,81	0,50

## 7.2 TEMPERATURA TEÓRICA DE CHAMA ADIABÁTICA

São apresentados valores da Temperatura Teórica de Chama Adiabática, calculados por Oliveira(2009), para diferentes combustíveis variando-se o Excesso de Ar.

Tabela 13: Valores da Temperatura Teórica de Chama Adiabática em função do Excesso de Ar (Oliveira, 2009).

Excesso de ar (%)	Hidrogênio (K)	Metano (K)	Etano (K)	Propano (K)	Gás Natural (K)
0	2493,77	2311,30	2362,03	2372,68	2308,75
5	2428,04	2243,98	2292,29	2302,24	2241,73
10	2366,04	2180,99	2227,09	2236,40	2179,01
15	2307,49	2121,92	2166,00	2174,73	2120,18
20	2252,10	2066,42	2108,65	2116,86	2064,89
25	2199,62	2014,18	2054,69	2062,43	2012,85
30	2149,84	1964,92	2003,85	2011,16	1963,76
35	2102,56	1918,39	1955,86	1962,78	1917,39
40	2057,60	1874,38	1910,48	1917,04	1873,52
45	2014,79	1832,68	1867,52	1873,75	1831,96
50	1973,99	1793,12	1826,78	1832,71	1792,52

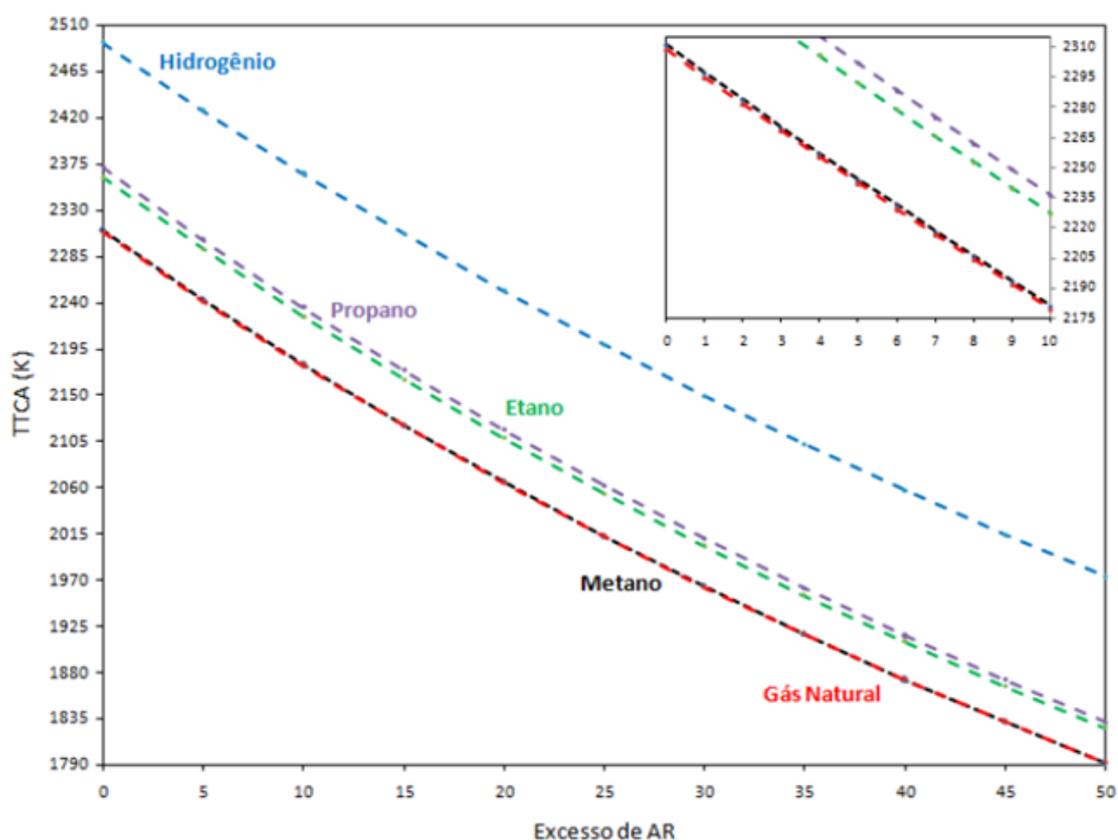


Figura 62: Gráfico Temperatura Teórica de Chama Adiabática em função do Excesso de Ar (Oliveira, 2009).