UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS

FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA

ÁREA DE CONCENTRAÇÃO DESENVOLVIMENTO DE PROCESSOS QUÍMICOS

Aplicação de Técnicas de Fluidodinâmica Computacional (CFD) em Fornos para Produção de Cimento

Autor: Cleber Sandim Ximenes Orientador: Prof. Dr. Milton Mori Co-Orientadora: Dra. Maria das Graças da Silva

Dissertação apresentada à Faculdade de Engenharia Química como parte dos requisitos exigidos para a obtenção do título de Mestre em Engenharia Química

> Campinas – São Paulo Fevereiro de 2004

A minha querida, amada e paciente esposa Juliana pelo carinho, compreensão e paciência, e que escreve minhas dedicatórias.

Esta versão corresponde à redação final da Dissertação de Mestrado em Engenharia Química defendida pelo Engenheiro Químico Cleber Sandim Ximenes, aprovada em 26 de Fevereiro de 2004 pela banca examinadora constituída pelos doutores:

Prof. Dr. Milton Mori – Orientador

FEQ - UNICAMP

Prof. Dr. Roberto Guardani

PQI - POLI - USP

Prof. Dr. Reginaldo Guirardello

FEQ - UNICAMP

Este exemplar corresponde à versão final da Dissertação de Mestrado em Engenharia Química defendida pelo Engenheiro Químico Cleber Sandim Ximenes.

Prof. Dr. Milton Mori (Orientador)

AGRADECIMENTOS

À Deus e Nossa Senhora por tudo.

Ao Professor Milton Mori pela amizade, orientação prestada e, um agradecimento especial, pela *opurtunidade oferecida de trabalhar no LMSPQ* sob sua coordenação.

À Dra. Maria das Graças Enrique Silva pela orientação prestada.

À Anna Rita Weber pela amizade, pelas conversas, apoio e serviços prestados durante o desenvolvimento da pesquisa.

À CNPq pelo auxílio financeiro prestado.

À Faculdade de Engenharia Química da UNICAMP.

Aos Professores e funcionários do DPQ/FEQ.

À Juliana por todo amor, companheirismo e paciência.

Aos meus pais Antonio e Lindalva, aos meus irmãos, Eder e Tiago, pelo incentivo, amor e carinho. Cabe destacar que sem o sacrifício e esforço do meu Pai querido e amigo, este trabalho talvez não teria sido realizado!

Aos meus avós e tios pelo apoio. Dedico em especial à meu tio Nelson G. S. J. ($Z\acute{e}$ Galinha) e à minha querida avó Joana Peralta Ximenes.

Aos pais da minha mulher, Antonio e Vania Belincanta, pelo apoio e compreensão em todos os sentidos. Também agradeço à minha cunhada Mariana (Índia Juruna) por tudo.

Aos meus grande amigos maringaenses Charope e Bolis por tudo.

Ao meu amigo Leonardo pela amizade, apoio e dicas de Latex e Linux e companheirismo na disciplina do Prof. Carrasco.

Ao amigo Fábio Kasper (*Frangão*) pela amizade, conversas e apoio, que sem o mesmo o desenvolvimento desta pesquisa seria muito mais árdua.

Aos companheiros de laboratório: Alexandre, Celso (*Piá*), Jacy, Marcos, Renato e Fábio Marine.

Ao grande amigo Márcio (*Gaúcho G...*) pela amizade e apoio.

À todos que contribuíram, direto ou indiretamente, para a realização deste trabalho meus sinceros agradecimentos!.

Sumário

1	Intr	rodução				
	1.1	Descrição do Processo	1			
	1.2	Apresentação do Trabalho	6			
2	Rev	risão Bibliográfica	9			
3	Mo	delagem Matemática	19			
	3.1	Níveis de Formulação dos Modelos	19			
	3.2	Equações de Conservação	20			
	3.3	Procedimento de Decomposição	21			
		3.3.1 Médias Temporais	23			
	3.4	Conservação da Massa	24			
	3.5	Transporte da Quantidade de Movimento	25			
	3.6	Conservação da Energia	26			

	3.7	Conservação das Espécies Químicas	29
	3.8	Generalização das Equações de Transporte para Escalares	30
	3.9	Turbulência	31
	3.10	Modelos de Turbulência	33
		3.10.1 Adequação das Equações de Transporte	36
		3.10.2 Modelo $k - \epsilon$ de Turbulência	37
		3.10.3 Modelo Tensores de Reynolds-(Reynolds Stress Model-RSM) de Tur-	
		bulência	41
	3.11	Modelo de Combustão Turbulenta	44
		3.11.1 Equacionamento Geral	44
		3.11.2 Equação de Transporte das Espécies Químicas	45
		3.11.3 Modelo de Dissipação Eddy	46
		3.11.4 Modificação da Equação da Energia	47
	3.12	Intensidade de Radiação Térmica	48
4	Mét	odos Numéricos	51
-	1.100		-
	4.1	Equações de Transporte	52
	4.2	Método dos Volumes Finitos com Base em Elementos Finitos	53
		4.2.1 Notação Geométrica	54
		4.2.2 Discretização das Equações de Transporte	59

	4.3	Termos Transientes	61
	4.4	Termos Convectivos	61
	4.5	Termos Difusivos	62
	4.6	Gradiente de Pressão	63
	4.7	Acoplamento Pressão Velocidade	63
	4.8	Compressibilidade	64
5	Téc	nicas de Fluidodinâmica em Fornos da Indústria Cimenteira	65
	5.1	Geometria e Malha Computacional	65
	5.2	Condições Iniciais e de Contorno	79
		5.2.1 Condições Iniciais	79
		5.2.2 Condições de Contorno	83
	5.3	Combustão do Gás Metano e Avaliação da P.E.Ar	84
6	Res	ultados e Discussões	89
	6.1	Estratégias de Solução	90
	6.2	Influência do Modelo de Turbulência	92
		6.2.1 Utilizando o Modelo $k - \epsilon$ de Turbulência	93
		6.2.2 Utilizando o Modelo RSM de Turbulência	110
	6.3	Influência da Carga do Combustível	123

	6.4	Influêr	ncia do Ar Radial no Formato da Chama	131
		6.4.1	Formato da Chama Utilizando o Model o $k-\epsilon$ de Turbulência $\ .\ .$	132
		6.4.2	Formato da Chama Utilizando o Modelo RSM de Turbulência	134
7	Con	nclusõe	s e Sugestões	137
	7.1	Princi	pais Conclusões	137
	7.2	Algum	as Sugestões para Trabalhos Futuros	139

RESUMO

Esta investigação científica tem por objetivo o desenvolvimento de uma metodologia computacional capaz de simular e diagnosticar os perfis de escoamento e de temperatura dos gases em regime transiente, proporcionado por um maçarico (queimador) no interior de um forno em escala industrial. Neste estudo a reação de clinquerização do cimento não foi incluída. As simulações tridimensionais desenvolvidas envolveram reações de combustão turbulenta associadas às equações de transporte: conservação da massa, conservação das espécies químicas, quantidade de movimento, transferência de energia. O campo médio turbulento foi obtido com a aplicação da média temporal (Reynolds Average) sendo que os modelos de turbulência exigidos para o fechamento do conjunto de equações foram os modelos estatísticos $k - \epsilon$ de duas equações e o modelo dos tensores de Reynolds. O combustível utilizado foi o gás metano (CH_4) considerando uma única etapa de reação, na qual o mecanismo controlador considerado foi a taxa de mistura entre os reagentes, não incluindo desta maneira, a etapa controlada pela taxa cinética. Os testes foram realizados com a intenção de investigar a influência do modelo de turbulência aplicado, da carga de combustível e da intensidade de giros no comportamento do escoamento no interior da câmara, bem como no formato da chama obtida. A resolução de todos os fenômenos acoplados foi alcançada com o auxílio do código de fluidodinâmica computacional CFX^{TM} que utiliza a técnica dos volumes finitos como método numérico. Apresentam-se resultados qualitativos na forma de vetores, mapas e isosuperfícies para as variáveis velocidade, temperatura e concentração das espécies químicas envolvidas e, quantitativos na forma de gráficos em coordenadas x - y para temperatura e concentração das espécies químicas. Os principais resultados demonstram que a metodologia empregada, baseada nas técnicas de CFD, mostra-se apta a reproduzir o comportamento fenomenológico no interior da câmara de um forno da industria cimenteira.

ABSTRACT

The objective this scientific investigation is the development of a computational methodology that is able to simulate the transient gas flow profile and temperature field produced by a burner located inside an industrial kiln. In this study the chemical reaction that produces clinker is not included. The three-dimension simulation developed included turbulent combustion reaction associated with the transport equations: mass, chemical species, momentum and energy conservation. The turbulent average field was obtained by applying the Reynolds avarage where the turbulent closure equations were $k-\epsilon$ of two equations and Reynolds stress, both statistical models. The fuel evaluated was methane gas (CH_4) which was considered as a single-step mechanisms reaction, where the rate limiting mechanism was mixture rate between the reagents (diffusion mechanisms), thus the step controlled by kinetics was not included. The tests were performed in order to investigate the influence of turbulence model, fuel load and swirl intensity on flow behavior inside the chamber, as well the characteristics of the flame. The resolution of the all coupled phenomeno was obtained with help CFX^{TM} computational fluid-dynamics code that uses finite volume technique as numerical method. Qualitative results are presented by vectors, maps and isosurface of velocity, temperature and chemical species concentration. Quantitative results are presented as x-y plots of temperature and chemical species concentration. The main results demonstrated that the methodology, based on CFD techniques, was able to reproduce the phenomenological behavior inside a kiln chamber used in the cement industry.

Lista de Tabelas

3.1	Fundamentos da Fluidodinâmica	21
3.2	Modelos de Turbulência	34
3.3	Constantes do Modelo $k - \epsilon$ Padrão	41
3.4	Termos presentes na Equação 3.55 conservativa	42
3.5	Termos da Tabela 3.4	43
3.6	Constantes da Tabela 3.5	43
3.7	Constantes da Tabela 3.5	43
5.1	Área da entrada circular das peças que formam o maçarico	74
5.2	Condições iniciais - Estudo de caso 1	80
5.3	Condições iniciais - Estudo de caso 2	81
5.4	Condições iniciais - Estudo de caso 3	82
5.5	Condições iniciais - Estudo de caso 4	82

Lista de Figuras

1.1	Esquema ilustrativo do processo de transferência de calor em um corte trans-	
	versal de um forno utilizado na produção de cimento	2
1.2	Desenho esquemático do processo para obtenção do clínquer	3
4.1	Elemento de fluxo hexaédrico com oito nós	55
4.2	Elemento de fluxo dividido em oito octantes sendo um destes removido $\ .$.	56
4.3	(a) p.i. nas faces dos octantes coincidentes com $s = 0, 5$, (b) p.i. nas faces dos octantes coincidentes com $t = 0, 5$, (c) p.i. nas faces dos octantes	
	coincidentes com $u = 0, 5 \dots \dots$	58
4.4	Definição de um volume de controle bidimensional	59
4.5	Definição dos pontos de integração para um elemento 2-D quadrilátero	60
5.1	Forno rotativo em operação	66
5.2	Geometria e malha do forno rotativo utilizada na simulação $\ldots \ldots \ldots$	68
5.3	Geometria e malha da câmara de combustão	69
5.4	Geometria e malha da capela simuladas	70

5.5	Disposição das peças que constituem o maçarico industrial utilizado nas	
	simulações	73
5.6	Malha peça 1 (Ar Axial) que forma o maçarico	74
5.7	Malha peça 2 (Ar Radial) que forma o maçarico	75
5.8	Malha peça 3 (Ar Transporte) que forma o maçarico	76
5.9	Malha peça 4 (Ar Central) que forma o maçarico	77
5.10	Malha da peca 5 - (caneta de óleo) que forma o maçarico $\hfill \ldots \ldots \ldots \ldots$	78
6.1	Vetores velocidade ao longo do forno para estudo de caso 1 utilizando o	
	modelo $k - \epsilon$ de turbulência	95
6.2	Estudo de caso 1 utilizando o model o $k-\epsilon$ de turbulência (a) Mapa da	
	velocidade axial (b) iso-superfície de velocidade igual a $-2m/s$ \ldots	96
6.3	Vetores velocidade à 2 metros do maçarico para estudo de caso 1 utilizando	
	o model o $k-\epsilon$ de turbulência	97
6.4	Vetores velocidade na saída do forno para estudo de caso 1 utilizando o	
	modelo $k - \epsilon$ de turbulência	98
6.5	Vetores velocidade próximo ao maçarico para estudo de caso 1 utilizando o	
	modelo $k - \epsilon$ de turbulência	99
6.6	Fração mássica, para estudo de caso 1 utilizando o model o $k-\epsilon$ de tur-	
	bulência: (a) do metano e (b) do oxigênio	102
6.7	Iso-superfíce da temperatura de chama para estudo de caso 1 utilizando o	
	modelo $k - \epsilon$ de turbulência	103

6.8	Intensidade de radiação da chama para estudo de caso 1 utilizando o modelo $k - \epsilon$ de turbulência	104
6.9	Estudo de caso 1 utilizando o model o $k-\epsilon$ de turbulência (a) Temperatura na parede refratária (b) contorno de temperatura no interior do forno $\ .\ .\ .$	105
6.10	Perfil de temperatura ao longo da câmara para estudo de caso 1 utilizando o modelo $k - \epsilon$	107
6.11	Perfil radial de temperatura em secções transversais na câmara de combustão para estudo de caso 1 utilizando o modelo $k-\epsilon$	108
6.12	Perfil axial de concentração das espécies ao longo da câmara de combustão para estudo de caso 1 utilizando o modelo $k - \epsilon$ de turbulência	109
6.13	Vetores velocidade ao longo do forno para estudo de caso 1 utilizando o modelo RSM de turbulência	112
6.14	Estudo de caso 1 utilizando o modelo RSM de turbulência (a) Mapa da velocidade axial (b) iso-superfície da velocidade igual a $-2m/s$	113
6.15	Vetores velocidade a 2 metros do maçarico para estudo de caso 1 utilizando o modelo RSM de turbulência	114
6.16	Vetores velocidade próximo ao maçarico para estudo de caso 1 utilizando o modelo RSM de turbulência	115
6.17	Iso-superfíce da temperatura de chama para estudo de caso 1 utilizando o modelo RSM de turbulência	117
6.18	Intensidade de radiação da chama para estudo de caso 1 utilizando modelo RSM de turbulência	118

6.19	Perfil axial de temperatura ao longo da câmara para estudo de caso 1 utilizando o modelo RSM	120
6.20	Perfil radial de temperatura em secções transversais na câmara para estudo de caso 1 utilizando o modelo RSM	121
6.21	Vetores velocidade próximo ao maçarico para estudo de caso 2 utilizando o modelo $k - \epsilon$ de turbulência	124
6.22	Iso-superfície da temperatura de chama para estudo de caso 2 utilizando o modelo $k - \epsilon$ de turbulência	125
6.23	Intensidade de radiação da chama para estudo de caso 2 utilizando o modelo $k - \epsilon$ de turbulência	126
6.24	Gráfico comparativo de temperatura axial para estudo de caso 2 e 1 utilizando o modelo $k - \epsilon$ de turbulência	128
6.25	Gráfico comparativo de temperatura em secções transversais para estudos de caso 2 e 1 utilizando o modelo $k - \epsilon$ de turbulência	129
6.26	Gráfico comparativo das frações mássicas ao longo da câmara de combustão para estudos de caso 2 e 1 utilizando o modelo $k - \epsilon$ de turbulência	130
6.27	Iso-superfíce da temperatura de chama para estudo de caso 4 utilizando o modelo $k - \epsilon$ de turbulênci	133
6.28	Iso-superfície da temperatura de chama para estudo de caso 4 utilizando o modelo RSM de turbulência	135
6.29	Vetores velocidade ao longo do forno para estudo de caso 4 utilizando o modelo RSM de turbulência	136

Nomenclatura

Letras Latinas

 $a\,$ aceleração, m/s^2

 ${\cal A}\,$ área, m^2

 $A_{ebu}\,$ constante do modelo de combustão EDM

 $B_{ebu}\,$ constante do modelo de combustão EDM

 c_{μ} constantes do modelo $k-\epsilon$ padrão.

 $c_P\,$ calor específico à pressão constante, $J.kg^{-1}.K^{-1}$

 C_A, C_B , concentração dos reagentes $A \in B, kmol/m^3$

- e energia interna, J/kg
- $E\,$ energia total, J/kg
- $E_T\,$ temperatura de ativação, K
- $f_i\,$ forças de corpo
- $f_k\,$ fração mássica do primeiro produto formado na reação k

- $F\,$ força, $kg.m/s^2=N$
- h entalpia estática, J/kg
- H entalpia total, J/kg
- $k\,$ energia cinética turbulenta, m^2/s^2
- ℓ_t comprimento de escala turbulenta
- $m\,$ massa, kg
- $\vec{n}\,$ vetor unitário normal à superfície

 ${\cal N}$ número de conjuntos na média conjuntural

- $P\,$ pressão, $Pa=N/m^2$
- Prnúmero de Prandtl
- ${\cal P}_k\,$ taxa de produção da energia cinética turbulenta, ${\cal P}a/s$
- $Q\,$ fluxo de energia transferido por condução, W/m^2
- \boldsymbol{r}_k fração massica
- R constante universal dos gases ideais, $J.kmol^{-1}.K^{-1}$
- $R_k\,$ taxa de formação/consumo da k-ésima reação, $kg.m^{-3}.s^{-1}$
- S termo fonte
- $Sc\,$ número de Schmidt
- t tempo, s
- Ttemperatura, $K={}^oC+273$

- $u\,$ componente de velocidade na direção $x,\,m/s$
- U vetor velocidade, m/s
- $v\,$ componente de velocidade na direção $y,\,m/s$
- $V_t\,$ escala turbulenta de velocidade
- Vol volume total de um volume de controle
- $w\,$ componente de velocidade na direção $z,\,m/s$
- W função de ponderação
- x vetor direção espacial e coordenada cartesiana espacial, m
- y coordenada cartesiana espacial, m
- Y fração mássica da espécie química
- $z\,$ coordenada cartesiana espacial, $m\,$

Letras Gregas

- $\epsilon\,$ taxa de dissipação da energia cinética turbulenta, m^2/s^3
- $\phi\,$ propriedade escalar genérica
- $\Phi\,$ razão de equivalência
- $\varphi\,$ flutuação de uma propriedade escalar genérica
- $\Gamma \,$ coeficiente de difusão
- $\lambda \,$ condutividade térmica, $W\!.m^{-1}.K^{-1}$

- $\delta\,$ delta de Kronecker
- μ viscosidade, $kg.m^{-1}.s^{-1}$
- $\rho\,$ massa específica, kg/m^3
- $\sigma_k, \sigma_e \,$ constantes do modelo $k-\epsilon$ padrão.
- $\tau\,$ tensor tensão viscoso

Superescritos

* indica flutuação

[–] propriedade média temporal

" flutuação da média temporal

$\vec{}$ vetor

- f relativo a formação
- \boldsymbol{n} número de espécies químicas presentes na reação
- $\phi\,$ relativo a uma propriedade escalar genérica

Subscritos

 $cin\,$ relativo a cinético

${\bf E}$ energia

ef valor efetivo

 $comb\,$ relativo ao combustível

- iíndice de direção espacial e espécie química
- j índice de direção espacial
- kíndice de reação
- o relativo ao oxidante e propriedade no passo de tempo anterior
- $p\,$ relativo ao produto
- t valor turbulento

Símbolos e Operadores

exp exponencial

lim limite

 $\min\,$ mínimo entre valores

 $\delta\,$ operador diferencial e delta de Kronecker

 $\Delta\,$ diferença de uma variável

 $\langle ... \rangle$ média

Siglas

CAD Computer Aided Design

 ${\bf CDS}\,$ Central Differencing Schemes

CFD Computational Fluid Dynamics

- ${\bf CFX}\,$ código comercial de CFD ultilizado neste trabalho
- **CNTP** Condições Normais de Temperatura e Pressão
- **EDM** Eddy Dissipation Model
- FLOW-3D antecessor do código comercial CFX
- FLUENT código comercial de CFD
- PHOENICS código comercial de CFD
- LDA Laser Doppler Anemometry
- **LDV** Laser Doppler Velocimetry
- **LES** Large Eddy Simulation
- **MVF** Método dos Volumes Finitos
- P-V diagrama Pressão-Volume
- ${\bf PM}$ Peso Molecular
- **RANS** Reynolds Average Navier-Stokes Equations
- **SIMPLEC** Semi IMPlicit Linked Equations Consistent
- $\mathbf{T}\text{-}\mathbf{V}$ diagrama Temperatura-Volume
- **TDMA** Tri-Diagonal Matrix Algorithm
- P.E.Ar porcentagem de excesso de ar

Capítulo 1

Introdução

1.1 Descrição do Processo

Os fornos rotativos são equipamentos fundamentais nas indústrias de cimento para a produção de clínquer. De acordo com BUI et al., (1982) o processo para obtenção do clínquer envolve reações químicas, como a calcinação do carbonato de cálcio $CaCO_3$ que ocorre a altas temperaturas, cerca de 2000K. Conseqüentemente, os fornos rotativos constituem um dos equipamentos que mais consomem energia em todo o processo de produção de cimento. Os mecanismos de troca de calor no interior do forno são basicamente a transferência de calor radiativa e convectiva entre os gases de combustão, o material sólido e a parede do forno e a condução entre o material sólido e a porção encoberta pelo mesmo. Na parte externa do forno ocorrem trocas de calor radiativa e convectiva entre a parede e o meio ambiente. A radiação é o mecanismo de transferência de calor dominante no sistema devido às elevadas temperaturas atingidas pelos gases de combustão. Na Figura 1.1 encontra-se um esquema ilustrativo dos fenômenos de transferência de calor descritos. O esquema apresenta na parte central, em coloração vermelho/laranja, a chama gerada pela combustão no interior do forno. O grãos na parte inferior, no interior do cilindro, representam o clinquer. A parede do equipamento é composta por três camadas, na qual a parede refratária é representada pela camada central e as demais paredes representam as chapas de revestimento que diminuem os desgastes na parede refratária.



Figura 1.1: Esquema ilustrativo do processo de transferência de calor em um corte transversal de um forno utilizado na produção de cimento.

O processo de produção do clínquer tem início nos ciclones pré-aquecedores. Nestes, a matéria-prima é introduzida com a finalidade de elevar a sua temperatura até a temperatura de calcinação. Neste ponto, o material sólido é conduzido ao calcinador, onde ocorre uma grande parte do processo de calcinação. O calor necessário para que a matéria-prima atinja a temperatura de calcinação advém principalmente dos gases quentes que saem da câmara de combustão, também denominado de ar terciário. Após a etapa de pré-calcinação, o material é então introduzido no forno a uma temperatura de aproximadamente 1000K. Já no interior do forno, o material entra em contato, em contra-corrente, com os gases de combustão e tem-se, assim, o início do processo padrão de queima. No maçarico, o ar primário, ou ar de transporte, é utilizado comumente na injeção do combustível no interior do forno e também atua como um indutor de giros ao escoamento através da injeção de ar radial. Por fim, o clínquer formado no processo deixa o forno e segue para os resfriadores. Uma parcela dos gases de combustão que saem dos resfriadores de clínquer retorna para o interior do forno novamente como ar secundário, com temperatura de operação próxima de 1100K. Na Figura 1.2 encontra-se ilustrado o desenho esquemático do supramencionado processo.



Figura 1.2: Desenho esquemático do processo para obtenção do clínquer

A literatura sobre fornos era ainda bastante escassa até algumas décadas atrás, talvez devido à dificuldade de coleta de medidas experimentais em virtude das elevadas temperaturas do processo; ou também à dificuldade de uma classificação e padronização dos fornos em modelos distintos, talvez devido à grande variedade de projetos. Por outro lado, a utilização de medidas intrusivas como os de Pitot, além de inviáveis na maioria dos casos são questionáveis numa análise rigorosa, pois deixam margens a erros provocados pela interferência da própria presença física destes sensores. Isto em regiões de severos gradientes poderia inviabilizar qualquer leitura. Geralmente a velocidade de entrada dos reagentes no maçarico é muito elevada, chegando a aproximar-se da velocidade sônica. Em seguida ocorre uma súbta expansão dos gases na câmara, o que gera um escoamento complexo e de difícil aferição. Tudo isto ocorrendo a temperaturas extremamente elevadas, geralmente acima do ponto de fusão dos metais em geral. Desta forma, dados fluidodinâmicos coletados nestas regiões são escassos para um forno em funcionamento, e os mais comumentes encontrados são os de temperatura, feitas externamente às paredes da câmara de combustão.

Os fornos constituem-se basicamente de duas partes principais: o maçarico e a câmara de combustão. A freqüente simplicidade da câmara de combustão contrasta com a complexidade funcional e variedade dos tipos de maçaricos a ela acoplados. Ignição, tempo de residência, erosão do refratário, emissão de gases poluentes, estabilidade da chama, são questões associadas à sua operação. O maçarico é o elemento essencial na avaliação funcional dos fornos, determinando a distribuição e pré-mistura entre o combustível e o ar de combustão; e também estabelecendo as principais características aerodinâmicas através do direcionamento e estruturação do jato de chama. Os reagentes pressurizados em seu interior são lançados a altas velocidades no interior da câmara, entrando em combustão.

Um maçarico pode apresentar diferentes configurações geométricas dependendo do tipo de combustível a ser utilizado no processo de combustão. Estas diferentes configurações são responsáveis pelas características apresentadas no escoamento dos gases de combustão, assim como pelo controle do formato e temperatura de chama. Isto evidência que o conhecimento do processo de combustão apresenta-se como um fator essencial nos projetos dos fornos industriais, a partir do qual torna-se possível alcançar uma melhor eficiência do processo global.

Dentre os vários tipos de maçaricos¹, uma classe distinta é o objeto de estudo deste trabalho, ou seja, aqueles que geram fluxos em vórtice. Chamas em vórtice são bastante difundidas em fornos onde o sistema requer um alto nível de turbulência e uma intensa capacidade de mistura. Desta forma, o componente angular da velocidade provoca um escoamento em vórtice. Em consequência, gradientes adversos de pressão são produzidos e, quando a velocidade de giro é suficientemente elevada, surge uma região de reversão de fluxo no espaço central da câmara. Além disso, a reação de combustão intensifica a complexidade do escoamento turbulento assim como dos seus principais fenômenos. Neste caso de jato de chama confinado em uma câmara, onde não há fluido ambiente disponível devido ao isolamento imposto pelas paredes, surgem como consequência diversas circulações dos gases nas proximidades das paredes. Estas circulações tornam-se importantes na estabilidade e na extensão das chamas.

Este trabalho tem por objetivo o estudo numérico fluidodinâmico de um forno rotativo para produção de cimento, aquecido por jato de chama gerado por um maçarico industrial. O trabalho apresenta simulações para os fenômenos encontrados em um forno, de escala industrial, utilizado na produção de cimento. Diferentes condições iniciais foram testadas ao longo da pesquisa, com o intuito de analisar o comportamento fluidodinâmico no interior da câmara de combustão. A primeira etapa realizada durante esta pesquisa foi a construção das malhas numéricas através da técnica dos multiblocos utilizando o código ICEMTM. O passo seguinte constituiu na modelagem e simulação computacional da malha utilizando o código CFXTM - versões 5.5.1 e 5.6.

¹Também conhecidos como queimadores

1.2 Apresentação do Trabalho

A apresentação do trabalho desenvolvido durante esta Tese esta dividida em seis capítulos que se encontram distribuídos da seguinte forma:

Capítulo 1. Introdução - Neste capítulo, encontra-se uma breve descrição sobre forno da indústria cimenteira, objeto das simulações numéricas a ser tratado no transcorrer do trabalho.

Capítulo 2. Revisão Bibliográfica - Através desta capítulo são discutidos os trabalhos publicados de maior relevância na linha de pesquisa que foram utilizados como material base durante a realização desta pesquisa científica.

Capítulo 3. Modelagem Matemática - Neste capítulo é apresentada uma breve revisão sobre a modelagem matemática pertinente a este trabalho. São apresentadas as equações que governam o fenômeno e o método dos volumes finitos.

Capítulo 4. Métodos Numéricos - É apresentado neste capítulo uma suscinta revisão sobre os métodos dos volumes finitos empregado pelo código computacional.

Capítulo 5. Técnicas de Fluidodinâmica em Fornos da Indústria Cimenteira - Neste capítulo são expostos o forno em sua forma geral bem como as configurações individuais das várias peças que formam o maçarico. Ainda neste mesmo capítulo, são apresentadas as condições iniciais que atuaram como estudos de caso, as condições de contorno aplicadas e um cálculo relativo ao excesso de ar presente no processo.
Capítulo 6. Resultados e Discussões - Apresentam-se os resultados obtidos com as simulações numéricas do escoamento reativo dentro do forno, subdividindo a apresentação em quatro tópicos.

Capítulo 7. Conclusões e Sugestões - Neste capítulo são apresentadas as conclusões e considerações finais desta pesquisa científica, apontando todas as particularidades relevantes para uma possível continuação deste trabalho em etapas futuras.

Capítulo 2

Revisão Bibliográfica

O termo *combustão* é designado, segundo LIXING, (1993), como uma reação química (reação de oxidação) acompanhada por liberação de calor e emisão de um feixe de luz. Estas reações, em primeiro lugar, são consideradas como a oxidação de combustíveis sólidos (não-metais ou metais), combustíveis líquidos ou gasosos, porém reações de dissociação como as de cloração, fluoração e nitração, podem também ser consideradas como reações de combustão, se elas tiverem alto efeito térmico.

Em fornos para produção de cimento, a obtenção de calor se dá através da combustão obtida por meio de um maçarico que é responsável pela injeção do combustível e do oxidante para o interior do forno e pela promoção de uma mistura entre estes reagentes. O fenômeno de combustão é o resultado das interações complexas de processos fisícoquímicos, na qual o seu estudo envolve numerosas disciplinas tais como termodinâmica, cinética química, fluido dinâmica, etc. Com isto, uma vasta quantidade de material sobre o assunto *combustão* pode ser encontrada, desde o regime laminar até a combustão turbulenta provida de intensos movimentos giratórios (*swirl*). Diante de tal complexidade e amplitude de materiais disponíveis que podem ser consultados que envolvem combustão, é apresentado a seguir uma revisão bibliográfica suscinta, procurando estabelecer uma visão global dos estudos que foram e que vem sendo realizados sobre combustão e CFD em fornos.

Segundo BEÉR e CHIGIER, (1974), a súbita expansão dos gases ao saírem do maçarico cria regiões de fluxo reverso nos cantos da parede da câmara de combustão próximas ao maçarico. A dimensão destas regiões é determinada pela taxa de expansão dos gases ao saírem do maçarico. Estas zonas, caracterizadas por baixa pressão, influenciam no desenvolvimento dos jatos centrais através de uma mudança na direção dos mesmos para estas zonas, criando desta maneira pontos de estagnação. Uma alternativa para diminuir este comportamento pode ser alcançado através da indução de giros no escoamento. A introdução de um comportamento giratório (*"swirl"*) no escoamento, atua como um amenizador na formação de zonas recirculantes próximas às paredes da câmara e pode criar, ao mesmo tempo, uma zona de recirculação na linha central do escoamento, na qual magnitude destas regiões recirculantes centrais é determinada pela razão entre quantidade de movimento tangencial e axial.

A introdução de giros no escoamento e conseqüente criação de recirculação ao longo das linhas centrais do escoamento, causam a recirculação dos gases quentes e desta maneira aumentando a temperatura dos reagentes o que contribui para uma maior estabilização de chama. Em geral, uma câmara de combustão apresenta uma chama estável com máxima eficiência de combustão, e mínima geração de poluentes. O escoamento principal e os campos de turbulência têm uma maior influência na estrutura da chama, e a formação de poluentes é fortemente dependente da temperatura.

A estabilização de uma chama, segundo KHALIL, (1981), é governada por muitos fatores, tais como a dimensão da câmara e do queimador, a velocidade das correntes do ar e do combustível, níveis de turbulência e tipo de combustível queimado. Uma maneira de melhorar a estabilização da chama, como mencionado anteriormente, é através da indução de um escoamento giratório que pode ser concebido através de um semi obstáculo transversal atribuído na saída do maçarico ou através de induções na corrente de ar. O primeiro método de estabilização de chama é mais utilizado em chamas pré-misturadas, onde os reagentes pré-misturados escoam através de dutos anulares do maçarico em direção à câmara de combustão. Neste tipo de arranjo, a etapa controlada pela reação química, geralmente, tem uma forte influência na taxa de reação e nas propriedades da chama resultante e, portanto, um mecanismo cinético é imprescindível no momento da modelagem matemática. O segundo método, em que um movimento giratório é introduzido nas correntes de ar e/ou combustível antes de entrarem na câmara, é mais empregado em chamas difusivas, na qual as correntes separadas de ar e combustível são injetadas através do maçarico para o interior da câmara de combustão e a chama originada é controlada principalmente pela taxa de mistura entre os reagentes. A indução de giros, estabelecidos na corrente de ar, causam a recirculação dos gases aquecidos¹ que entram em contato com a nova corrente de ar fria que esta entrando, prevenindo desta maneira uma possível extinção da chama.

BEÉR e CHIGIER, (1974) descreve sucintamente os métodos para indução de giros ao escoamento. Segundo os autores os métodos que induzem rotação a uma corrente de fluido podem ser divididos em três categorias principais:

§Uma entrada tangencial da corrente do fluído ou parte do mesmo no interior de um duto cilíndrico;

§A utilização de pás guias ², dotadas de um determinado grau de inclinação, no interior dos dutos por onde é injetada as correntes do fluído ;

 $^{^1\}mathrm{Aquecidos}$ com o calor proviniente da reação de combustão

²Nesta Dissertação é empregado este segundo método, ou seja, chamas difusivas turbulentas dotadas de um movimento giratório induzido por uma saída tangencial localizada na Peça 2 (Ver Figura 5.7 que será apresentada em detalhes na Seção 5.1 do Capítulo 5).

§Emprego de um dispositivo mecânico móvel que impõe um movimento ao fluído quando o mesmo escoa pelo interior do dispositivo.

O primeiro resultado publicado sobre a interação combustão e o tipo de escomento (turbulento ou laminar) foi realizado por DAMKOHLER, (1939) em um estudo experimental com misturas ar/propano, onde seu propósito era verificar a influência da turbulência na propagação da chama. Para tal, o autor analisou a taxa de queima em função do número de Reynolds, onde constatou que a velocidade de queima para um regime laminar permaneceu constante em função do número de Reynolds, enquanto que para o regime turbulento a velocidade de queima aumenta com o incremento no número de Reynolds.

A intensificação da taxa de reação de combustão é altamente necessária em fornos para produção de cimento, pois a reação de clinquerização consome muita energia térmica durante seu processo de fabricação. A maioria das reações envolvidas na clinquerização são endotérmicas. No trabalho de modelagem unidimensional de SPANG III, (1972), encontra-se uma descrição detalhada das reações de formação do clínquer. Neste trabalho o autor divide o forno em três zonas reacionais principais para a formação do clínquer: a região de pré-aquecimento, a zona de calcinação e a zona de queima. Na zona de préaquecimento, o material sólido é aquecido até alcançar a temperatura adequada para o início das reações. Posteriormente, o material passa pela zona de calcinação, onde ocorrem as reações de conversão do $CaCO_3$ em CaO. Por fim, tem-se na última zona a formação do clínquer, sendo esta região designada como zona de clinquerização.

No trabalho de RUHLAND, (1973), o autor analisou experimentalmente o comprimento da chama em um forno de larga escala. Em seguida o autor propôs uma equação matemática para o comprimento da chama para um forno rotativo em função das dimensões do queimador (ar primário) e do forno. MOLES et al., (1973) verificou através de vários dados experimentais de diversos fornos em escala industrial, que o ar secundário tem uma forte influência no formato da chama. Neste mesmo trabalho, o autor testou o modelo criado por RUHLAND, (1973), para predição do comprimento de chama, onde concluiu que o modelo poderia induzir a grandes erros na predição do comprimento da chama. Com isto o autor concluiu que o formato de chama além de depender do projeto do maçarico e do forno, também depende das características do ar secundário, seja da sua vazão ou até mesmo da configuração geométrica da capela³.

No modelo matemático para um reator tubular criado por GOROG et al., (1983), os perfis axiais de temperatura ao longo do forno bem como na parede do mesmo são preditos. O autor também verificou que um aumento na temperatura do ar secundário promoveu um aumento no comprimento da chama, enquanto que um aumento na vazão do ar primário diminui o comprimento da chama. Neste trabalho o autor também constatou que a principal forma de transferência de calor é por radiação encontrada principalmente na zona da chama.

Os trabalhos citados, quando não de caráter experimental, contaram com a utilização de modelos matemáticos próprios, ou seja, modelagem para casos específicos. No entanto, desde a última década, códigos de fluido dinâmica computacional vem sendo bastante empregados na simulação dos fenômenos ocorridos no interior de diversos fornos, inclusive os da indústria cimenteira. Estes códigos acoplam modelos para resolução de campos de escoamentos e transferência de calor juntamente com modelagens cinéticas tanto para a produção do clínquer como para a reação de combustão para geração de

³Capela é a uma parte do forno onde se encontram as peças que formam o maçarico responsável pela admissão do ar primário. Também é na capela que se encontra o acesso para o ar secundário. Maiores detalhes encontram-se no esquema da Figura 1.2

calor. Dentre estes, pode-se citar os estudos de MASTORAKOS et al., (1999). Neste trabalho, o autor utiliza código de fluido dinâmica computacional (CFD) para resolver modelos bidimensionais permanentes para o escoamento dos gases provenientes da combustão no interior dos fornos rotativos. Foi empregado, inclusive, um modelo unidimensional para transferência de calor no material sólido (clínquer).

Os trabalhos citados, nos quais utilizam-se de códigos de CFD, são referentes ao processo como um todo, ou seja, na maioria já esta incluído o material clínquer. Ainda há aqueles que investigaram especificamente o processo de transferência de calor ao longo do equipamento. Tais citações foram realizadas com o intuito de fazer com que o leitor se interasse do que esta sendo desenvolvido em materia de fornos envolvendo todos os complexos fenômenos que ocorrem dentro do equipamento. No entanto, o principal objetivo deste trabalho não é analisar a formação do clínquer, más sim uma etapa anterior a esta, que consiste em investigar a influencia de um escoamento giratório na chama produzida por um maçarico em um forno industrial e, a conseqüente transferência de calor. Para tal propósito serão apresentados alguns trabalhos que vêm sendo realizados com este objetivo, inclusive os realizados no laboratório LMSPQ (Laboratório de Modelagem e Simulação de Processos Químicos), no qual estudos sobre emprego de modelos de turbulência e combustão são analisados. Na maior parte da literatura existente, os efeitos da turbulencia tem sido examinado em detalhes principalmente para escoamentos frios⁴. Na maioria dos casos com combustão, o modelo padrão de turbulência $k - \epsilon$ de LAUNDER e SPALDING, (1974) tem sido amplamente empregado, onde na maioria dos casos a transferência de calor é omitida.

No trabalho de EASTWICK et al., (1999) foram comparados dois códigos de fluido dinâmica computacional na modelagem da combustão turbulenta de carvão pulverizado e estes comparados a dados experimentais. Os códigos empregados pelo autor foram o

 $^{^{4}}$ Sem combustão

 $FLUENT^{TM}$ e o $FLOW3D^{TM}$ (antiga versão do atual CFX^{TM}). As malhas utilizadas em ambos os códigos foram bidimensionais axissimétricas com aproximadamente 15.000 volumes de controle. O modelo de turbulência empregado foi o $k - \epsilon$ padrão em ambos os códigos. Porém, os modelos aplicados para a desvolatização do carvão e posterior combustão dos gases foram distintos, assim como o modelo de radiação térmica e os esquemas de interpolações numéricos para os termos convectivos das equações discretizadas. Os resultados simulados obtidos com o $FLUENT^{TM}$ apresentaram uma melhor concordância com os dados experimentais. As discrepâncias observadas na utilização do $FLOW3D^{TM}$ foram atribuídas às falhas existentes nos modelos empregados por tal código.

FUDIHARA et al., (1996) e FUDIHARA, (2000) estudaram os fenômenos de transferência de calor e de escoamento reverso em fornos aquecidos por jatos de escoamento em vórtice produzidos por um maçarico relativamente simples. As entradas para o ar foram do tipo concêntricas, sendo que uma das entradas foi na forma tangencial. O combustível também foi injetado axialmente por um duto concêntrico cilíndrico, porém separado da corrente de ar. Os estudos foram realizados utilizando o código computacional CFX^{TM} , versão 4.2, onde o combustível utilizado foi o metano. Os autores empregaram modelos bi e tridimensionais para os gases de combustão e utilizaram os modelos baseados na viscosidade dissipativa $k - \epsilon$ padrão e o $RNG \ k - \epsilon$ de duas equações para turbulência.

LIAKOS et al., (2000) realizaram um trabalho utilizando o código de fluido dinâmica computacional *PHOENICS*TM na modelagem de uma chama difusiva turbulenta de gás natural na qual foram comparados os resultados para três dimensões de malhas bidimensionais simulados, com dados experimentais obtidos para uma câmara em escala laboratorial. O modelo desenvolvido levou em conta as características turbulentas do escoamento, a taxa de reação controlada pela mistura e pelo mecanismo cinético e transferência de calor por convecção e radiação. Modelo de duas equações ($k - \epsilon$ padrão e o RNG $k - \epsilon$) e de transporte triplo (RSM-Reynolds Stress Model) para modelar a turbulência foram empregados com três diferentes tamanhos de malha. Foi observado que para se obter bons resultados com o $k - \epsilon$ padrão foi necessário uma malha cuidadosamente refinada, enquanto que com o modelo RSM foram captados as características turbulentas mesmo com a menor da malhas. As predições da combustão demonstraram que há uma forte interação entre turbulência e os mecanismos de combustão (cinético químico ou mistura). A escolha do modelo de turbulência teve um significativo efeito na precisão dos resultados preditos de temperatura e velocidade ao longo da câmara de combustão. Os modelos de duas equações não levam em conta as características anisotrópicas do escoamento e conseqüentemente não puderam reproduzir adequadamente os pequenos comprimentos de escala turbulenta. Tal deficiência levou a uma superestimação dos efeitos de mistura sobre a taxa de reação e dos valores máximos de temperatura.

Diante da importância das zonas de recirculação na estabilidade das chamas, HUB-NER et al., (2003) realizou estudos experimentais envolvendo um queimador em escala laboratorial com e sem indução de giros em um escoamento frio. Os testes foram realizados com gás natural, onde medidas das componentes de velocidade e tensores de Reynolds foram obtidas através do LDA (*Laser Doppler Anemometry*). Os experimentos foram levados na faixa de zero (sem giros) até 5000*rpm* no duto que dá acesso ao combustível. Os resultados comprovaram que o aumento nos giros provoca aparecimento de zonas de recirculação no centro dos jatos que se intensificam à medida que se aumenta a intensidade dos giros ("*swirl*").

JAZBEC et al., (2000) utilizando-se do código de fluido dinâmica computacional CFX^{TM} , versão 4.2, determinou a localização da região de ignição em um reator turbular de um mistura ar/metano, onde a concentração do metano utilizada foi baixa (1% em volume de metano). O trabalho utilizou um modelo que acoplava as equações hidrodinâmicas

a um mecanismo cinético envolvendo 16 espécies e 28 reações. Os resultados obtidos com o modelo simplificado, implementado no código CFX^{TM} , foram comparados a um detalhado mecanismo cinético presente no pacote $CHEMKINII^{TM}$ sendo que os resultados obtidos com o uso do CFD foram satisfatórios, comprovando desta maneira que um acoplamento entre mecanismos cinéticos e soluções de campo de escoamento é uma ferramenta poderosa para sistemas complexos.

No trabalho desenvolvido por SILVA et al., (2003), foi realizado um estudo numérico tridimensional transiente, em regime turbulento e com transferência de calor por convecção, condução e radiação acoplados. Para tal, foi utilizado o código $ICEM^{TM}$ para construção de uma malha não-estruturada e o código CFX^{TM} , versão 5.5.1, para as simulações numéricas. O forno utilizado nas simulações foi de escala industrial, porém com um maçarico dotado de entradas concêntricas sem indução de giros ao escoamento. As simulações foram realizadas com o gás metano, com dois passos de reação, onde foi utilizado o modelo *Eddy Break Up* como modelo de combustão. Para turbulência foi empregado o modelo padrão $k - \epsilon$. Os resultados foram auferidos com dados de uma empresa onde foi constatada boa concordância entre os resultados simulados e os experimentais.

FUDIHARA et al., (2002) investigaram por meio de simulações numéricas a influência da intensidade de giros ao escoamento produzidos por um maçarico de blocos móveis. As simulações foram realizadas empregando o código CFX^{TM} , versão 4. Para tais simulações, um escoamento sem combustão foi investigado utilizando dois modelos de turbulência de duas equações: $k - \epsilon$ padrão e o $RNG \ k - \epsilon$. Os autores verificaram que o número de giros obtidos via simulação foi menor que o calculado via correlação analítica apresentada por BEÉR e CHIGIER, (1974). Os autores verificaram que para tal projeto de queimador, o número de rotação decaiu ao longo do duto anular. Também verificaram a presença de um região de fluxo reverso central na câmara com o uso do modelo RNG. Com a utilização do modelo $k - \epsilon$ os autores constataram que a circulação foi inexpressiva.

O trabalho desenvolvido nessa Dissertação trata-se de combustão turbulenta sendo que o modelo de combustão adotado foi o "*Eddy Break-Up*", desenvolvido originalmente por SPALDING, (1971), que baseia-se nas propriedades locais do escoamento. Maiores informações relacionadas a este modelo de combustão podem ser encontradas em BRINK et al., (2000). Neste trabalho os autores discutem basicamente as vantagens e limitações do modelo de combustão "*Eddy Break-Up*". Além de explicar sua origem e versatilidade para os mais diversos problemas, os autores avaliam alguns aspectos de sua aplicação, como efeitos de temperatura flutuante na taxa de reação, de como o modelo se comporta com a implementação da cinética química, metodologia para cálculos de chama e mecanismos de reação. Os autores ainda apresentam e comentam alguns exemplos de aplicação e sugerem dicas de implementação e controle de parâmetros para este modelo de combustão.

Capítulo 3

Modelagem Matemática

Neste capítulo o leitor poderá se inteirar dos modelos matemáticos utilizados nas simulações durante o trabalho. O capítulo apresenta as equações fundamentais da fluido dinâmica no formato como elas são tratadas no pacote computacional CFX^{TM} . Portanto, apresenta todas as equações fundamentais de transporte: massa, energia e movimento (*momentum*). Também são apresentadas as equações extras para obter o fechamento do modelo proposto, tais como as equações de turbulência e das espécies químicas envolvidas. O leitor também encontrará o modelo de combustão adotado bem como o de radiação térmica envolvido no processo de transferência de calor.

3.1 Níveis de Formulação dos Modelos

A resolução de qualquer problema físico requer a habilidade da criação do modelo matemático correspondente. O modelo matemático deve ser tal que possa ser resolvido com tempos de computação não-proibitivos e que os resultados obtidos representem o fenômeno físico em questão. Obviamente, atingir este objetivo não é tarefa fácil! Para obtenção do sistema de equações de massa, movimento (momentun), energia e conservação de escalares, a decisão importante a ser tomada é com relação ao nível na qual os balanços de conservação são realizados. Citando os extremos, os balanços de conservação podem ser feitos tanto em nível molecular (grandeza de nm $(10^{-9}m)$ e pm $(10^{-12}m)$, originando uma equação para cada molécula, como sobre o volumes de controle (ordem de grandeza de μ m $(10^{-6}m)$), que podem até, em determinadas direções, coincidir com o domínio de solução. Nesses extremos, varia muito a complexidade dos métodos numéricos adequados para cada situação. Obviamente, a solução das equações dentro do nível molecular é impraticável. Atualmente os modelos que resolvem os problemas de transferência de calor e massa em fluidos de interesse da engenharia estão em ordem de tempo e espaço da seguinte maneira:

- o tempo médio sobre os quais os balanços de conservação são realizados, \mathbf{t} , é muito maior que a escala de tempo para turbulência, t_t , ou seja, $\mathbf{t} >> t_t$;
- o comprimento médio sobre os quais os balanços de conservação são realizados, L, também é muito maior que a escala de comprimento para turbulência, L_t, ou seja, L>>L_t

3.2 Equações de Conservação

A descrição de um fluido em movimento obedece à três leis físicas que são fundamentais e que regem a fluidodinamica, conforme exposto pela Tabela 3.1.

Estas três leis básicas fundamentais, de forma análoga, podem ser trabalhadas através de balanços em volumes de controle infinitesimais, de forma a obter a respectiva equação de transporte para cada príncipio físico. Tais equações, depois de obtidas, podem ser utilizadas tanto em regime laminar quanto em regime turbulento. Entretanto

Leis Básicas	Equações Fundamentais		
Lei da Conservação da Massa	Equação da Continuidade		
Segunda Lei de Newton	Equação de Movimento		
Primeira Lei da Termodinâmica	Equação da Energia		

Tabala 2.1. Fundamentos da Fluidadinâmica

sabe-se que, para propósitos de cálculos na engenharia, resolver estas equações na forma em que são apresentadas é próximo do impraticável pelo simples fato da tecnologia atual não resolvê-las com precisão e tempo computacional satisfatórios. Assim, geralmente é introduzido o conceito de decomposição em propriedades médias, sendo mais comum o procedimento convencional de médias temporais (Reynolds Average).

Nas seções seguintes, as equações de conservação média da massa, movimento, energia e espécies químicas são derivadas. Primeiramente serão visualizadas as equações para as quantidades instantâneas, passando em seguida para as equações médias pelo método da média temporal (*Reynolds Average*).

3.3 Procedimento de Decomposição

Conforme comentado anteriormente, a necessidade de introdução do cálculo das propriedades médias foi primeiramente discutida por CEBECI e SMITH, (1974), os quais destacam o procedimento convencional das médias temporais, que também é conhecido como método da decomposição de Reynolds (Reynolds Average), e o procedimento das médias mássicas ponderadas (*Favre Average*).

Para uma grandeza qualquer ϕ (vetor velocidade U_i , pressão P, massa específica ρ) a decomposição entre uma parcela conhecida (média) e uma parcela flutuante, pode ser escrita como:

$$\underbrace{\phi(x_i,t)}_{\text{Valor Instantâneo}} = \underbrace{\langle \phi(x_i,t) \rangle}_{\text{Parcela Conhecida}} + \underbrace{\varphi(x_i,t)^*}_{\text{Parcela Flutuante}} \quad \text{com } \langle \varphi^* \rangle = 0 \quad (3.1)$$

onde t é o tempo e x_i é a direção espacial. A parcela conhecida da Equação 3.1 pode ser obtida utilizando um procedimento da média conjuntural da forma:

$$\langle \phi(x_i, t) \rangle = \lim_{N \to \infty} \frac{1}{N} \sum_{N=1}^{N} W \phi(x_i, t)_N$$
(3.2)

em que N é o número de conjuntos e W denota uma função de ponderação. Em casos específicos, como escoamentos em regime permanente, o termo $\langle \phi(x_i, t) \rangle$ também pode ser obtido utilizando um procedimento da média temporal:

$$\langle \phi(x_i, t) \rangle = \lim_{\Delta t \to \infty} \frac{1}{\Delta t} \int_0^{\Delta t} W \phi(x_i, t) dt$$
 (3.3)

Nas seções deste documento nenhuma distinção será feita entre a média temporal (Equação 3.3) e a conjuntural (Equação 3.2), já que a distinção não tem nenhuma influência na forma resultante das equações de conservação. Para se obter as equações médias, o procedimento mais comum é substituir as parcelas conhecidas e flutuantes por um valor instantâneo nas equações de fluxo e calcular a média destas equações resultantes. Uma vez calculada a média dos termos não-lineares destas equações, novos termos surgem, que nada mais são além de correlações entre os diferentes valores das grandezas flutuantes.

3.3.1 Médias Temporais

Atribuindo um fator de ponderação nas Equações 3.2 e 3.3 como sendo um valor unitário:

$$W = 1 \tag{3.4}$$

resulta no procedimento convencional do cálculo das médias temporais. Para este caso, a equação 3.1 é escrita como:

$$\phi = \overline{\phi} + \varphi'' \quad \operatorname{com} \overline{\varphi''} = 0 \tag{3.5}$$

Utilizando as seguintes nomenclaturas, correspondentes à Equação 3.1:

$$\phi \approx \langle ... \rangle$$
 (Valor conhecido no cálculo das médias temporais)
 $\varphi'' \approx \varphi^*$ (Valor flutuante no cálculo da médias temporais)

Considerando duas grandezas quaisquer, A e B, as seguintes regras podem ser aplicadas:

$$\overline{A} = \overline{A} \tag{3.6}$$

$$\overline{A+B} = \overline{A} + \overline{B} \tag{3.7}$$

$$\overline{A}b'' = 0 \tag{3.8}$$

$$\overline{Ab''} = \overline{(\overline{A} + a'')b''} = \overline{\overline{A}b''} + \overline{a''b''} = \overline{a''b''}$$
(3.9)

$$\overline{AB} = \overline{(\overline{A} + a'')(\overline{B} + b'')} = \overline{A}\,\overline{B} + \overline{a''b''} \tag{3.10}$$

$$\frac{\overline{\partial^n A}}{\partial x^n} = \frac{\partial^n \overline{A}}{\partial x^n} \tag{3.11}$$

Nas seções seguintes, estas regras podem ser aplicadas na derivação e simplificação das equações de conservação. Como pode ser visualizado na Equação 3.7, a média da soma das duas grandezas equivalem-se a soma de cada uma de suas médias $\overline{A} \in \overline{B}$. Além disto, a média da n-ésima derivada resulta na derivada n-ésima da média da própria quantidade conforme pode ser verificado pela Equação 3.11. Somente as combinações não-lineares nas Equações 3.9 e 3.10 resultam em novas e desconhecidas correlações entre as parcelas flutuantes.

3.4 Conservação da Massa

A equação que representa a conservação da massa, também conhecida como equação da continuidade, pode ser obtida analizando a taxa mássica de escoamento que entra e sai de um elemento infinitesimal de volume:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho U_j) = 0 \tag{3.12}$$

Nesta equação, U_j representa o vetor velocidade do escoamento, t é o tempo e ρ é a massa específica. Considerando um volume de controle infinitesimal, o acréscimo ou decréscimo temporal da massa específica neste volume é controlado pelo transporte convectivo de massa sobre as fronteiras deste volume de controle.

De forma a obter a formulação média da Equação 3.12 da continuidade, deriva-se a

mesma introduzindo o conceito de médias temporais, resultando na seguinte relação:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho \overline{U_j} \right) = 0 \tag{3.13}$$

3.5 Transporte da Quantidade de Movimento

A equação de transporte da quantidade de movimento ρU_i , pode ser formulada como segue:

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\rho U_{i}\right) + \frac{\partial}{\partial x_{j}}\left(\rho U_{i}U_{j}\right) = -\frac{\partial P}{\partial x_{i}} - \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_{j}} + \rho f_{i}$$

$$(3.14)$$

Os três termos do lado direito da Equação 3.14 representam os x_i componentes das forças devido a pressão P, o tensor viscoso τ_{ij} , e as forças de campo f_i , respectivamente. Na derivação das equações médias, as forças de campo serão negligenciadas. Assim para um fluido newtoniano hipotético, o tensor tensão é dado por:

$$\tau_{ij} = -\mu_b \delta_{ij} \frac{\partial U_l}{\partial x_l} - \mu \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right)$$
(3.15)

em que $\mu_b = \frac{2}{3}\mu$ é a viscosidade *bulk*, μ é a viscosidade molecular e δ_{ij} representa o delta de Kronecker ($\delta_{ij} = 1$ para i = j e $\delta_{ij} = 0$ para $i \neq j$).

Efeitos da força de campo são importantes quando modelam-se escoamentos com meios porosos, onde um termo fonte na equação do movimento deve ser incluído. Ainda, para escoamentos onde efeitos da coriólise e força centrípeta são relevantes, também existe uma contribuição destas forças em f_i , casos estes que não existem neste trabalho. Aplicando a média temporal na Equação fundamental 3.14, obtém-se a Equação 3.16:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\rho \overline{U_i} \right) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho \overline{U_i U_j} \right) = -\frac{\partial \overline{P}}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\overline{\tau_{ij}} + \rho \overline{u_i'' u_j''} \right)$$
(3.16)

Quando se aplica a média na Equação 3.14, nove termos surgem como resultado desta operação matemática. Fisicamente são nove tensores extras onde três destes são tensores normais e os seis demais são tensores de cisalhamento.

Estes tensores extras são conhecidos como *tensores tensão de Reynolds* e apresentam o seguinte equacionamento:

$$\tau_{ij} = -\rho \overline{u_i'' u_j''} \tag{3.17}$$

Quanto a média da tensão viscos
a $\overline{\tau_{ij}},$ presente na Equação 3.16, tem-se a Equação 3.18:

$$\overline{\tau_{ij}} = -\mu \left(\frac{\partial \overline{U_i}}{\partial x_j} + \frac{\partial \overline{U_j}}{\partial x_i} \right)$$
(3.18)

3.6 Conservação da Energia

Além da massa e do movimento, a energia é a terceira propriedade do fluido para a qual uma equação de conservação deve ser formulada de forma a descrever qualquer tipo de escoamento. A formulação apresentada aqui neste trabalho é em função da entalpia total H:

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\rho H\right) + \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\rho U_j H\right) = \frac{\partial P}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x_j}\left(U_i \tau_{ij} + Q_j\right) + \rho U_i f_i \tag{3.19}$$

Considerando um volume de controle infinitesimal, os dois termos do lado esquerdo desta equação descrevem a taxa de aumento de H e a taxa a qual esta grandeza é transportada por convecção nas fronteiras do volume de controle. O primeiro termo do lado direito da Equação 3.19 descreve a influência da pressão na entalpia total. O segundo termo descreve a taxa de trabalho realizado pelo fluido contra a sua tensão viscosa produzida por deformação. O gradiente Q_j é o fluxo de energia transferido por condução no volume de controle e o último termo refere-se ao trabalho realizado por forças de campo. Este último termo é negligenciado na derivação da equação da média da conservação da energia.

A entalpia total esta relacionada a energia total, E, a energia interna, e, a entalpia estática, h, da seguinte maneira:

$$H = E + \frac{P}{\rho} = e + \frac{1}{2}U_iU_i + \frac{P}{\rho}$$
(3.20)

onde

$$H = h + \frac{1}{2}U_iU_i \tag{3.21}$$

Para derivação futura das equações de transporte para fluxos turbulentos de calor, é interessante expressar a equação de energia em termos da entalpia estática:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho h) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho U_j h) = \frac{\partial P}{\partial t} + U_j \frac{\partial P}{\partial x_j} - \tau_{ij} \frac{\partial U_i}{\partial x_j} - \frac{\partial Q_j}{\partial x_j}$$
(3.22)

Aplicando a Lei de Fourier, o fluxo de calor Q_j , no lado direito das Equações 3.19 e 3.22 é dado por:

$$Q_j = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x_j} \tag{3.23}$$

em que λ é a condutividade térmica.

Uma relação deve ser encontrada, de forma que a entalpia relacione-se com a temperatura. Assim, para um gás ideal, h é diretamente relacionado com T através do calor específico à pressão constante, c_p :

$$h = c_p T \tag{3.24}$$

Se a razão entre a variação da pressão e a pressão absoluta é pequena comparada com a razão entre a variação da temperatura e a temperatura absoluta, a lei dos gases ideais $P = \rho RT$, mostra que o efeito da mudança da pressão na temperatura é pequeno. Isto acontece em escoamentos incompressíveis e compressíveis a velocidades não muito altas. Ainda nestes casos, a dissipação será muito pequena CEBECI e SMITH, (1974). Portanto, os termos relacionados à dissipação e a pressão nas Equações 3.19 e 3.22 podem ser negligenciados levando a formulação da equação da energia para energia total e entalpia estática, sendo respectivamente:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\rho H\right) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho U_j H\right) = -\frac{\partial Q_j}{\partial x_j} \tag{3.25}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\rho h\right) + \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\rho U_j h\right) = -\frac{\partial Q_j}{\partial x_j} \tag{3.26}$$

A média temporal da equação da energia, representada pelas Equações 3.25 e 3.26, resultam nas seguintes equações de conservação para a energia média total (Equação 3.27) e para a entalpia estática (Equação 3.28):

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\rho \overline{H} \right) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho \overline{U_j} \overline{H} \right) = -\frac{\partial}{\partial x_j} \left(\overline{Q_j} + \rho \overline{u_j'' H''} \right)$$
(3.27)

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\rho \overline{h} \right) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho \overline{U_j} \overline{h} \right) = -\frac{\partial}{\partial x_j} \left(\overline{Q_j} + \rho \overline{u_j'' h''} \right)$$
(3.28)

onde a média e as flutuações da energia total, \overline{H} e H'', são definidas como:

$$\overline{H} = \overline{h} + \frac{\overline{U_i U_i}}{2} = \overline{h} + \frac{\overline{U_i} \overline{U_i}}{2} + \frac{\overline{u_i'' u_i''}}{2} = \overline{h} + \frac{\overline{U_i} \overline{U_i}}{2} + k$$
(3.29)

$$H'' = h'' + \overline{U_i}u_i'' + \frac{u_i''u_i''}{2} - k$$
(3.30)

onde $k=\frac{\overline{u_i''u_i''}}{2}$ representa a energia cinética turbulenta.

3.7 Conservação das Espécies Químicas

A Equação 3.31 da conservação das espécies C, pode ser derivada, na sua forma instantânea, como segue:

$$\frac{\partial \rho C}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho U_j C \right) = -\frac{\partial J_i}{\partial x_j} + S \tag{3.31}$$

onde ρ é a massa específica, C é a espécie transportada, U_j é o vetor velocidade, J é o termo difusivo e S é o termo fonte/sumidouro do transporte das espécies devido a reações químicas.

Nesta Equação 3.31 o primeiro termo do lado esquerdo contabiliza o acúmulo de material dentro do volume de controle, enquanto que o segundo termo representa o transporte convectivo deste material sobre a superfície de controle. No lado direito desta equação, o primeiro termo diz respeito ao termo difusivo dentro do próprio volume e o último termo é referente a taxa de reação química caso houver.

O termo difusivo J_i da Equação 3.31, pode ser relacionado através da Equação 3.32

da segunda Lei de Fick:

$$J_i = -\Gamma \frac{\partial C}{\partial x_i} \tag{3.32}$$

onde Γ representa o coeficiente de difusão.

O termo convectivo não-linear $\left(\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\rho U_j C\right)\right)$ presente no lado esquerdo da Equação 3.31 gera um termo de fluxo turbulento desconhecido (chamado de *Fluxo de Reynolds*) quando se aplica a média temporal dando origem a Equação 3.33:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\rho \overline{C} \right) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho \overline{C} \, \overline{U_j} \right) = -\frac{\partial}{\partial x_j} \left(\overline{J_i} + \rho \overline{u_j'' c''} \right) + \overline{S} \tag{3.33}$$

3.8 Generalização das Equações de Transporte para Escalares

A Equação 3.33 pode ser agrupada de uma maneira genérica para tratamento de qualquer variável escalar conforme a Equação 3.34, para transporte de escalares:

$$\frac{\partial \left(\rho \overline{\Phi}\right)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho \overline{\Phi} \overline{U_j}\right) = -\frac{\partial}{\partial x_j} \left(-\overline{\Gamma \frac{\partial \Phi}{\partial x_j}} + \rho \overline{u_j'' \Phi''}\right) + S_\Phi$$
(3.34)

onde ρ representa a densidade, Φ o escalar a ser transportado, U_j a velocidade de escoamento, Γ é a difusividade do escalar, S_{Φ} é o termo fonte/sumidouro do escalar, $\rho \overline{u''_{j} \Phi''}$ o termo de fluxo turbulento que deve ser computado através de modelos de turbulência.

3.9 Turbulência

Neste trabalho de combustão em fornos de cimento, o fenômeno de turbulência deve ser modelado devido aos grandes gradientes de velocidade e densidade presentes no reator de combustão. A reação de combustão afeta a turbulência devido a troca térmica que por sua vez, provoca variação na densidade. Em contrapartida, a turbulência pode afetar a taxa de reação pela intensificação das misturas de reagentes e produtos. Em geral, a taxa de reação, em escoamentos laminares, é determinada pela mistura à nível molecular, enquanto que em escoamentos turbulentos a taxa de reação é não somente afetada por mistura à nível molecular, más também pela mistura turbulenta causada pelo movimentos aleatórios dos turbilhões (LIXING, , 1993).

O fenômeno de turbulência consiste de flutuações no campo de escoamento em relação a tempo e espaço. É um processo complexo, principalmente devido ser tridimensional, transiente e composto de muitas escalas. Este fenômeno ocorre quando as forças de inércia do fluido tornam-se significativas quando comparadas com as forças viscosas sendo caracterizado em altos números de Reynolds.

Turbulência é um dos mais complexos problemas na mecância dos fluidos. Diferentes aproximações são usadas para o seu entendimento em problemas de engenharia. A maneira mais simples é fazer com que a então chamada viscosidade turbulenta ou difusividade turbulenta seja como uma propriedade constante, a qual foi muito utilizada para predição de escoamentos em combustores. Por muitos anos, o método integral baseado em velocidade empírica e perfis de temperatura foi adaptado em escoamentos tipo jato, onde não era necessário o conhecimento da turbulência. Obviamente, um tratamento mais rigoroso é necessário para predizer escoamentos turbulentos complexos na engenharia, tais como escoamentos tri-dimensionais recirculantes ou giratórios (*swirling*) onde a viscosidade turbulenta não é constante. A fundamental aproximação para estudos de turbulência é *Direct Numerical Simulation* (DNS) para resolver as equações de Navier-Stokes em tamanho de grade das escalas de Kolmogorov sem usar nenhum modelo de turbulência. Entretanto, o DNS necessita de uma considerável capacidade computacional que ainda são impraticáveis em problemas práticos de engenharia. Uma alternativa é o *Large-Eddy Simulation* (LES), que resolve as equações em tamanho de grade dos grandes turbilhões, mas ainda necessita modelar as pequenas escalas de turbulência. Atualmente, com a utilização de processamento paralelo (*Parallel Virtual Machine*-PVM) o LES vem sendo amplamente utilizado em problemas de engenharia.

Para maioria dos problemas práticos de engenharia, no entanto, não é necessário resolver os detalhes das flutuações turbulentas para se representar um escoamento, sendo somente necessário os efeitos da turbulência no escoamento médio. Para tal, utilizam-se os modelos de turbulência estatísticos baseados nas equações da média temporal de Reynolds.

Os modelos de turbulência, em bases estatísticas, modificam a equação de Navier-Stokes pela introdução da média temporal (*Reynolds averaging*) produzindo as equações de *Reynolds Averaged Navier-Stokes* (RANS) que são as Equações 3.13, 3.16,3.27 e 3.34, expostas anteriormente.

A idéia básica de uma modelagem de turbulência é simular um termo desconhecido de alta ordem usando uma correlação de baixa ordem ou propriedades médias do fluido (LIXING, , 1993).

Simulações empregando os modelos de turbulência estatísticos além de serem representativos dos problemas encontrados na engenharia, reduzem enormemente o esforço computacional quando comparado ao DNS. No entanto, a RANS introduz termos desconhecidos que contém produto de quantidades flutuantes que agem como tensores adicionais ao fluido. Estes termos são chamados de *tensores de Reynolds*. Os tensores de Reynolds precisam ser modelados pela adição de uma equação adicional de quantidade conhecida para obter o fechamento do problema, ou seja, ter um número suficiente de equações para que o problema seja possível de ser resolvido. Esta equação adicional necessária para "fechar" o problema é quem define o tipo de modelo de turbulência (GUIA CFX, , 2003).

Quando se aplica o método da média temporal na Equação 3.12 da continuidade para obter a Equação 3.13, é possível observar que não houve modificações nesta última. O mesmo fato não acontece quando se aplica o método da média temporal na Equação 3.14 de movimento para obter a 3.16 e na Equação 3.19 da energia para obter a 3.27. Nestas duas últimas equações, surgiram termos de fluxos turbulentos adicionais ao fluxo difusivo molecular. Estes são os **tensores de Reynolds**, $\rho \overline{u''_i u''_j}$, referente a equação de transporte de movimento, e o **fluxo de Reynolds**, $\rho \overline{u''_i \Phi''}$, referente a equação de transporte de escalares. Estes termos surgem dos termos convectivos não lineares nas equações instantâneas após aplicar o método da média temporal.

3.10 Modelos de Turbulência

Um modelo de turbulência é o procedimento computacional utilizado que permite fechar a resolução das Equações (3.13), (3.16) e (3.34). Para a maioria dos problemas de engenharia não é necessário resolver os detalhes das flutuações turbulentas. Somente os efeitos da turbulência no escoamento médio são suficientes, em particular, para expressar os tensores de Reynolds ($\rho \overline{u'_i u''_j}$) e o transporte de fluxo turbulento de escalares conhecidos como fluxos de Reynolds ($\rho \overline{u'_i u''_j}$). Para que um modelo de turbulência seja viável computacionalmente ele deve apresentar-se para uma larga faixa de aplicabilidade em problemas diversos, ser robusto, simples e econômico computacionalmente. Os modelos de turbulência mais conhecidos, utilizados atualmente, estão presentes na Tabela 3.2.

Modelos Clássicos	os Clássicos Baseados nas Equações de Reynolds (média-temporal)		
	Modelo da zero-equação (modelo do comprimento de mistura)		
	Modelo de duas equações $(k - \epsilon)$ e o $(k - \omega)$		
	Modelo dos tensores de Reynolds		
	Modelo algébrico dos tensores		
Large eddy simulation	Baseado nas Equações filtradas		

Os modelos clássicos utilizam as equações de Reynolds (RANS-*Reynolds Averaged Navier-Stokes*) e são de base estatística uma vez que é aplicado o procedimento da média estatística para obter as equações. Neste trabalho, será utilizado os modelos clássicos de duas equações- $k - \epsilon$ (LAUNDER e SPALDING, , 1974) e o modelo dos tensores de Reynolds (*Reynolds Stress Model*) desenvolvido originalmente por (CLARKE e WILKES, , 1989). Referência para maiores informações podem ser obtidas em GARDE, (1994); LIXING, (1993); GUIA CFX, (2003).

O modelo clássico de duas equações $k - \epsilon$ é baseado na idéia que exite um analogia entre ação dos tensores viscosos e tensores de Reynolds no escoamento. Ambos os tensores aparecem no lado direito da Equação de movimento 3.16 e na Lei de Newton da viscosidade o tensor viscoso é tido como sendo proporcional à taxa de deformação do elemento fluido sendo que, para fluidos incompressíveis, é dado pela Equação 3.35:

$$\tau_{ij} = \mu \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) \tag{3.35}$$

onde $U_i \in U_j$ são as velocidades instantâneas.

É observado experimentalmente, em escoamento incompressível isotérmico, que o fenômeno da turbulência diminui, a menos que o escoamento seja tensionado constantemente. Além disso, foi observado que os tensores Reynolds $\rho \overline{u''_i u''_j}$ aumentam com o aumento da taxa de deformação do fluido. Esta foi proposta de Boussinesq em 1887 em que os tensores de Reynolds seriam ligados a taxa média de deformação, como pode ser observado pela Equação 3.36:

$$\tau_{ij} = -\rho \overline{u_i'' u_j''} = \mu_t \left(\frac{\partial \overline{U_i}}{\partial x_j} + \frac{\partial \overline{U_j}}{\partial x_i} \right)$$
(3.36)

onde $\overline{U_i}$ e $\overline{U_j}$ são os valores médio da velocidade de escoamento. Observa-se que o lado direito da Equação 3.35 de Newton é análogo ao da Equação 3.36.

Transporte de calor, massa e outras propriedades escalares são modeladas similarmente. A fórmula 3.36 mostra que o transporte de movimento $(-\rho \overline{u''_i u''_j})$ é tido como sendo proporcional ao gradiente da velocidade média ($\overline{U_i} \in \overline{U_j}$), isto é, gradientes de movimento por unidade de massa. Por analogia, o transporte turbulento de um escalar, é feito como sendo proporcional ao gradiente do valor médio da quantidade transportada (hipótese da difusividade turbulenta), conforme a Equação 3.37:

$$-\overline{\rho u_i'' \Phi'} = \Gamma_t \frac{\partial \overline{\Phi}}{\partial x_i} \tag{3.37}$$

onde Γ_t é a difusividade turbulenta e $\overline{\Phi}$ é a propriedade escalar média transportada.

Desde que a transferência de movimento, calor e massa sejam devido ao mesmo mecanismo mistura-dissipativa, espera-se que o valor da difusividade turbulenta, Γ_t , seja próxima da viscosidade turbulenta, μ_t . Para distinguir esta difusividade turbulenta Γ_t entre mássica e calor, é introduzido o número de Schmidt (*Sc*) para massa e Prandtl (*Pr*) para calor que se relacionam com a viscosidade turbulenta, μ_t , através da Equação 3.38:

$$\sigma = \frac{\mu_t}{\Gamma_t} \tag{3.38}$$

3.10.1 Adequação das Equações de Transporte

Com a idéia inicial da abordagem da viscosidade dissipativa para os modelos de turbulência desta classe, a forma final das equações de transporte podem ser alcançadas. Uma vez que todas as variáveis são quantidades conhecidas do escoamento, é comum desprezar as notações de subrescritos relativos as médias temporais.

A equação da conservação da massa torna-se:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho \overline{U_j} \right) = 0 \tag{3.39}$$

A equação de transporte da quantidade de movimento resulta em:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\rho \overline{U_i} \right) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho \overline{U_j U_i} \right) = -\frac{\partial P^*}{\partial x_i} + f_i + \frac{\partial}{\partial x_j} \left\{ \mu_{ef} \left(\frac{\partial \overline{U_i}}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \mu_{ef} \frac{\partial \overline{U_l}}{\partial x_l} \delta_{ij} \right\}$$
(3.40)

onde $\mu_{ef} = \mu + \mu_t$

A interpretação acerca da massa específica e velocidade é a mesma da equação da continuidade. O termo fonte e a pressão são sempre médias temporais, mas nota-se que o termo $\frac{2}{3}\rho\delta_{ij}k$, do modelo da viscosidade dissipativa do tensor de Reynolds é agrupado com a pressão pelo fato deste termo ser escalar. Em função desta manipulação matemática, para obter-se a pressão termodinâmica, subtrai-se o termo $\frac{2}{3}\rho\delta_{ij}k$ da pressão calculada P^* , a partir da Equação 3.40. A forma padrão do tensor tensão efetivo exclui a porção devido ao gradiente de velocidade, conforme mostra a Equação 3.41:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\rho \overline{U_i} \right) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho \overline{U_j U_i} \right) = -\frac{\partial P^*}{\partial x_i} + f_i + \frac{\partial}{\partial x_j} \left\{ \mu_{ef} \left(\frac{\partial \overline{U_i}}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) \right\}$$
(3.41)

Este procedimento é consistente com a forma padrão do tensor de Reynolds utilizado no modelo de turbulência.

No caso da conservação da energia, a partir dos conceitos anteriores do modelo de turbulência, a equação de conservação total de energia torna-se:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\rho H\right) - \frac{\partial P}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho \overline{U_j} H\right) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x_j} + \frac{\mu_t}{P r_t} \frac{\partial h}{\partial x_j}\right) + S_E
+ \frac{\partial}{\partial x_j} \left\{ \overline{U_i} \left[\mu_{ef} \left(\frac{\partial \overline{U_i}}{\partial x_j} + \frac{\partial \overline{U_j}}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \mu_{ef} \frac{\partial \overline{U_l}}{\partial x_l} \delta_{ij} \right] + \mu \frac{\partial k}{\partial x_j} \right\}$$
(3.42)

em que Pr_t é o número de Prandtl turbulento, μ_t é a viscosidade turbulenta e os termos $H = h + \frac{1}{2}\overline{U_iU_i} + k \ e \ \frac{2}{3}\rho\delta_{ij}k$ são agrupados com a parcela da pressão na entalpia estática, antes dos termos modelados serem introduzidos nas equações de conservação.

3.10.2 Modelo $k - \epsilon$ de Turbulência

O modelo $k - \epsilon$ padrão (LAUNDER e SPALDING, , 1974) baseado na hipótese de Boussinesq, que também é conhecido como modelo de dissipação viscosa (*Eddy Viscosity Models*), apresenta comportamento isotrópico dos tensores de Reynolds.

Este modelo sugere que a turbulência consiste de pequenos turbilhões que são continuamente formados e dissipados, e na qual os tensores de Reynolds são assumidos serem proporcionais à média dos gradientes de velocidade. Isto define o modelo da *Dissipação Viscosa*.

Modelos que utilizam a suposição da viscosidade dissipativa relacionam os tensores de Reynolds e os fluxos turbulentos (fluxos de Reynolds) às variáveis médias do escoamento. Estes modelos usam a hipótese do gradiente difusivo para relacionar os tensores de Reynolds aos gradientes da velocidade média e a viscosidade turbulenta, conforme mostra a Equação 3.43:

$$\overline{\rho u_i'' u_j''} = -\mu_t \left(\frac{\partial \overline{U_i}}{\partial x_j} + \frac{\partial \overline{U_j}}{\partial x_i} \right) + \frac{2}{3} \rho \delta_{ij} k \tag{3.43}$$

O fluxo de energia turbulento por sua vez, são modelados usando a suposição da difusividade dissipativa que pode ser expresso através da Equação 3.44:

$$-\overline{\rho u_j'' h''} = \frac{\mu_t}{P r_t} \frac{\partial h}{\partial x_j} \tag{3.44}$$

onde Pr_t é o número de Prandtl turbulento
e μ_t é a viscosidade turbulenta.

As flutuações dos termos do trabalho viscoso, para turbulência isotrópica homogênea, são aproximadas pela Equação 3.45:

$$\frac{\partial \overline{(u_i''\tau_{ij})}}{\partial x_j} \approx \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mu \frac{\partial \tilde{k}}{\partial x_j} \right)$$
(3.45)

As Equações 3.43, 3.44 e 3.45 somente poderão expressar os termos das flutuações turbulentas das variáveis médias se a energia cinética turbulenta, k, e viscosidade turbulenta, μ_t , forem conhecidas. O modelo de turbulência $k - \epsilon$ é capaz de fornecer estas variáveis através da solução de duas equações de transporte, sendo uma para k e outra para ϵ , para posteriormente calcular a viscosidade turbulenta.

A primeira derivação para este modelo foi para escoamentos incompressíveis, nos quais as flutuações de massa específica podem ser ignoradas. A mesma formulação é utilizada para escoamentos compressíveis, com a exceção de um termo que possui formulação distinta para este tipo de escoamento.

A viscosidade turbulenta, μ_t , é modelada como o produto de uma escala turbulenta de velocidade, V_t , e um comprimento de escala turbulenta, l_t , conforme proposto por Prandtl e Kolmogorov. Introduzindo uma constante de proporcionalidade, chega-se a Equação 3.46:

$$\mu_t = \rho c_\mu l_t V_t \tag{3.46}$$

A escala de velocidade turbulenta é igual a raiz quadrada da energia cinética turbulenta, k, sendo que esta é determinada via Equação de transporte 3.50 que será apresentada posteriormente:

$$V_t = \sqrt{k} \tag{3.47}$$

No modelo de duas equações $k - \epsilon$ assume-se que o comprimento de escala é um comprimento de escala de dissipação e quando as escalas dissipativas turbulentas são isotrópicas, Kolmogorov determinou que:

$$\epsilon = \frac{k^{\frac{3}{2}}}{l_t} \tag{3.48}$$

na qual ϵ é a taxa de dissipação turbulenta de energia cinética. Caso k, ϵ ou l_t sejam conhecidos, a viscosidade turbulenta é determinada a partir da Equação 3.46 e os tensores de Reynolds podem ser calculados a partir da Equação 3.43, fechando assim as equações turbulentas do transporte de movimento. A tarefa restante é determinar equações para k e ϵ e condições de contorno apropriadas.

Portanto, a viscosidade dissipativa, μ_t , é calculada à partir do produto de uma escala turbulenta de velocidade e um comprimento de escala turbulenta, como segue:

$$\mu_t = \rho c_\mu \frac{k^2}{\epsilon} \tag{3.49}$$

em que ϵ é a taxa de dissipação de k (o montante de k por massa e tempo convertidos em energia interna de fluido por ação viscosa) e c_{μ} é uma constante do modelo.

Finalmente, apresentam-se as Equações de transporte 3.50 e 3.51 deste modelo para a obtenção local dos valores de k e ϵ :

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho \overline{U_j} k)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\Gamma_k \frac{\partial k}{\partial x_j} \right) + P_k - \rho \epsilon$$
(3.50)

$$\frac{\partial(\rho\epsilon)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho\overline{U_j}\epsilon)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\Gamma_k \frac{\partial\epsilon}{\partial x_j}\right) + \frac{\epsilon}{k} \left(c_{\epsilon 1} P_k - \rho c_{\epsilon 2} \epsilon\right)$$
(3.51)

em que os coeficientes difusivos são dados por:

$$\Gamma_{k} = \mu + \frac{\mu_{t}}{\sigma_{k}}$$

$$\Gamma_{\epsilon} = \mu + \frac{\mu_{t}}{\sigma_{\epsilon}}$$
(3.52)

A taxa de produção da energia cinética turbulent
a ${\cal P}_k$ é dada por:

$$P_k = -\overline{\rho u_i'' u_j''} \frac{\partial \overline{U_i}}{\partial x_j}$$
(3.53)

Substituindo o tensor de Reynolds da Equação 3.43, na Equação de ${\cal P}_k$ tem-se:

$$P_k = \mu_t \left(\frac{\partial \overline{U_i}}{\partial x_j} + \frac{\partial \overline{U_j}}{\partial x_i} \frac{\partial \overline{U_i}}{\partial x_j} \right)$$
(3.54)

As constantes existentes no equacionamento do model
o $k-\epsilon$ estão listadas na Tabela 3.3.

er	1 <u>a 3.3</u> : Constantes do Modelo $\kappa - \epsilon$ Pa						
	c_{μ}	$c_{\epsilon 1}$	$c_{\epsilon 2}$	σ_k	σ_{ϵ}	Pr_t	
	0.09	1.44	1.92	1.0	1.3	0.9	

Tabel<u>a 3.3: Constantes do Modelo $k-\epsilon$ Padrão </u>

3.10.3 Modelo Tensores de Reynolds-(Reynolds Stress Model-RSM) de Turbulência

A maioria dos escoamentos reais, como o deste trabalho, são escoamentos nãoisotrópicos, e a viscosidade turbulenta, μ_t , é um tensor e não um escalar. Para escoamentos turbulentos não-isotrópicos, a hipótese de Boussinesq pode fornecer resultados não reais. Nestes casos, uma alternativa seria partir para resolução direta dos tensores de Reynolds usando o modelo de segunda ordem (*Reynolds Stress Model*) o qual pode automaticamente contabilizar os efeitos giratórios (*swirling*). Estes efeitos giratórios estão quase sempre presentes em câmaras de combustão para promover uma melhor mistura dos reagentes e para ajudar na estabilização da chama. Nestes escoamentos giratórios, o fenômeno de turbulência pode ser altamente não-isotrópico devido a ação da curvatura do escoamento e aceleração centrífuga. Ainda tem o agravante, no caso de escoamentos reativos com movimentos giratórios, da variação na densidade no escoamento (LIXING, , 1993).

Devido ao grande número de manipulações matemáticas necessárias para chegar ao modelo padrão dos tensores de Reynolds, as equações serão colocadas na sua forma final. Vale lembrar que nesta sessão estão sendo tratados apenas as equações para transporte dos tensores de Reynolds $\rho \overline{u''_i u''_j}$. O mesmo procedimento deve ser adotado para o caso do fluxo turbulento de calor $\rho \overline{u''_i h''}$ e para o fluxo de escalares $\rho \overline{u''_i Y_i}$. Maiores detalhes, podem ser encontrados em LAUNDER e RODI, (1975).

A equação conservativa para os tensores de Reynolds $\rho \overline{u_i'' u_j''}$, pode ser escrita de

acordo com a Equação 3.55:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\rho \overline{u_i'' u_j''} \right) = C_{ij} + P_{ij} + \phi_{ij} + T D_{ij} + P D_{ij} + V D_{ij} - \epsilon_{ij}$$
(3.55)

onde os termos presentes no lado direito desta Equação estão reunidos na Tabela 3.4.

	Tensores de Reynolds		
	$rac{\partial}{\partial t}\left(ho\overline{u_i''u_j''} ight) =$		
$C_{(i)j}$	$-\overline{U_k}rac{\partial}{\partial x_k}\left(ho\overline{u_i''u_j''} ight)$		
$P_{(i)j}$	$-\rho \overline{u_k'' u_i''} \frac{\partial \overline{U_j}}{\partial x_k} - \rho \overline{u_k'' u_j'' \frac{\partial \overline{U_i}}{\partial x_k}}$		
$\Phi_{(i)j}$	$+p''\left(\frac{\partial u_j''}{\partial x_i}+\frac{\partial u_i''}{\partial x_j}\right)$		
$TD_{(i)j}$	$-rac{\partial}{\partial x_k}\left(ho\overline{u_k''u_i''u_j''} ight)$		
$PD_{(i)j}$	$-rac{\partial}{\partial x_i}\overline{u_i''p''}-rac{\partial}{\partial x_j}\overline{u_i''p''}$		
$VD_{(i)j}$	$-rac{\partial}{\partial x_k}\left(\overline{u_i'' au_{jk}''}+\overline{u_j'' au_{ik}''} ight)$		
$-\epsilon_{(i)j}$	$\overline{\overline{\tau_{jk}''\frac{\partial u_i''}{\partial x_k}}+\overline{\tau_{ik}''\frac{\partial u_j''}{\partial x_k}}}$		
$S_{(i)j}$			

Tabela 3.4: Termos presentes na Equação 3.55 conservativa

É possível observar que a Tabela 3.4 referencia quantidades desconhecidas de segunda ordem e algumas até superiores que precisam ser modeladas. De maneira geral, aproximações devem ser utilizadas para modelar todos os termos desconhecidos. A Tabela 3.5 traz os termos na modelagem padrão dos tensores, como proposto originalmente por LAUNDER e RODI, (1975) que estão agrupados na Tabela 3.4.

As constantes que aparecem na Tabelas 3.5 são apresentadas na Tabela 3.6 e 3.7.
Tabela 3.5: Termos da Tabela 3.4					
	Tensores de Reynolds				
	$rac{\partial}{\partial t}\left(ho\overline{u_i''u_j''} ight) =$				
$C_{(i)j}$	$-\overline{U_k}rac{\partial}{\partial x_k}\left(ho\overline{u_i''u_j''} ight)$				
$P_{(i)j}$	$- ho \overline{u_k'' u_i''} rac{\partial \overline{U_j}}{\partial x_k} - ho \overline{u_k'' u_j'' rac{\partial \overline{U_i}}{\partial x_k}}$				
$\Phi_{(i)j}$	$LRR = -c_1 \frac{\epsilon}{k} \left(\rho \overline{u_i'' u_j''} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \rho k \right) - c_2 \left(P_{ij} - \frac{2}{3} \delta_{ij} P_k \right)$				
	$Jakirlic = -\epsilon\rho \left[C_{s1}a_{ij} + C_{s2} \left(a_{ik}a_{kj} - \frac{1}{3}A_2\delta_{ij} \right) \right]$				
	$-C_{r1}P_ka_{ij} + C_{r2}\rho kS_{ij}\sqrt{A_2}$				
	$C_{r4}\rho k\left(a_{ik}S_{jk}+a_{jk}S_{ik}-\frac{2}{3}a_{kl}S_{kl}\delta_{kl}\right)$				
	$+C_{r5}\rho k\left(a_{ik}\omega_{jk}+a_{jk}\omega_{ik}\right)$				
$TD_{(i)j}$	$-rac{\partial}{\partial x_k}\left(c_srac{k}{\epsilon}\overline{u_k''u_l''}rac{\partial ho\overline{u_i''u_j''}}{\partial x_l} ight)$				
$PD_{(i)j}$	modelado com $TD_{(i)j}$				
$VD_{(i)j}$	$rac{\partial}{\partial x_k} \left(\mu rac{\partial \overline{u_i^{\prime \prime} u_j^{\prime \prime}}}{\partial x_k} ight)$				
$-\epsilon_{(i)j}$	$rac{2}{3}\delta_{ij} ho\epsilon$				
	equação de transporte para ϵ				
$S_{(i)j}$					

<u>Tabela 3.6: Constantes da Tabela 3.5</u>

c_1	c_2	c_3	$c_{\epsilon 1}$	$C_{\epsilon 2}$	C_{ϵ}
1.8	0.6	0.22	1.45	1.9	0.18

Tabela	3.7:	Constante	s da	Tabela	3.5

	TD_{ij}	$(\phi_{ij} + \phi_{ji})_1$		$(\phi_{ij} + \phi_{ji})_2$				
modelo		linear	quadrático		line	ar		
	C_s	C_{s1}	C_{s2}	C_{r1}	C_{r2}	C_{r3}	C_{r4}	C_{r5}
LRR-IP	0.22	1.8	0.0	0.0	0.8	0.0	0.6	0.6

3.11 Modelo de Combustão Turbulenta

3.11.1 Equacionamento Geral

Durante a reação de combustão, uma mistura de hidrocarbonetos reage com uma corrente de oxidante que geralmente é o ar em proporções encontradas na atmosfera. Os produtos não são usualmente formados em uma única reação química; os componentes do combustível e do oxidante submetem-se a uma série de reações químicas em série. Por exemplo, mais de 40 reações elementares estão envolvidas na combustão do gás metano (CH_4) que é o mais simples dos combustíveis hidrocarbonetos. Na maioria das reações acontecem a formação e subseqüente distribuição de espécies químicas intermediárias as quais não existem na zona da chama. Entretanto, estas espécies são importantes para descrever o comportamento preciso e particular da queima quando estudam-se problemas característicos de combustão.

Manipular mais de 40 reações em códigos computacionais de CFD não é atrativo em virtude da tecnologia atual. Muitas características importantes de uma chama podem ser modelados utilizando uma quantidade reduzida de reações incluindo perdas de calor, consumo de oxigênio e qualidade de queima.

O código computacional CFX^{TM} , utilizado neste trabalho, tem a capacidade de resolver escoamentos reagentes, tais como reações de combustão, utilizando o Modelo de Dissipação Eddy (EDM) desenvolvido originalmente por SPALDING, (1971) e depois testado por MAGNUSSEN e HJERTAGER, (1976). Da maneira como esta implementado o modelo, um processo de combustão pode ser descrito genéricamente utilizando uma simples reação, conforme a Equação 3.56:

$$combustivel_k + r_k oxidante \xrightarrow{k} f_k(1+r_k) produtos 1_k + (1-f_k)(1+r_k) produto 2_k \quad (3.56)$$

onde r_k é a fração massica estequiométrica da k-ésima reação e f_k é a fração massica do primeiro produto formado na reação.

Por exemplo, considere a reação genérica representada pela Equação 3.57:

$$aA + bB \xrightarrow{k} cC + dD \tag{3.57}$$

Para esta reação considerada, tem-se:

$$f_k = \frac{c.PM_C}{c.PM_C + d.PM_D} \tag{3.58}$$

е

$$r_k = \frac{b.PM_B}{a.PM_A} \tag{3.59}$$

em que PM_i é o peso molecular da espécie i.

3.11.2 Equação de Transporte das Espécies Químicas

Face aos conceitos empregados acima, uma equação de transporte extra é resolvida para cada espécie química no modelo. A equação é uma função de Y_i , da fração massica da espécie química i, e é apresentada na sua forma final através da Equação 3.60, conforme foi exposto na Seção 3.8:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\rho Y_i \right) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho u_j Y_i \right) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\Gamma_{i_{ef}} \frac{\partial Y_i}{\partial x_j} \right) + R_i$$
(3.60)

em que:

$$\Gamma_{i_{ef}} = \Gamma_i + \frac{\mu_t}{Sc_t} \tag{3.61}$$

sendo Γ_i a difusividade da espécie química i e Sc_t o número de Schmidt turbulento.

A Equação 3.60 é simplesmente uma equação geral convectiva-difusiva escrita da mesma forma em que são resolvidas as demais variáveis dependentes do escoamento. Assim, é conveniente resolver em função de Y_i com a finalidade de estabelecer a composição da mistura.

3.11.3 Modelo de Dissipação Eddy

A taxa de qualquer reação pode ser limitada pela sua cinética ou pela sua mistura física. Enquanto a mistura física descreve o processo de geração de uma mistura homogênea dos reagentes em um nível molecular, a cinética descreve a taxa na qual as moléculas colidem com energia suficiente para alcançarem a energia de ativação e reagirem. Ambos os processos são essenciais para ocorrer a reação e qualquer um deles pode controlar a reação. Assim, o processo mais lento entre a mistura e o mecanismo cinético é assumido como determinante da taxa de reação.

A taxa controlada pelo processo de mistura é inserida neste trabalho, através do modelo de Dissipação Eddy (*Eddy Break-Up Model*) desenvolvido por SPALDING, (1971), onde a taxa de consumo de combustível é especificada como uma função das propriedades do escoamento local. O modelo de dissipação *eddy* é baseado na concepção que a reação química é mais rápida do que o processo de transporte no escoamento. Quando os reagentes se misturam à nível molecular, eles instantaneamente formam produto. O modelo supõe que a taxa de reação pode ser relacionada diretamente ao tempo necessário para misturar os reagentes a nível molecular. Em escoamentos turbulentos, como o presente neste trabalho, o tempo de mistura é dominado pelas propriedades dos turbilhões, e desta forma, a taxa de reação é proporcional ao tempo de mistura, que por sua vez, é definido pela energia cinética turbulenta, k, e por sua dissipação, ϵ . Este conceito de controle de reação é aplicado em muitos processos de combustão industrial, onde a taxa de reação é mais rápida do que a taxa de mistura.

Em termos matemáticos, a taxa de reação controlada pelo processo de mistura é expressa em termos da escala de tempo turbulento, $\frac{k}{\epsilon}$, onde k é a energia cinética turbulenta e ϵ é a taxa de dissipação de k. O modelo leva em conta a taxa de dissipação do combustível, do oxidante e dos produtos, de acordo com as Equações 3.62, 3.63 e 3.64, respectivamente:

$$R_{comb,edm} = -C_R \rho Y_{comb} \frac{\epsilon}{k} \tag{3.62}$$

$$R_{oxid,edm} = -C_R \rho \frac{Y_{oxid}}{r_k} \frac{\epsilon}{k}$$
(3.63)

$$R_{prod,edm} = -C'_R \rho \frac{Y_{prod}}{(1+r_k)} \frac{\epsilon}{k}$$
(3.64)

onde $R_{i,edm}$ é a taxa de reação do componente *i* pelo modelo de mistura (*Eddy Dissipation Model*), sendo i = comb para combustível, i = oxid para o oxidante e i = prod para o produto da reação de combustão. Y_{comb} , Y_{oxid} e Y_{prod} são referentes as frações massicas do combustível, oxidante e produto respectivamente e C_R e C'_R são constantes do modelo.

A Equação de transporte 3.60 para a fração massica de cada componente da mistura é resolvida. Em seguida calcula-se a taxa de reação, que é considerada como sendo a menor das taxas dissipativas turbulentas entre a do combustível, do oxidante e do produto, conforme mostra a Equação 3.65:

$$R_{k,edm} = -\rho \frac{\epsilon}{k} min \left[C_R Y_{comb}, C_R \frac{Y_{oxid}}{r_k}, C'_R \frac{Y_{prod}}{1+r_k} \right]$$
(3.65)

3.11.4 Modificação da Equação da Energia

Para contar com os efeitos térmicos da reação, um termo de calor de reação deve ser adicionado à equação da energia. Há também a necessidade de adicionar um termo fonte, S_E , e outro relativo às difusividades das espécies químicas presentes. A equação em questão está em sua forma final, como mostra a Equação 3.66:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\rho H\right) - \frac{\partial P}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho u_j H\right) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x_j} + \sum_i^n \Gamma_i h_i \frac{\partial Y_i}{\partial x_j} + \frac{\mu_t}{Pr_t} \frac{\partial h}{\partial x_j}\right) + S_E - \sum_i^n h_i^f R_i$$
(3.66)

onde o termo $\sum_{i}^{n} h_{f}^{i} R_{i}$ refere-se à contribuição provinda da reação química e h_{i}^{f} é a entalpia de formação da espécie química *i*. Este termo transforma a energia de conversões químicas em calor sensível, enquanto que o termo $\sum_{i}^{n} \Gamma_{i} h_{i} \frac{\partial Y_{i}}{\partial x_{j}}$ refere-se à contribuição difusiva das espécies químicas.

3.12 Intensidade de Radiação Térmica

O modelo de radiação empregada neste trabalho científico foi o Aproximação Diferencial ou também conhecido como P1 ou modelo de Gibbs. O principal objetivo do modelo é resolver a equação de transporte de intensidade de radiação térmica, obtendo desta maneira o termo fonte, S_E , da Equação da Energia 3.66. O modelo é uma simplificação da equação de transporte de radiação e assume que a intensidade de radiação é isotrópica, ou seja, independe da direção em uma dada localização do espaço. É um modelo adequado para problemas que envolvem meios com espessura óptica maior que 1. Nestes casos opticamente densos¹ a radiação térmica interage com o interior do domínio, bem como suas superfícies. Quando um meio é opticamente denso, a radiação térmica é absorvida e então refletida em todas as direções. Esta situação é conhecida como "limite difusivo" na qual a intensidade de radição é independente da direção.

Toda a modelagem é bastante dispendiosa, e portanto não será apresentada neste

¹Densidade óptica maior que 1

trabalho. Maiores informações podem ser encontradas em GUIA CFX, (2003) ou em RAITHBY, (1991) que é a referência utilizado pelo código computacional.

Capítulo 4

Métodos Numéricos

Soluções analíticas, para as Equações de Navier Stokes, existem somente para escoamentos simples sob condições ideais. Para escoamentos reais, um tratamento numérico deve ser adotado, para que as equações diferenciais sejam resolvidas com a utilização de um método numérico.

As complexas formulações de Navier-Stokes aplicadas para a hipótese de um meio contínuo, apresentas inicialmente por Navier em 1822 (BIRD, , 1960), constituíram-se no ponto de partida do desenvolvimento e aperfeiçoamento de diversas técnicas de solução aplicadas à engenharia. Paralelamente às analíticas, as técnicas numéricas obtiveram um impulso extraordinário com o aumento do desempenho do processamento computacional, tanto à nível de *hardware* como de *software*. Os métodos numéricos das diferenças finitas e, mais recentemente o dos volumes finitos, o qual está sendo empregado neste trabalho, adaptaram-se facilmente aos princípios lógicos do tratamento dos dados computacionalmente. Ambos os métodos compreendem alguns procedimentos básicos comuns e que serão discutidos especificamente para o método dos volumes finitos.

Em literaturas como MALISKA, (1995), PATANKAR, (1980) e VERSTEEG e

MALALASEKERA, (1995) encontram-se, de forma didática e clara, os princípios nos quais o método dos volumes finitos se baseia. Os autores abordam tópicos como a discretização numérica e conseqüente obtenção das equações linearizadas e métodos para resolução das equações resultantes.

O objetivo principal deste capítulo é apresentar, de uma maneira suscinta, as particularidades dos métodos numéricos utilizados, neste trabalho, pelo pacote CFX^{TM} . Com isto, o enfoque será centrado na discretização das equações e nos esquemas de interpolação utilizados durante a realização do presente trabalho.

4.1 Equações de Transporte

As aproximações das equações diferenciais por uma expressão algébrica envolvem uma discretização das equações no domínio espacial dentro de um volume de controle. As equações governantes são integradas sobre cada volume de controle, tal que a quantidade relevante (massa, movimento, energia, etc.) é conservada para cada volume de controle.

Considere as equações de conservação da massa 4.1, movimento 4.2 e escalar 4.3 (a equação da energia apresenta-se na forma de um escalar), expressa em coordenadas cartesianas (as equações da continuidade, movimento e escalares foram discutidas no Capítulo 3):

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho U_j \right) = 0 \tag{4.1}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\rho U_{i}\right) + \frac{\partial}{\partial x_{j}}\left(\rho \mu U_{j}\right) = -\frac{\partial P}{\partial x_{i}} + \frac{\partial}{\partial x_{j}}\left(\mu_{ef}\left(\frac{\partial U_{i}}{\partial x_{j}} + \frac{\partial U_{j}}{\partial x_{i}}\right)\right) + S_{U_{i}}$$
(4.2)

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\rho\phi\right) + \frac{\partial}{\partial x_{j}}\left(\rho\mu\phi\right) = \frac{\partial}{\partial x_{j}}\left(\Gamma_{ef}\left(\frac{\partial\phi}{\partial x_{j}}\right)\right) + S_{\phi} \tag{4.3}$$

em que ρ é a massa específica do fluido, t é o tempo, U_i e U_j são os vetores velocidade, x_j é a componente espacial em coordenadas cartesianas, P é a pressão, μ_{ef} é a viscosidade efetiva do fluido, ϕ é um escalar qualquer, Γ_{ef} é a difusividade efetiva do escalar e S é o termo fonte.

4.2 Método dos Volumes Finitos com Base em Elementos Finitos

As Equações 4.1, 4.2 e 4.3 são as equações da continuidade, movimento e energia (está generalizada na forma de um escalar ϕ qualquer), respectivamente. Através da técnica dos volumes finitos (também denominado como método dos volumes de controle) é possível integrar essas equações sobre um volume de controle fixo no espaço. Assim, utilizando o teorema de divergência de Gauss¹ e integrando as equações supracitadas, obtém-se as Equações 4.4, 4.5 e 4.6 para conservação da massa, movimento e escalar, respectivamente.

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{v} \rho dv + \int_{s} \rho U_{j} dn_{j} = 0$$
(4.4)

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{v} \rho U_{i} dv + \int_{s} \rho U_{j} U_{i} dn_{j} = -\int_{s} P dn_{j} + \int_{s} \mu_{eff} \left(\frac{\partial U_{i}}{\partial x_{j}} + \frac{\partial U_{j}}{\partial x_{i}} \right) dn_{j} + \int_{v} S_{U_{j}} dv \quad (4.5)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{v} \rho \phi dv + \int_{s} \rho U_{j} \phi dn_{j} = \int_{s} \Gamma_{eff} \left(\frac{\partial \phi}{\partial x_{j}} \right) dn_{j} + \int_{v} S_{\phi} dv \tag{4.6}$$

¹Método utilizado para converter integrais de volume em integrais de superfície

onde $v \in s$ simbolizam integrais de volume e de superfície, respectivamente, e dn_j são as componentes cartesianas diferenciais do vetor normal externo à superfície. As integrais de superfície são integrações do fluxo, enquanto que as integrais de volume representam termos fontes ou de acúmulo.

O que define um volume de controle é um aspecto importante para a implementação do método dos volumes de controle. O domínio computacional é discretizado em elementos de fluxo e as superfícies destes volumes de controle são definidos pelos planos medianos de cada elemento. Esta abordagem tem sido utilizada por vários pesquisadores da área, tais como RONEL e BALIGA, (1979), SCHNEIDER e RAW, (1986) e SCHNEIDER e RAW, (1987).

Diante da introdução do conceito de elementos de fluxo, primeiramente é apresentada uma notação geométrica do elemento de fluxo, com seus planos medianos, para facilitar o entendimento na Seção 4.2.1. Posteriormente será retornado ao processo de discretização das equações de transporte na Seção 4.2.2.

4.2.1 Notação Geométrica

Elemento de fluxo é um figura hexaédrica tomada quase como um elemento finito. Para continuar a discussão, será necessário levar a conhecimento um termo denominado como função forma (*shape functions*) presente no método dos elementos finitos.

De acordo com este conceito de funções forma, uma variável ϕ varia com um elemento da seguinte forma:

$$\phi = \sum_{i=1}^{N_{no}} N_i \phi_i \tag{4.7}$$

onde N_i é a função forma para o nó $i \in \phi_i$ é o valor de ϕ no nó i.



Figura 4.1: Elemento de fluxo hexaédrico com oito nós

A somatória deve ser avaliada sobre todo o elemento. As propriedades principais da função forma incluem:

$$\sum_{i=1}^{N_{no}} N_i = 1 \tag{4.8}$$

Sendo no nó j,
$$N_i = \begin{cases} 1 \text{ para } 1 = j \\ 0 \text{ para } i \neq j \end{cases}$$

As funções forma (*shape functions*) lineares dos elementos utilizadas no $CFX - 5^{TM}$ são *s*, *t* e *u* que são as variáveis paramétricas. Por exemplo, considere o seguinte elemento de fluxo apresentado na Figura 4.1. Este elemento nada mais é que uma figura hexaédrica definida por oito nós adjacentes denotados por 1,2,...,8. Estes mesmos nós podem ser representados genéricamente por (i,j,k), (i+1,j,k), (i,j+1,k), (i+1,j+1,k), (i,j,k+1), (i+1,j,k+1), (i,j+1.k+1) e (i+1,j+1,k+1), ou ainda, como conjunto de índices binários (0,0,0), (1,0,0), (0,1,0), (1,1,0), (0,0,1), (1,0,1), (0,1,1) e (1,1,1).

A função forma tri-linear para cada nó presente na Figura 4.1 são:



Figura 4.2: Elemento de fluxo dividido em oito octantes sendo um destes removido

$$N1(s,t,u) = (1-s)(1-t)(1-u)$$

$$N2(s,t,u) = s(1-t)(1-u)$$

$$N3(s,t,u) = st(1-u)$$

$$N4(s,t,u) = (1-s)t(1-u)$$

$$N5(s,t,u) = (1-s)(1-t)u$$

$$N6(s,t,u) = s(1-t)u$$

$$N7(s,t,u) = stu$$

$$N8(s,t,u) = (1-s)tu$$

O elemento apresentado na Figura 4.1 é então dividido em 8 octantes conforme exposto na Figura 4.2.

A divisão em octantes apresentada na Figura 4.2 pode ser obtida por três planos definidos na variáveis paramétricas s = 0, 5, t = 0, 5 e u = 0, 5. Cada octante de um elemento de fluxo é associado com um nó. Assim, com esta breve definição de octantes, um volume de controle é definido por todos os octantes que dividem o mesmo nó. Cada face deste volume de controle contém quatro faces de octantes. Conseqüentemente, quatro pontos de integração, um para cada face do octante, são necessários para uma face do volume de controle. Todos os pontos de integração, juntamente com seus conjuntos binários, são apresentados na Figura 4.3.

Através do item (a) da Figura 4.3, um plano mediano aos nós paralelos ao eixo coordenado s é traçado. Notam-se ainda as quatro faces e seus **p**ontos de **i**ntegração, p.i., (os p.i. estão representados por **x**). Procedimentos análogos são realizados para os eixos coordenados t = 0, 5 e u = 0, 5, conforme exposto nos itens (b) e (c), respectivamente.



Figura 4.3: (a) p.i. nas faces dos octantes coincidentes com s = 0, 5, (b) p.i. nas faces dos octantes coincidentes com t = 0, 5, (c) p.i. nas faces dos octantes coincidentes com u = 0, 5

4.2.2 Discretização das Equações de Transporte

Apresentada a idéia de elemento de fluxo pode-se então retornar a questão de discretização numérica das Equações de continuidade (Equação 4.4), movimento (Equação 4.5) e escalar (Equação 4.6).

A introdução do conceito de elemento de fluxo, para discretização do domínio computacional, gera um volume de controle para cada nó tendo sua fronteira definida por oito segmentos em linha, para duas dimensões, e 24 superfícies quadriláteras para três dimensões. Este arranjo em duas dimensões é apresentado na Figura 4.4.



Figura 4.4: Definição de um volume de controle bidimensional

As equações integradas, Equações 4.4, 4.5 e 4.6, são aplicadas para cada volume de controle discretizado pela técnica dos elementos de fluxo. As integrais de volume são diretamente convertidas na forma discreta e são avaliadas no volume de controle como um todo. As integrais de superfície são avaliadas nos pontos de integração, p.i. para a completa conservação das equações contínuas dentro da sua forma discretizada. Os locais destes p.i. para um elemento de fluxo são apresentados na Figura 4.5 para um elemento bidimensional quadrilátero.

De maneira análoga, para um elemento tridimensional, um elemento de fluxo possui



Figura 4.5: Definição dos pontos de integração para um elemento 2-D quadrilátero8 octantes e 12 pontos de integração nas superfícies, conforme exposto na Figura 4.2.

A forma discretizada das equações integrais de massa, movimento e escalares (esta equação também representa a equação da energia) são então escritas como:

$$\rho V\left(\frac{\rho - \rho^o}{\Delta t}\right) + \sum_{p.i.} \left(\rho U_j \Delta n_j\right)_{p.i.} = 0 \tag{4.9}$$

$$\rho V\left(\frac{U_i - U_i^o}{\Delta t}\right) + \sum_{p.i.} \dot{m}_{p.i.} (U_i)_{p.i.} = \sum_{p.i.} (P\Delta n_i)_{p.i.} + \sum_{p.i.} \left(\mu_{ef} \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i}\right) \Delta n_j\right)_{p.i.} + \overline{S_{U_i}} V$$

$$(4.10)$$

$$\rho V\left(\frac{\phi-\phi^{o}}{\Delta t}\right) + \sum_{p.i.} \dot{m}_{p.i.}\phi_{p.i.} = \sum_{p.i.} \left(\Gamma_{eff}\frac{\partial\phi}{\partial x_{j}}\Delta n_{j}\right)_{p.i.} + \overline{S_{phi}}V$$
(4.11)

onde V é o volume de controle, o subscrito p.i. corresponde a **p**onto de integração, Δn_j representa o vetor unitário externo à superfície, Δt é o passo de tempo, o superescrito "o" refere-se ao passo de tempo anterior. O escoamento massico representado por $\dot{m}_{p.i.}$ através da superfíce presente nas equações é dado por:

$$\dot{m}_{p,i.} = \left(\rho U_j \Delta n_j\right)_{p,i.}^o \tag{4.12}$$

4.3 Termos Transientes

Para os termos transientes são utilizados o esquema de primeira ordem *backward Euler*, Equação 4.13, ou o esquema de segunda ordem *backward Euler*, Equação 4.14.

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\int_{v} \rho \phi dv \right) = \rho V \left(\frac{\phi - \phi^{o}}{\Delta t} \right) \tag{4.13}$$

onde o superescrito "o" representa o passo de tempo anterior.

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\int_{v} \rho \phi dv \right) = \frac{\rho V}{\Delta t} \left(\frac{2}{3} \phi - 2\phi^{o} + \frac{1}{2} \phi^{oo} \right)$$
(4.14)

onde os superescritos "o" representa o passo de tempo anterior (antigo passo de tempo) e o "oo" representa um passo de tempo anterior ao antigo passo de tempo.

Estes esquemas são robustos, totalmente implícitos, conservativos no tempo e não produzem limitações no passo de tempo.

4.4 Termos Convectivos

Para completa discretização dos termos convectivos, a variável $\phi_{p.i.}$ deve ser relacionada aos valores nodais de ϕ . A implementação dos termos convectivos no $CFX - 5^{TM}$ pode ser descrita da seguinte forma:

$$\phi_{p.i} = \phi_{seg} + \beta \nabla \phi \cdot \Delta \vec{r} \tag{4.15}$$

onde ϕ_{seg} representa o nó seguinte, $\nabla \phi$ é o gradiente de ϕ e \vec{r} é o vetor do nó seguinte ao p.i. (ponto de integração). Dependendo da escolha do valor de β é o esquema a ser utilizado. Uma vez que apenas um método de interpolação foi utilizado para tratar os termos convectivos, somente este será relatado neste trabalho. O esquema utilizado em todas as simulações foi o *High Resolution* onde o valor de β é computado próximo a 1. A experiência para o valor de β esta baseado nos trabalhos de BARTH e JESPERSON, (1989). O esquema é de grande acurácia (reduz para primeira ordem, $\beta = 0$, próximo as descontinuidade e nos escoamentos livres onde há poucas variações) e robusto. O valor de β pode ter a dimensão até $\sqrt{3}$ devido ao \vec{r} .

4.5 Termos Difusivos

Seguindo a aproximação padrão pelos elementos finitos, as funções forma (*shape functions*) são utilizadas para avaliar as derivadas para todos os termos difusivos. Por exemplo, para a derivada na direção x no p.i.,

$$\frac{\partial \phi}{\partial x}|_{p.i.} = \sum_{n} \frac{\partial N_n}{\partial x}|_{p.i.}\phi_n \tag{4.16}$$

A somatória é sobre todas as *shape functions* do elemento. As derivadas cartesianas das *shape functions* podem ser expressas pelas suas derivadas locais via Jacobiano ((GUIA CFX, , 2003)):

$\frac{\partial N}{\partial x}$		$\frac{\partial x}{\partial s}$	$rac{\partial y}{\partial s}$	$\frac{\partial z}{\partial s}$	$\frac{\partial N}{\partial s}$
$\frac{\partial N}{\partial y}$	=	$\frac{\partial x}{\partial t}$	$rac{\partial y}{\partial t}$	$rac{\partial z}{\partial t}$	$\frac{\partial N}{\partial t}$
$\frac{\partial N}{\partial z}$		$\frac{\partial x}{\partial u}$	$rac{\partial y}{\partial u}$	$\frac{\partial z}{\partial u}$	$\frac{\partial N}{\partial u}$

Os gradientes da função forma podem ser avaliados na atual localização de cada p.i. (*true tri-linear interpolation*), ou na localização de intersecção de cada p.i. da superfície com a aresta do elemento (linear-linear interpolation).

4.6 Gradiente de Pressão

A integral de superfície do gradiente de pressão, presente na equação de movimento (*momentum*), envolve a avaliação da da expressão:

$$(P\Delta n_{p.i.})_{p.i.} \tag{4.17}$$

A obtenção de $P_{p.i.}$ é utilizando shape functions:

$$P_{p.i.} = \sum_{n} N_n(s_{p.i.}, t_{p.i.}, u_{p.i.}) P_n$$
(4.18)

Assim como no termo difusivo, a função forma utilizada para interpolar a pressão P pode ser avaliada na atual localização de cada p.i. (*true tri-linear interpolation*), ou na localização de intersecção de cada p.i. da superfície com a aresta do elemento (*linear-linear interpolation*).

4.7 Acoplamento Pressão Velocidade

O CFX^{TM} utiliza-se de uma única célula. Este arranjo é conhecido como colocalizado e é um mecanismo para superar o desacoplamento entre pressão e velocidade presente nos arranjos onde as células estão deslocadas. Uma representação unidimensional da conservação da massa pode ser escrita como:

$$\left(\frac{\partial U}{\partial x}\right)_i + \frac{\Delta x^3 A}{4\dot{m}} \left(\frac{\partial^4 P}{\partial x^4}\right)_i = 0 \tag{4.19}$$

onde $\dot{m} = \rho U_j \Delta n_j$

A equação da continuidade é uma aproximação por diferenças centrais de segunda ordem aproximada por uma derivada de primeira ordem na velocidade, modificada por uma derivada de quarta ordem na pressão que age como um redistribuidor da influência da pressão. Este método é bastante robusto no referente a mudanças bruscas na pressão ou ação de forças de campo.

4.8 Compressibilidade

Retornando à equação discretizada da continuidade (Equação 4.9). Utilizando a linearização pelo método de Newton-Raphson, o acoplamento pressão/velocidade para escoamentos incompressíveis e o acoplamento pressão/densidade para escoamentos compressíveis são modelados pela seguinte aproximação do escoamento mássico:

$$(\rho U)^n A \approx \rho^n U^o A + \rho^o U^n A - \rho^o U^o A \tag{4.20}$$

onde o superescrito "n" refere-se a nova iteração e o "o" a antiga iteração. tanto os novos termos de densidade quanto o de velocidade são ativamente modelados para escoamentos compressíveis em qualquer número de Mach.

Capítulo 5

Técnicas de Fluidodinâmica em Fornos da Indústria Cimenteira

Neste capítulo serão apresentadas algumas características geométricas do forno rotativo para produção de cimento, bem como o detalhamento das peças individualmente que constituem o corpo do forno. Também serão mencionadas as condições utilizadas durante a simulação, tais como estratégias iniciais de simulação e os estudos de casos escolhidos para esta investigação científica.

5.1 Geometria e Malha Computacional

Dentre as várias etapas existentes no processo de produção de cimento, o forno rotativo constitui o elemento fundamental em uma usina de cimento, sendo este equipamento o local onde ocorre a reação de formação do *clínquer*. Necessariamente um eficiente projeto aerodinâmico do maçarico (queimador) é muito importante para se alcançar a qualidade desejável no processo de oxidação¹ do combustível utilizado para formação da chama dentro do forno, bem como uma boa sintonia entre as condições operacionais tais como vazão de ares primário e secundário para promover uma combustão eficiente. Esta combustão é a responsável pelo fornecimento de calor necessário para os processos físicos e químicos na produção do *clínquer*.

O forno rotativo pode ser dividido, para fins didáticos, em duas partes distintas, a saber: a câmara onde ocorre a reação de combustão responsável pela geração de calor e a reação de clinquerização para formação do clínquer, e a capela a qual é a responsável pela admissão dos ares primário e secundário.

A Figura 5.1 expõe uma foto onde é possível observar um forno rotativo em operação.



Figura 5.1: Forno rotativo em operação

A primeira etapa no estudo sobre o processo de combustão no interior do forno consistiu na construção da geometria com base em dados de dimensões reais de uma planta em operação fornecidas por uma empresa do setor. A geometria foi criada utilizando o

 $^{^1\}mathrm{Neste}$ trabalho é a reação de combustão

pacote CFX^{TM} com a utilização do seu módulo CAD (*Build*). A segunda etapa foi "exportar" esta geometria para um novo pacote para a construção da malha computacional do tipo hexaédrica na qual, neste trabalho, foi elaborada com o uso do $ICEM^{TM}$ utilizando a técnica multi-blocos. Na Figura 5.2 é apresentado o conjunto geometria e malha computacional utilizadas neste trabalho.

A simulação tridimensional simultânea entre o maçarico e a câmara é extremamente complicada, principalmente devido à diferença de dimensão entre ambos e à complexidade geométrica do maçarico, onde este, por ser muito menor, exige uma malha muito mais refinada que a requerida pela câmara. No entanto, uma vez que ambos estejam conectados e as malhas de ambos sejam coincidentes, requer-se um refinamento também da malha da câmara na região que estende-se à partir da junção. Requer-se também um refinamento da malha nas regiões de escoamento complexo como as de reversão e de circulação. Ao mesmo tempo, a complexidade geométrica dos maçaricos necessita de um grande número de blocos e células para a construção de sua malha.

O forno em estudo, Figura 5.2, é composto da capela e uma câmara de combustão em formatos cilíndricos. A câmara, onde ocorre a reação de combustão do combustível e a reação de formação do *clínquer*, tem 63 metros de comprimento e apresenta uma inclinação equivalente a 3% em relação ao seu comprimento. Esta inclinação é necessária, pois permite que o material reagente, necessário para formar o *clínquer*, escoe por simples ação da gravidade. A capela, onde está centrado o maçarico, encontra-se localizada na extremidade esquerda sendo a responsável pela admissão do ar primário e secundário. Na outra extremidade do forno tem-se a saída dos gases provenientes da combustão, sendo esta extremidade também a responsável pela entrada da matéria-prima que originará o clínquer. A malha final (*grid*), empregada na Figura 5.2, tem aproximadamente 900.000 elementos hexaédricos o que representa um problema bastante significativo em termos de dimensão de malha para os *hardware* e *software* atuais. As próximas figuras trazem maiores detalhes referentes às malhas da capela e da câmara de combustão utilizadas nesta simulação juntamente com uma discussão do porquê da dimensão da malha empregada.



Figura 5.2: Geometria e malha do forno rotativo utilizada na simulação

Na Figura 5.3 é possível visualizar a malha da câmara de combustão isoladamente. O diâmetro interno da câmara de combustão é de 4,40 metros circundado por uma parede refratária adicional com espessura de 0,20 metros, o que resulta em um diâmetro final da câmara de 4,80 metros.



Figura 5.3: Geometria e malha da câmara de combustão

Observe que a câmara de combustão, Figura 5.3, apresenta uma malha mais refinada na extremidade esquerda, região esta onde há a conexão da capela com a câmara. À medida que se dirige para a região central da câmara, região onde o perfil de escoamento é mais uniforme ², a malha vai se tornando mais espaçada ("grosseira"). Este procedimento de refinamento na malha, próximo à região da capela, foi adotado com a intenção de captar o violento processo de expansão que os gases sofrem ao saírem das peças do maçarico, as

 $^{^2\}mathrm{Sem}$ a presença de grandes escoamentos reversos



Figura 5.4: Geometria e malha da capela simuladas

quais são dotadas de pequenas áreas, e entrarem na câmara de combustão que possui uma área aproximadamente 380 vezes maior que área de qualquer umas das peças que compõem o maçarico.

Na extremidade esquerda da Figura 5.2 encontra-se, como mencionado anteriormente, a capela por onde são admitidos o ar primário e o secundário. Uma visão mais detalhada da capela pode ser encontrada na Figura 5.4.

Na Figura 5.4 é possível observar a entrada para o ar secundário e também um orifício central que fornece acesso ao conjunto de peças que constituem o maçarico, responsável pela admissão do ar primário. O ar primário é aquele que está passando pelo maçarico e que contribui para a propagação da chama nas direções axiais e radiais. Já o

70 _

ar secundário é aquele que entra pela periferia do maçarico, e é o responsável, devido a sua elevada temperatura, pelo aquecimento das correntes de ar primário e combustível que ganham a câmara através do maçarico.

O maçarico, neste trabalho, é constituído de cinco peças sendo que cada uma é responsável pela contribuição na direção-sentido do escoamento do ar e do combustível. A Figura 5.5 apresenta como estão dispostas as peças que formam o maçarico.

Através do maçarico o combustível, juntamente com o ar, são injetados para o interior da câmara de combustão. A principal função de um queimador é promover uma mistura eficiente entre o ar e o combustível, de tal maneira que a chama seja estável. Neste trabalho o maçarico foi simulado utilizando combustível gasoso, porém este equipamento encontra-se operando, na unidade fábril, com combustível sólido. Segundo vários autores, entre eles LIXING, (1993) e ?, devidos cuidados devem ser tomados ao trabalhar com combustíveis sólidos ou líquido.

Segundo LIXING, (1993), para combustíveis líquidos um fator imprescindível, que deve ser levado em consideração, no processo de combustão, é a etapa de vaporização das gotículas do líquido, uma vez que, a maioria dos processos de combustão ocorrem em fase gasosa e não em fase líquida sendo, portanto, a taxa de reação ³ controlada por mecanismos difusivos. Tal fato está relacionado à temperatura na superfície livre da gotícula líquida do combustível ser menor que a sua temperatura de ebulição que, por sua vez, é menor que a temperatura de ignição da mistura combustível-comburente.

Para os combustíveis sólidos, conforme apresentado por LIXING, (1993), o processo de combustão convencional envolve as etapas de pré-aquecimento e desvolatização das partículas sólidas. Ao contrário do que ocorre com os combustíveis líquidos, a reação de combustão já ocorre na superfície do sólido uma vez que a temperatura de fusão e/ou

 $^{^{3}}$ Pode envolver além dos mecanismos cinéticos também os difusivos

sublimação do mesmo é rigorosamente superior à temperatura de ignição da mistura combustível-comburente. Desta maneira, a taxa de combustão para um sólido é freqüentemente controlada pelos mecanismos cinético e difusivo, ao invés, de um puro controle por mecanismo difusivo, como ocorre com combustíveis líquidos.

O queimador deve, além de promover a mistura eficiente, dosar o combustível e o ar em proporções que estejam dentro dos limites de flamabilidade para a ignição e para uma queima estável. Também é função deste equipamento garantir que não haverá retorno de chama e nem seu deslocamento.

Visualizando a Figura 5.5, referente à malha do maçarico industrial simulado, no sentido de fora para dentro, as peças são denominadas de ar axial (Peça 1), ar radial (Peça 2), ar de transporte (Peça 3), ar central (Peça 4) e caneta de óleo (Peça 5), que podem ser visualizadas individualmente nas Figuras 5.6, 5.7, 5.8, 5.9 e 5.10, respectivamente.

Um detalhamento sobre as medidas geométricas de todas as peças além de impraticável também não são permitidas, já que trata-se de uma equipamento de cunho industrial que se encontra atualmente em operação. No entanto, para ter uma concepção da dimensão geométrica, a Tabela 5.1 fornece as áreas circulares da entrada de cada uma das peças apresentadas na Figura 5.5.

As peças 1,3,4 são as responsáveis pelo escoamento na direção axial, enquanto que a peça 2 contribui na direção radial formando o efeito de giro (*"swirl"*) no escoamento que é responsável, ao mesmo tempo, pela redução no comprimento da chama e pelo aumento do seu diâmetro (Para maiores detalhes de como induzir "giros" ao escoamento verificar página 11 do Capítulo 2).

A peça 5, chamada de caneta de óleo, é usualmente empregada para dar partida no forno sendo desativada quando o processo entra em regime permanente. Portanto, neste trabalho a peça 5 não apresenta fluido escoando em seu interior. Todas as peças apresentam



Figura 5.5: Disposição das peças que constituem o maçarico industrial utilizado nas simulações

uma restrição na área de saída em relação a de entrada, provocando desta maneira uma aumento significativo na velocidade de saída dos gases.

Peça	Área ($10^{-3}m^2$)
Peça 1 - Ar Axial	24,6687
Peça 2 - Ar Radial	38,021
Peça 3 - Ar Transporte	24,2669
Peça 4 - Ar Central	39,7603

Tabela 5.1: Área da entrada circular das peças que formam o maçarico



Figura 5.6: Malha peça 1 (Ar Axial) que forma o maçarico



Figura 5.7: Malha peça 2 (Ar Radial) que forma o maçarico



Figura 5.8: Malha peça 3 (Ar Transporte) que forma o maçarico



Figura 5.9: Malha peça 4 (Ar Central) que forma o maçarico



Figura 5.10: Malha da peca 5 - (caneta de óleo) que forma o maçarico
5.2 Condições Iniciais e de Contorno

As condições iniciais utilizadas foram, para os primeiros testes, fornecidas pela empresa interessada. Em seguida, novas condições foram implementadas para visualizar o comportamento fluidodinâmico e térmico dentro da câmara de combustão e na parede refratária do forno, sendo que os parâmetros alterados foram as vazões de ar axial e ar radial bem como a fração massica do combustível. Estas modificações nas condições iniciais, juntamente com modelos de turbulência, formam os estudos de caso para esta pesquisa. As variações nestas condições iniciais podem ser encontradas, resumidamente, nas Tabelas que vão de 5.2 à 5.5. Quanto as condições de contorno, estas foram colocadas de maneira a representar, com maior realidade, as condições físicas encontradas no ambiente onde o equipamento opera. É importante ressaltar que os modelos de turbulência empregados para cada estudo de caso serão apresentados, juntamente com os resultados, no Capítulo 6.

5.2.1 Condições Iniciais

As condições iniciais estão dispostas na forma de tabelas ou ao longo do texto. As Tabelas 5.2 a 5.5 apresentam as vazões massica em cada peça do maçarico, bem como a temperatura da corrente e frações massicas dos componentes. As três primeiras colunas trazem o nome da corrente na referida peça, a vazão massica e a temperatura desta corrente, respectivamente. As duas últimas colunas relacionam as composições massicas do ar e do metano na entrada do maçarico (ar primário) e do ar secundário.

As Tabelas 5.2 a 5.5 diferem entre si no que se referem às vazões de ar axial (Peça 1) e ar radial (Peça 2) e nas frações massicas do metano no ar de transporte (Peça 3). As vazões massicas do ar axial e radial são alteradas de modo que o ar radial é duplicado ou triplicado em relação ao valor inicial proposto pela empresa. No entanto, ao mesmo tempo, o ar axial vai sendo subtraído no mesmo valor numérico do aumento do ar radial, de maneira que a soma dos ares axial e radial conserve o mesmo valor em todos os casos. Desta forma, se for realizada a soma das correntes de ares axial e radial em todas as Tabelas 5.2 a 5.5, a soma sempre apresentará a mesma quantia de 1,5848kg/s.

As condições iniciais foram trabalhadas de tal modo que suas alterações constituiram estudos de caso juntamente com o de modelo de turbulência empregado. As vazões de entrada de todas as peças, tanto para o ar como para o combustível, frações massicas dos componentes e as temperaturas das correntes envolvidas foram primeiramente repassadas pela empresa interessada no projeto, e estão reunidas na Tabela 5.2 a qual foi tomada como primeiro estudo de caso (Estudo de caso 1).

As frações massicas do ar de combustão foram de 0,223 de oxigênio (O_2) e 0,777 de nitrogênio (N_2) , em todos os casos, como pode ser verificado nas Tabelas de 5.2 a 5.5. Já as frações massicas do combustível, na corrente de ar de transporte (Peça 3), em uma primeira etapa, Tabela 5.2, foi de 0,500 para o metano (CH_4) e 0,500 para o nitrogênio (N_2) , sendo que na etapa seguinte, Tabelas 5.3, 5.4 e 5.5, foram alteradas para 100% de metano.

Corrente	Vazões (kg/s)	Temperatura (K)	Y_{O2}	Y_{CH4}
Ar - Axial	1,3988	330	0,223	0,000
Ar - Radial	0,1860	330	0,223	0,000
Ar - Transporte	0,7350	330	0,000	0,500
Ar - Central	0,2633	330	0,223	0,000
Ar - Secundário	22,4602	1223	0,223	0,000

Tabela 5.2: Condições iniciais - Estudo de caso 1

O passo seguinte foi manter os mesmos valores das correntes apresentes na Tabela 5.2, porém alterar a fração massica do combustível. Esta alteração consistiu na admissão de metano puro na corrente de ar de transporte (Peça 3) ao invés da fração massica de 50% de metano (CH_4) e restante de nitrogênio (N_2). A Tabela 5.3 expõe esta nova condição inicial constituindo, desta maneira, o segundo estudo de caso (Estudo de caso 2).

Corrente	Vazões (kg/s)	Temperatura (K)	Y_{O2}	Y_{CH4}
Ar - Axial	1,3988	330	0,223	0,000
Ar - Radial	0,1860	330	0,223	0,000
Ar - Transporte	0,7350	330	0,000	1,000
Ar - Central	0,2633	330	0,223	0,000
Ar - Secundário	22,4602	1223	0,223	0,000

Tabela 5.3: Condições iniciais - Estudo de caso 2

Comparando a Tabela 5.3 com a Tabela 5.2 é possível observar que as vazões massicas são as mesmas, porém com mudanças na fração massica do combustível na corrente de transporte (Peça 3).

Uma nova condição, imposta em relação à apresentada na Tabela 5.3, é agora referente à vazão massica nas Peças 1 e 2, que se referem aos ares axial e radial, respectivamente. A vazão do ar radial é duplicada, ou seja, é alterada de 0, 1860 para 0,3720kg/s. No entanto, a vazão massica do ar axial diminui na quantia de 0,1860kg/s para que a vazão total somada dos ares axial e radial permaneça constante e igual a 1,5848kg/s. Esta nova condição inicial, está apresentada na Tabela 5.4 resultando em um novo estudo de caso (Estudo de caso 3).

Uma outra alteração nas vazões dos ares axial e radial ainda foi proposta. A vazão do ar radial é triplicada, ou seja, alterada de 0,1860, como apresentada na Tabela 5.2, para 0,558kg/s. Conseqüentemente, a vazão massica do ar axial diminui na quantia de 2 * 0,1860kg/s, o que resulta no valor de 1,0268kg/s para que a vazão total somada dos ares axial e radial permanecesse constante e igual a 1,5848kg/s. Esta nova condição inicial

Corrente	Vazões (kg/s)	Temperatura (K)	Y_{O2}	Y_{CH4}
Ar-Axial	1,2128	330	0,223	0,000
Ar - Radial	0,3720	330	0,223	0,000
Ar - Transporte	0,7350	330	0,000	1,000
Ar - Central	0,2633	330	0,223	0,000
Ar - Secundário	22,4602	1223	0,223	0,000

Tabela 5.4: Condições iniciais - Estudo de caso 3

está reunida na Tabela 5.5, e constitui o novo estudo de caso (Estudo de caso 4).

Corrente	Vazões (kg/s)	Temperatura (K)	Y_{O2}	Y_{CH4}
Ar-Axial	1,0268	330	0,223	0,000
Ar - Radial	0,5580	330	0,223	0,000
Ar - Transporte	0,7350	330	0,000	1,000
Ar - Central	0,2633	330	0,223	0,000
Ar - Secundário	22,4602	1223	0,223	0,000

Tabela 5.5: Condições iniciais - Estudo de caso 4

Com relação às condições iniciais da energia cinética turbulenta, k, e sua dissipação, ϵ , foram adotadas em todos os casos, respectivamente, como sendo $0,002v^2$ e $k^{1,5}/0,3d$ (KHALIL e SPALDING, , 1975), sendo v a velocidade de entrada e d o diâmetro hidráulico, onde o diâmetro hidráulico é definido como $4.A_{entrada}/Per_{entrada}$, em que $A_{entrada}$ é a área de entrada do fluido e $Per_{entrada}$ é o seu perímetro. No referente à pressão inicial, esta foi inserida como ambiente, no valor de 101.325*Pa*.

É importante ressaltar que para este projeto quatro equações de transporte, conforme a Equação 3.60, são resolvidas para as espécies CH_4 , O_2 , CO_2 e H_2O . Como o N_2 é um componente de restrição, para este caso, há 5 espécies químicas a serem determinadas, porém apenas 4 equações de transporte são necessárias. Para encontrar a composição massica do nitrogênio, o pacote utiliza-se da Equação 5.1:

$$Y_{N_2} = 1 - \sum_{i} Y_i \tag{5.1}$$

onde i representa as demais espécies químicas envolvidas.

5.2.2 Condições de Contorno

As condições de contorno adotadas foram inseridas na tentativa de representar, de maneira mais próxima possível, as condições físicas na qual o equipamento opera na planta industrial. As paredes do equipamento foram consideradas na condição padrão de nãodeslisantes e com um fator de **emissividade** igual a 1⁴. O coeficiente de absorção dos gases foi estimado como sendo o valor unitário.

Na saída da câmara de combustão foi adotada a condição de contorno do tipo aberta (opening) o que permitia tanto a saída como a entrada de componentes. Para evitar que oxigênio⁵ entrasse por esta saída e conseqüentemente alterasse as condições de queima do combustível, foi selecionada a opção que permitia somente a entrada de nitrogênio (N_2) , uma vez que trata-se de um elemento inerte, neste trabalho, no processo de combustão.

O refratário utilizado como isolante térmico, constituído de tijolo do tipo *brick* fireclay do banco de dados do CFX^{TM} , apresenta uma condutividade térmica de $1W/m \cdot K$, densidade de $2645kg/m^3$ e calor específico de $960J/kg \cdot K$.

As condições do ambiente externo foram de temperatura igual a 298Kelvin (25[•]Celsius), coeficiente convectivo de $30,0W/m^2 \cdot K$ e pressão igual $101.325Pa \simeq 1bar$.

⁴Corpo negro

⁵Elemento que participa ativamente da reação de combustão - elemento oxidante

5.3 Combustão do Gás Metano e Avaliação da P.E.Ar

Neste trabalho somente o metano (CH_4) foi avaliado como combustível e utilizando uma reação simples irreversível. A justificativa no que se refere à utilização de apenas um combustível para testes está no fato de que o esforço computacional foi bastante considerável o que resultou em um elevado tempo de simulação, em torno de vários dias, o que impossibilitou testes com mais combustíveis. No que se refere à escolha do metano para testes, está no fato do Brasil possuir grandes reservas de gás natural. Segundo a Petrobrás (fonte: (GARCIA , , 2002)) as reservas estão estimadas em mais de 400 bilhões de m^3 . Sabe-se também que o gás metano é o principal constituinte deste gás natural com uma composição em volume de 80 a 90%.

$$CH_4 + 2O_2 \rightarrow CO_2 + 2H_2O \tag{5.2}$$

Este mecanismo de reação, apresentado na Equação 5.2, é o mais simplificado possível e esta implementado em uma biblioteca de propriedades no banco de dados do CFX^{TM} , sendo que suas propriedades físicas e químicas não serão abordadas neste traba-lho.

O levantamento a seguir é para verificar o quanto de excesso de comburente está presente nas condições de operação apresentadas nas Tabelas 5.2 a 5.5. Para obter tal informação, primeiramente, é necessário definir o termo conhecido na combustão como razão de equivalência. Este termo, simbolizado neste trabalho pela letra grega maiúscula Φ , é definido como a razão entre a mistura ar e combustível real e a mistura ar e combustível estequiométrica (teórica) de reação (PERRY e CHILTON , 1998). Em termos de fração

massica Y, a razão de equivalência pode ser escrita da seguinte forma:

$$\Phi = \frac{Y_{combustivel}/Y_{Ar}}{(Y_{combustivel}/Y_{Ar})_{estequiometrico}}$$
(5.3)

85

em que Y_{ar} e $Y_{combustivel}$ são as frações massicas do ar e do combustível, respectivamente.

O comburente⁶ utilizado na maioria dos casos é o ar atmosférico, e portanto, além do oxigênio, que é o composto oxidante de interesse, há também o nitrogênio que neste caso especificamente, funciona como um inerte na reação 5.2. No entanto, é necessário levar em conta a massa do nitrogênio no cálculo da razão de equivalência. Portanto a Equação 5.2 pode ser reescrita da seguinte forma:

$$CH_4 + 2(O_2 + 3,76N_2) \rightarrow CO_2 + 2H_2O + 2*(7,52)N_2$$
 (5.4)

Para obter o valor de $Y_{combustivel}$ e Y_{ar} , necessário para calcular a razão de equivalência através da Equação 5.3, utiliza-se das Equação 5.5 e 5.6, respectivamente:

$$Y_{combustivel} = \frac{MassaCombustivel}{MassaTotal}$$
(5.5)

$$Y_{ar} = \frac{MassaAr}{MassaTotal}$$
(5.6)

onde MassaCombustivel é a massa de metano (CH_4) , MassaAr é a massa do ar atmosférico e MassaTotal é a soma das massas de combustível e de ar.

Para exemplificação de cálculo da razão de equivalência, considere os dados apresentados na Tabela 5.3. O valor da massa de combustível, (CH_4) puro, encontrado é de

 $^{^6\}mathrm{O}$ reagente oxidante, que neste caso é o O_2 presente no ar atmosférico

0,7350kg e a massa de ar 24,3083kg o que resulta numa massa total⁷ de 25,0433kg. Com estes dados, os valores de $Y_{combustivel}$ e Y_{ar} são, respectivamente:

$$Y_{combustivel} = \frac{0,7350}{25,0433} \approx 0,0294 \tag{5.7}$$

$$Y_{ar} = \frac{24,3083}{25,0433} \approx 0,9707 \tag{5.8}$$

Com base nos resultados das Equações 5.7 e 5.8, a razão $Y_{combustivel}/Y_{ar}$ presente no numerador da Equação 5.3 fornece um valor de 0,0302. No entanto, sabe-se que o denominador da Equação 5.3 é aproximadamente igual a 0,0583, para a razão teórica entre a frações massicas do combustível e do ar. Substituindo estes valores na Equação 5.3 o resultado final da razão de equivalência é de 0,5183. Com este valor obtido e observando a Equação 5.3 concluí-se que há excesso de ar na reação de combustão em questão.

Para uma maior percepção deste excesso na corrente de ar, pode-se calcular a porcentagem de excesso do mesmo através da Equação 5.9:

$$P.E.Ar = \frac{100}{\Phi} - 100 \tag{5.9}$$

onde P.E.Ar é a abreviação de **P**orcentagem de **E**xcesso de **A**r.

Aplicando a razão de equivalência Φ , obtida para a Tabela 5.3, através da Equação 5.3, a porcentagem de excesso de ar (P.E.Ar) resultante é de, aproximadamente, 92,9% de acordo com a Equação 5.9.

Como a vazão massica de ar, admitida através das peças do maçarico e do ar secundário, é mantida constante e igual a 24,3083kg/s e a vazão do combustível, também

 $^{^7\}mathrm{Massa}$ do combustível somada à massa de ar

mantida constante e igual a 0,7350kg/s ou metade deste valor, o excesso de ar é constantemente elevado, apresentando um número maior que 90,0% em todos os casos. Convém lembrar que, de posse deste elevado excesso da corrente de ar, a variação da razão de equivalência, Φ , não foi trabalhada nos estudos de caso e apenas foi apresentada nesta seção para que o leitor pudesse ter o conhecimento da dimensão do excesso de ar em que se trabalha em um forno para produção de cimento.

Capítulo 6

Resultados e Discussões

Neste capítulo, serão apresentados os resultados numéricos provenientes das simulações efetuadas com o auxílo do código computacional CFX^{TM} , versões 5.5.1 e 5.6. Os estudos foram realizados para escoamento monofásico, multi-componente, turbulento, reativo e com transferência de calor sob regime transiente em um forno para produção de cimento.

O capítulo encontra-se dividido em quatro tópicos principais, a saber: Estratégias de Solução, Influência do Modelo de Turbulência, Influência da Carga do Combustível e Influência do Ar Radial no Formato da Chama. Com tais tópicos procurou-se englobar as condições iniciais listadas através das Tabelas 5.2 a 5.5, tratadas na Seção 5.2 do Capítulo 5. Além das condições iniciais designadas como estudos de caso 1,2,3 e 4, foram realizados, para cada um dos casos, testes envolvendo dois modelos de turbulência: $k - \epsilon$ padrão e o tensores de Reynolds (RSM¹) apresentados na Seção 3.10 do Capítulo 3. Estes testes numéricos foram realizados com a intenção de investigar a influência do modelo de turbulência no comportamento do escoamento reativo.

Primeiramente serão apresentadas as principais dificuldades encontradas durante

 $^{^1\}mathrm{Reynolds}$ Stress Model

as simulações no tópico intitulado como Estratégias de Solução. Os tópicos seguintes designados como Influênica do Modelo de Turbulência, Influência da Carga do Combustível e Influência do Ar Radial no Formato da Chama, apresentarão resultados e comparações relatadas da seguinte forma:

- Perfis de velocidade dos gases de combustão em forma de mapas, iso-superfícies e vetores tanto na região ao longo da câmara de combustão quanto em secções transversais da mesma;
- Perfis de temperatura ao longo da parede refratária; Gráficos em coordenadas x y da temperatura em 2 secções transversais e na direção axial da câmara de combustão. Além disso, é exposta uma iso-superfície para temperatura de chama, assim como um mapa da intensidade de radiação da mesma;
- Mapas da concentração das espécies oxigênio e metano na região próxima ao maçarico.
 Ainda referente as espécies químicas, gráficos em coordenadas x y, ao longo da câmara de combustão, expõem os perfis de concentração.

6.1 Estratégias de Solução

As simulações, tendo como objeto de estudo um forno da indústria cimenteira, foram realizadas em diversas etapas devido às dificuldades encontradas na convergência dos resultados. Os resultados obtidos após cada simulação foram sendo reutilizados para dar reinício a novas simulações, sendo que a simulação posterior sempre acoplava mais um fenômeno à simulação anterior. Inicialmente, foi necessária a condição mais simples possível como, entrada apenas de ar, sem transferência de calor, sem combustão e em regime permanente. Obtidas as soluções iniciais destes fenômenos considerados, novos processos foram sendo adicionados, sequencialmente, e novamente simulados. Toda esta etapa realizada antes de inserir o processo de combustão estendeu-se por, aproximadamente, um mês até que se chegasse a um resultado que levasse em consideração o escoamento com transferência de calor.

Com a inserção do fenômeno da combustão nas simulações, a convergência tornouse muito mais complicada, talvez devido aos intensos gradientes impostos pela taxa de liberação de energia pela combustão. Conforme já mencionado na Seção 5.3 do Capítulo 5, as simulações foram estabelecidas para combustão do gás metano (CH_4) representado pelo mecanismo de reação:

$$CH_4 + 2O_2 \rightarrow CO_2 + 2H_2O \tag{6.1}$$

O passo de tempo utilizado inicialmente, com a reação de combustão inserida, foi da ordem de 10^{-5} segundos para que a simulação não divergisse. Este passo de tempo, relativamente reduzido, foi indispensável para que o problema não divergisse, o que tornou o avanço no tempo de simulação extremamente lento². Contudo, seus resultados parciais possibilitaram a utilização de passos mais elevados da ordem de 10^{-3} segundos. Com este novo passo de tempo, cada experimento numérico levou, aproximadamente, de 15 a 25 dias para simular 10 segundos de tempo real.

As soluções numéricas de todos os casos simulados neste trabalho, sejam estas com ou sem combustão, foram obtidos empregando o esquema de interpolação "High Resolution" para todas as equações de conservação. Quanto aos modelos de turbulência, devido às dificuldades de convergência, foi necessário iniciar as simulações com o modelo isotrópico $k - \epsilon$ padrão. Os resultados obtidos com este modelo foram então utilizados como arquivo

²Mais de 20 dias de simulação para simular menos de 1 segundo de tempo real em máquinas utilizandose de processamento paralelo (P.V.M.) com velocidades de processamento da ordem de 2,7 GHz/cada em plataformas operacionais Linux e Windows NT

de inicialização para as simulações que empregava o modelo dos tensores de Reynolds, modelo este anisotrópico.

Nas etapas seguintes serão apresentados os resultados, juntamente com comparações entre os estudos de caso, das simulações envolvendo o fenômeno de combustão e transferência de calor. Na Seção 6.2 é realizada, utilizando-se somente o estudo de caso 1, uma comparação entre os resultados com a finalidade de verificar a influência do modelo de turbulência empregado.

6.2 Influência do Modelo de Turbulência

Para investigar a influência do modelo de turbulência no escoamento dos gases, no perfil de temperatura e formato de chama, foram considerados para estudos os dados referentes ao estudo de caso 1, reunidos na Tabela 5.2 da Seção 5.2 do Capítulo 5. Primeiramente serão apresentados e discutidos os resultados obtidos com o uso do modelo $k - \epsilon$. Em seguida serão expostos os resultados adquiridos com a utilização do modelo RSM, juntamente com uma breve discussão, buscando salientar as principais diferenças nos resultados do uso dos dois modelos.

Cabe ressaltar que apenas alguns resultados serão expostos neste tópico, sendo que os mesmos fornecerão, de forma concisa, as análises realizadas neste trabalho.

Também é importante salientar que as explicações sobre escalas de cores, posicionamento das figuras e tudo mais que tenha relação de como foram construídos os gráficos e mapas dos resultados, somente serão descritos nesta Seção 6.2.1, com o objetivo de evitar repetições cansativas ao longo do texto, uma vez que foram adotados os mesmos critérios para montagem dos resultados. Também cabe ressaltar que as escalas das figuras não se encontram padronizadas por motivos de qualidade de imagem e também para poder captar as menores escalas.

6.2.1 Utilizando o Modelo $k - \epsilon$ de Turbulência

Inicia-se as análises pela Figura 6.1, que apresenta uma noção do caminho percorrido pelos jatos de ar ao saírem do maçarico através de um mapeamento vetorial da velocidade dos gases. Este mapeamento esta inserido no plano y - z na coordenada x = 0. Devido às limitações na qualidade de imagem, somente uma porção³ do forno foi exposta para análise. A escala de velocidade está entre -2 e 25m/s para os limites inferior e superior, respectivamente. No lado esquerdo da figura encontra-se a entrada dos gases através da capela, como mostra o sentido dos vetores. Na região do eixo central axial do plano, apresentando uma coloração vermelho acentuada, encontra-se uma maior velocidade dos gases e, à medida que se aproxima da parede do forno, a velocidade vai decrescendo até o valor zero junto à parede. Observando o mapa vetorial, é possível verificar regiões de grandes gradientes de velocidade, tais como o observado logo abaixo da saída do maçarico. Também são visíveis as oscilações na velocidade ao longo do forno, representado pela alteração de direção dos vetores. Junto à parede da câmara, próximo à saída dos gases do maçarico, observa-se que o escoamento divide-se em dois, onde uma das partes forma a recirculação acima e abaixo do eixo central do plano traçado e a outra parte segue em direção à saída do forno.

As regiões de recirculações são caracterizadas por zonas de menor pressão o que, em alguns pontos, resulta em velocidades contrárias ao escoamento principal, conforme exposto pela Figura 6.2. No item (a) da figura é mapeada a velocidade no intervalo -2 a $2m/s^4$.

³Aproximadamente 50% do total

⁴Essa limitação no intervalo de escala (-2 a 2 m/s apresenta um intervalo de 4 unidades) em relação a apresentada na Figura 6.1 (-2 a 25 m/s apresenta um intervalo de 26 unidades) é pelo fato do *software* não captar adequadamente através da escala de cores os pequenos gradientes de velocidade.

A região em tonalidade vermelha, presente em quase a totalidade do forno, representa a velocidade positiva e próxima de 2m/s, enquanto que as tonalidades formadas por verde, amarelo e azul representam as velocidades iguais ou menores que zero caracterizando, desta maneira, as regiões de fluxo reverso. No item (b), desta mesma figura, são apresentadas as iso-superfícies das regiões de refluxo que complementam a percepção dos pontos onde são encontradas velocidades contrárias ao escoamento principal.

Uma comprovação ainda maior, referente às regiões de recirculação, pode ser observada através da Figura 6.3 que expõe um plano x - y transversal, distando 2m do maçarico. Na imagem é possível verificar escoamentos em vórtices, principalmente abaixo do maçarico, simbolizado pelos vetores de maior módulo.

A Figura 6.4 apresenta os vetores velocidade na saída do forno, onde se pode observar uma total ordenação deste vetores, ao contrário do comportamento "desordenado" encontrado na Figura 6.3. A velocidade da saída destes gases é, aproximadamente, menor ou igual a 6m/s.

A Figura 6.5 expõe o comportamento dos jatos de gases ao saírem das peças que formam o maçarico. Observa-se que no centro, logo à frente da Peça 5, há um grande "redemoinho" provocado pela queda de pressão devido à ausência de escoamento nesta peça. Presença de regiões de recirculação, como a apresentada, promovem uma mistura intensa entre os reagentes. O modelo de combustão adotado comprova (ver Seção 3.11 do Capítulo 3), através do pico de temperatura apresentado na Figura 6.10, que esta região, imediatamente após a saída do maçarico, promove uma mistura eficiente entre os reagentes. Maiores detalhes referente a esta região de mistura, imediatamente após a saída do maçarico, serão novamente abordados juntamente com uma discussão do gráfico da Figura 6.10.



Figura 6.1: Vetores velocidade ao longo do forno para estudo de caso 1 utilizando o modelo $k-\epsilon \mbox{ de turbulência}$



Figura 6.2: Estudo de caso 1 utilizando o modelo $k - \epsilon$ de turbulência (a) Mapa da velocidade axial (b) iso-superfície de velocidade igual a -2m/s



Figura 6.3: Vetores velocidade à 2 metros do maçarico para estudo de caso 1 utilizando o modelo $k-\epsilon$ de turbulência



Figura 6.4: Vetores velocidade na saída do forno para estudo de caso 1 utilizando o modelo $k-\epsilon \mbox{ de turbulência}$



Figura 6.5: Vetores velocidade próximo ao maçarico para estudo de caso 1 utilizando o modelo $k-\epsilon$ de turbulência

Com a Figura 6.6, representando apenas a região onde ocorre a combustão⁵, é possível verificar o caráter difusivo da chama, obtido com este projeto de maçarico, e também analisar as frações mássicas do metano (CH_4) e do oxigênio (O_2) . No item (a) é apresentada a fração mássica do metano em uma escala de 0,0 a 0, 1, onde a coloração em vermelho representa a região rica em metano que se extende até, aproximadamente, 8m de forno após sair da Peça 3 do maçarico (Detalhes da peça encontram-se nas Figuras 5.5 e 5.8 da Seção 5.1 do Capítulo 5). No item (b) encontra-se a fração mássica do oxigênio em uma escala de 0,0 a 0, 223, sendo possível verificar o grande excesso de oxigênio presente no processo conforme já predito na Seção 5.3. A coloração vermelha presente neste item, representa a região rica em oxigênio, e em contrapartida, a área em azul a região pobre no mesmo. Observe que à medida que se avança para a região central da câmara, a coloração vermelha vai cedendo espaço para a amarela, o que indica o consumo de oxigênio pela reação.

A Figura 6.7 expõe o formato da chama no interior da câmara de combustão. Uma iso-superfície de temperatura de chama no valor de 1700K foi construída em conjunto com planos nas secções transversais alocados a 6, 5 e 7, 8m da saída do maçarico, com a intenção de verificar o comprimento da chama. Observa-se que o diâmetro da chama vai se tornando maior à medida que se afasta do maçarico. Tal acontecimento deve-se ao fato da exitência de uma maior mistura por mecanismos de difusão/convecção à medida que se aumenta o tempo de contato entre os reagentes.

Na Figura 6.8 encontra-se a intensidade de irradiação térmica na escala de 300 a $100.000W/m^2$, onde revela a grande intensidade de radiação gerada pela chama devido à reação de combustão do metano com o oxigênio.

O fenômeno de transferência de calor na parede refratária pode ser visualizado

 $^{^5 \}mathrm{Devido}$ ser a região de principal interesse e, também para que tenha uma melhor resolução na imagem

claramente através do item (a), da Figura 6.9, local este onde se encontra a chama, o que pode ser facilmente verificado pela tonalidade vermelho acentuada, que na escala de cores, representa a maior temperatura externa da parede refratária, de aproximadamente 400K. Na extremidade direita deste mesmo item encontram-se temperaturas menores, próximas de 300K, resultado da "perda" de calor para o meio ambiente. No interior da câmara pode

de 300K, resultado da "perda" de calor para o meio ambiente. No interior da camara pode ser verificado uma coloração avermelhada muito intensa, pois internamente há picos de temperatura da ordem de 2000K, como exposto pela Figura 6.10. No item (b), desta mesma Figura 6.9, encontra-se um mapa com 6 contornos de temperatura apresentados na escala de 900 a 2000K. A coloração avermelhada está representando a maior temperatura na escala, indicando região onde está ocorrendo uma intensa reação de combustão.



Figura 6.6: Fração mássica, para estudo de caso 1 utilizando o modelo $k-\epsilon$ de turbulência: (a) do metano e (b) do oxigênio





Figura 6.7: Iso-superfíce da temperatura de chama para estudo de caso 1 utilizando o modelo $k-\epsilon$ de turbulência



Figura 6.8: Intensidade de radiação da chama para estudo de caso 1 utilizando o modelo $k-\epsilon \mbox{ de turbulência}$



Figura 6.9: Estudo de caso 1 utilizando o modelo $k - \epsilon$ de turbulência (a) Temperatura na parede refratária (b) contorno de temperatura no interior do forno

Na tentativa de apresentar dados mais quantitativos ao leitor, gráficos em coordenadas x - y, apresentados pelas Figuras 6.10 e 6.11, expõem os perfis de temperatura na câmara de combustão, que esta designada como "comprimento do forno". Com isto o ponto "zero", indica a posição de saída dos gases do maçarico.

Na Figura 6.10 é apresentado o perfil de temperatura ao longo de uma linha central no interior da câmara de combustão. Analisando a figura, é possível verificar um elevado pico de temperatura de 2200K na região entre 0 e 10m após o maçarico, sendo que à medida que se afasta da região de queima, a temperatura vai diminuindo até chegar próxima a 800K na saída do forno. O pico de temperatura de 2000K, imediatamente após a saída do maçarico, é resultado do elevado processo de mistura que ocorre nesta região, captado pelo modelo de combustão adotado, como pode ser acompanhado na Figura 6.5.

Através da Figura 6.11 é exposto o perfil de temperatura em duas secções transversais distintas, 5 e 20m à partir da saída do maçarico. Os traços hachurados representam a coleta de dados de temperatura a 5m da saída dos gases do maçarico e, portanto, são constatadas temperatura mais elevadas como esperado, pois está na região de atuação direta da chama. Os pontos não hachurados representam dados de temperatura a 20m do maçarico e, portanto, temperaturas menores que as obtidas a 5m. Comparando estas duas curvas, verifica-se que a primeira apresenta um pico de temperatura acima dos 1600K, resultado da intensa radiação liberada pela chama. Também é possivel verificar que o pico de temperatura apresenta-se levemente deslocado para a posição "diametro forno $\approx 0, 3$, resultado de uma maior recirculação entre os reagentes, conforme exposto na região localizada acima do eixo central da Figura 6.1 e no item (a) da Figura 6.2. Através do comportamento das curvas, é possível observar a influência da parede refratária na temperatura da câmara, pois à medida que a posição radial na câmara se torna maior que 2m há uma redução brusca na temperatura de 1200 para aproximadamente 400K, resultado da resistência imposta pela parede refratária à transferência de calor entre os gases da câmara e o meio ambiente.



Figura 6.10: Perfil de temperatura ao longo da câmara para estudo de caso 1 utilizando o modelo $k-\epsilon$

Para finalizar as análises para o estudo de caso 1, utilizando o modelo $k - \epsilon$ de turbulência, um gráfico em coordenadas x - y foi plotado para vizulizar o comportamento da concentração das espécies químicas no interior da câmara, como mostra a Figura 6.12. A figura foi obtida através de uma linha central partindo do maçarico em direção a saída do forno. Com o auxílio do gráfico, é possível constatar que na região central da câmara de combustão, a fração mássica de oxigênio é praticamente nula nos seus 8 primeiros metros, resultado da existência de alta concentração de combustível. Em outras palavras, nesta região central o oxigênio presente reage "instantâneamente" com o metano nos primeiros metros do forno e, próximo a 8m, praticamente todo o metano é consumido ocasionando, a partir deste ponto, a presença do oxigênio remanescente. Nota-se que próximo a 10m, a fração mássica do componente oxigênio alcança o valor aproximado de 0, 17, evidenciando



Figura 6.11: Perfil radial de temperatura em secções transversais na câmara de combustão para estudo de caso 1 utilizando o modelo $k - \epsilon$

o seu excesso, proviniente principalmente da grande vazão da corrente de ar secundário.

Quanto às frações mássicas dos produtos, observa-se que tanto o gás carbônico (CO_2) quanto a água (H_2O), já apresentam uma fração próxima de 0,15 na posição "comprimento forno=0". Tal resultado é fruto da região de intensa mistura localizada, imediatamente, na saída dos gases do maçarico como exposto pela Figura 6.5. Em outras palavras, à medida que os reagentes O_2 e CH_4 se encontram neste ponto especificamente, os mesmos reagem instantaneamente, formando os produtos de reação CO_2 e H_2O . O declínio, observado no gráfico, das frações mássicas destes produtos da reação de combustão para menos de 0,05 na distância de 10*m*, ao longo da câmara, deve-se ao fato da extinção do combustível metano para a oxidação e também pela diluição provocada pelo grande volume



Figura 6.12: Perfil axial de concentração das espécies ao longo da câmara de combustão para estudo de caso 1 utilizando o modelo $k - \epsilon$ de turbulência

de oxigênio e nitrogênio oriundos do ar secundário.

6.2.2 Utilizando o Modelo RSM de Turbulência

O mapa vetorial de velocidade para este caso encontra-se na Figura 6.13. Os vetores velocidade, aplicando o modelo RSM para turbulência, apresentaram além das regiões de recirculações observadas com o modelo $k - \epsilon$ da Figura 6.1, mais dois pontos de recirculação na região da capela, um acima do maçarico e o outro logo abaixo do mesmo. Além disto, a recirculação situada acima da região do escoamento principal (eixo localizado no centro do plano) apresentou-se mais afastada do maçarico e com uma maior intensidade do que o resultado obtido utilizando o modelo $k - \epsilon$. No referente à recirculação presente logo abaixo da entrada dos gases na câmara provenientes do maçarico, esta apresentou-se mais intensamente e com centros de recirculação mais definidos com o modelo RSM em comparação ao $k - \epsilon$.

Este comportamento mais intenso nas regiões de recirculação presentes nos resultados em que se aplicou o RSM, podem ser melhor interpretados comparando o mapa de velocidade do item (a) da Figura 6.14, com o mesmo item da Figura 6.2. O mapa de velocidade apresenta uma região de velocidade contrária ao fluxo principal, sensivelmente maior para o RSM do que para o $k - \epsilon$ e com um maior módulo de velocidade reversa, indicado pelo azul mais intenso presente nesta figura. As iso-superfícies de velocidade reversa (-2m/s), presentes no item (b) da Figura 6.14, em comparação ao mesmo item na Figura 6.2, comprovam a maior intensidade desta velocidade contrária ao fluxo para o modelo RSM de turbulência, em contrapartida ao $k - \epsilon$.

Por fim, ainda com relação ao campo de velocidade dos gases, comparando as Figuras 6.15 obtida com o modelo RSM de turbulência com a Figura 6.3 obtida para o modelo $k - \epsilon$, percebe-se o quanto o modelo anisotrópico capta, mais intensamente, o movimento aleatório e caótico do escoamento, em comparação ao modelo isotrópico. Quanto aos vetores velocidade na saída do forno para o modelo RSM, estes apresentaram comportamento semelhante ao obtido na Figura 6.4 para o modelo $k - \epsilon$, o que comprova que o escoamento adquiriu um comportamento estável antes de deixar a câmara de combustão.

Investigando e comparando os vetores velocidade localizados imediatamente à frente da saída do maçarico através da Figura 6.16 para o RSM e da Figura 6.5 para o modelo $k - \epsilon$, é possível distinguir a existência mais acentuada de "redemoinhos" no modelo dos tensores de Reynolds representados pela maior presença de zonas esverdeadas/azuladas frente ao escoamento principal em vetores de cores vermelho intenso. Como resultado da captação destes redemoinhos mais intensos no modelo anisotrópico, ocorre um processo de mistura mais eficiente entre os reagentes e, conseqüentemente, a reação instantânea dos mesmos. Essa maior eficiência na mistura pode ser também visualizada através da existência de um pico de temperatura de 2200K na coordenada horizontal, na posição "comprimentoforno \approx 0" da Figura 6.19. Este pico também está presente, porém em menor intensidade, aproximadamente 2000K, na Figura 6.10 para o modelo $k - \epsilon$, o que indica que o mesmo não captou totalmente as pequenas regiões de recirculações⁶.

⁶O modelo de combustão adotado (Eddy Break-Up) é baseado nas propriedades de mistura e, portanto, regiões de intensa mistura apresentam uma alta taxa de reação que, consequentemente, resulta em altos picos de temperatura



Figura 6.13: Vetores velocidade ao longo do forno para estudo de caso 1 utilizando o modelo RSM de turbulência



Figura 6.14: Estudo de caso 1 utilizando o modelo RSM de turbulência (a) Mapa da velocidade axial (b) iso-superfície da velocidade igual a -2m/s



Figura 6.15: Vetores velocidade a 2 metros do maçarico para estudo de caso 1 utilizando o modelo RSM de turbulência


Figura 6.16: Vetores velocidade próximo ao maçarico para estudo de caso 1 utilizando o modelo RSM de turbulência

No que diz respeito ao mapa das frações massicas, tanto do metano quanto do oxigênio, obtidos com o modelo RSM, apresentaram um comportamento bastante semelhante aos itens (a) e (b) da Figura 6.6 obtidos para o modelo padrão $k - \epsilon$. Portanto julgou-se não ser necessário expor o mapa de concentrações massicas para o modelo RSM de turbulência.

Com relação às iso-superfícies de temperatura de chama fixada em 1700K, a Figura 6.17, obtida para o modelo dos tensores de Reynolds, apresentou uma chama menor em extensão axial do que aquela obtida com o modelo $k - \epsilon$, representado pela Figura 6.7. Com o auxílio dos planos transversais é possível ter uma melhor concepção para se comparar a extensão das chamas. Como pode ser observado pela Figura 6.17, obtida para o modelo anisotrópico de turbulência, a temperatura de 1700K somente alcança a distância axial de 6, 5m (Primeiro plano). No entanto de acordo com a Figura 6.7, para o modelo isotrópico de turbulência, a temperatura de 1700K atinge a marca de 7, 8m(Segundo plano).

A chama mais retraída em relação ao comprimento obtida para o RSM em relação à obtida para o $k - \epsilon$, é compensada pelo aumento no seu diâmetro. Tal fato pode ser mais facilmente verificado observando a Figura 6.18 e comparando-a com a Figura 6.8 obtida com o $k - \epsilon$. No modelo RSM há uma reação de combustão mais difundida radialmente que pode ser comprovado pela intensidade de radiação mais concentrada e curta, ao contrário do que ocorreu quando se aplicou o modelo $k - \epsilon$, que apresentou uma intensidade de radiação da chama mais extensa em relação ao comprimento, porém mais estreita em relação ao diâmetro.





Figura 6.17: Iso-superfíce da temperatura de chama para estudo de caso 1 utilizando o modelo RSM de turbulência



Figura 6.18: Intensidade de radiação da chama para estudo de caso 1 utilizando modelo RSM de turbulência

No referente à transferência de calor na parede refratária, tanto utilizando o modelo dos tensores de Reynolds como o modelo de $k - \epsilon$ para turbulência, visualmente apresentaram o mesmo comportamento, não havendo a necessidade de expor esta figura, sendo que o item (a) da Figura 6.9 pode representar quantitativamente os perfis obtidos aplicando os modelos $k - \epsilon$ e RSM.

Conforme já mencionado anteriormente, o perfil de temperatura axial utilizando os tensores de Reynolds, Figura 6.19, apresenta um primeiro pico de temperatura no valor de 2200K na posição imediatamente após o maçarico (comprimento forno \approx 0). Já nas simulações utilizando o modelo $k - \epsilon$, este pico de temperatura não aparece na mesma intensidade e sim em um valor inferior e igual à 2000K, conforme mostra a Figura 6.10. Tal comportamento observado quando se utiliza o RSM pode ser explicado, entre outros fatores, do mesmo "captar" de maneira mais eficiente as pequenas regiões de mistura, conforme exposto pela Figura 6.16 que apresenta regiões com uma coloração azul/esverdeada mais intensa do que as apresentadas pela Figura 6.5 referente ao emprego do modelo $k - \epsilon$ de turbulência.

Agora comparando a Figura 6.20, obtida com o RSM, com a Figura 6.11, obtida com o modelo $k - \epsilon$, verifica-se que com os tensores de Reynolds a temperatura, para um secção transversal realizada à 5m do maçarico, apresenta-se mais distribuída (perfil mais "achatado") como resultado do menor comprimento de chama e maior diâmetro. No entanto, esta mesma curva, apresentada na Figura 6.11, revelou uma significativa elevação na temperatura na posição "diâmetro forno $\approx 0, 5m$ ", como resultado de uma chama mais longa predita pelo $k - \epsilon$. No entanto, em compensação pela ausência deste pico de temperatura na região central da câmara, o modelo dos tensores de Reynolds revelou uma temperatura levemente superior próxima à parede do forno, como consequência do aumento no diâmetro da chama.



Figura 6.19: Perfil axial de temperatura ao longo da câmara para estudo de caso 1 utilizando o modelo RSM

Mediante os resultados apresentados neste tópico, que compararam o comportamento fluidodinâmico obtido com os modelos $k - \epsilon$ e RSM de turbulência, conclui-se que a aplicação do segundo modelo produziu uma chama mais retraída quanto a comprimento, porém com um incremento no seu diâmetro, quando comparado ao primeiro.

Quanto ao processo de clinquerização⁷, tal comportamento térmico predito com o modelo dos tensores de Reynolds, revela que o material reagente formador do clínquer estaria recebendo uma maior carga térmica na região mais próxima à saída do clínquer (esta saída corresponde a entrada dos gases de combustão - contracorrente). No entanto, de acordo com o modelo $k - \epsilon$ de turbulência, a reação de clinquerização estaria, sob mesmas

⁷Nome dado a reação para produção do clínquer



Figura 6.20: Perfil radial de temperatura em secções transversais na câmara para estudo de caso 1 utilizando o modelo RSM

condições operacionais, recebendo esta carga térmica em uma posição mais afastada da saída do clínquer, como resultado de uma chama mais longa e mais estreita.

Para avaliar qual dos dois modelos de turbulência apresentou resultados mais coerentes ao que acontece na realidade, seriam necessários dados experimentais para confrontar com os simulados, o que no momento não foi possível devido à inexistência de dados experimentais para esta configuração de maçarico. Sabe-se que dados experimentais não é algo fácil de se obter devido às extremas condições físicas na qual um forno utilizado na produção de cimento opera. São temperatura muito altas que inviabilisam a coleta de dados no interior destes equipamentos com técnicas convencionais. No entanto, sabe-se que o comportamento apresentado, tanto com o modelo $k - \epsilon$ quanto com o RSM, mostraram-se compatíveis com dados qualitativos da literatura no que diz respeito às zonas de recirculações e perfis de temperatura obtidos para equipamentos de configurações diversas como apresentadas, por exemplo, por KHALIL, (1981) e BEÉR e CHIGIER, (1974).

Por fim, cabe ressaltar que este comportamento fluidodinâmico distinto verificado nos resultados apresentados via simulação quanto a aplicação de um modelo ou outro de turbulência estendeu-se, de maneira semelhante, para todos os casos investigados, não havendo desta maneira necessidade de posteriores discussões, para este trabalho, para com o uso de um ou outro modelo de turbulência.

Na Seção 6.3 seguinte, são confrontados os resultados dos estudos de caso 1 e 2 com a intenção de verificar o comportamento fluidodinâmico ao se duplicar a vazão massica do combustível, no interior da câmara.

6.3 Influência da Carga do Combustível

Para investigar a influência do aumento da fração massica do combustível, no comportamento fluidodinâmico no interior do forno, serão consideradas as condições iniciais expostas na Tabela 5.3, na Seção 5.2 do Capítulo 5, que correspondem ao estudo de caso 2. Estes resultados serão comparados com os resultados expostos para o estudo de caso 1 referente ao modelo $k - \epsilon$ de turbulência estudado na Seção 6.2.1.

Comparando as condições apresentadas na Tabela 5.3, referentes ao estudo de caso 2, com as condições apresentadas na Tabela 5.2, pertinentes ao estudo de caso 1, verifica-se que todas as condições são iguais com a exceção da fração massica do combustível CH_4 , a qual foi duplicada para o estudo de caso 2. Desta maneira, somente metano é injetado na Peça 3, ao contrário do ocorrido no estudo de caso 1 em que o metano foi injetado juntamente com 50% de nitrogênio $(N_2)^8$ na corrente de ar de transporte.

Iniciando a análise comparativa entre a Figura 6.21, obtida para o estudo de caso 2, com a Figura 6.5, referente ao estudo de caso 1, verifica-se na primeira o surgimento de zonas de recirculação mais nítidas do que aquelas encontradas no estudo de caso 1. A explicação seria o aumento da quantidade de combustível, o que provocou uma intensificação na reação de combustão e, conseqüentemente, um aumento no processo de mistura, o qual pode ser distinguido visualmente na Figura 6.21 pelo aumento da região esverdeada, em comparação à Figura 6.5.

Uma diferença claramente perceptível quando se aumenta a fração massica do combustível pode ser encontrada quando se compara a Figura 6.22, obtida para o estudo de caso 2 que operou com 100% de metano injetado na Peça 3, com a Figura 6.7, obtida para o estudo de caso 1 que operou com 50% de metano injetado nesta mesma peça. A chama

⁸Tratado como componente inerte na reação de combustão nessa pesquisa

Figura 6.21: Vetores velocidade próximo ao maçarico para estudo de caso 2 utilizando o modelo $k-\epsilon$ de turbulência

registrou um aumento considerável em seu comprimento para o caso 2 quando comparado ao 1. O comprimento da chama, representado por uma iso-superfície na temperatura de 1700K, alterou de 7,8*m* (segundo plano transversal na Figura 6.7) para 13*m* (terceiro plano transversal na Figura 6.22) seguido também por um aumento significativo no seu diâmetro.

Figura 6.22: Iso-superfície da temperatura de chama para estudo de caso 2 utilizando o modelo $k-\epsilon$ de turbulência

O aumento no comprimento da chama, provocado pela injeção de uma maior carga de combustível, também pode ser acompanhado comparando a Figura 6.23, para o estudo de caso 2, com a Figura 6.8, relativo ao caso 1. A área em vermelho acentuado, que representa a intensidade de radiação de $100.000W/m^2$ ou maior, apresenta uma área muito maior de atuação no caso 2 em comparação à mesma figura obtida para o estudo de caso 1.

Figura 6.23: Intensidade de radiação da chama para estudo de caso 2 utilizando o modelo $k-\epsilon$ de turbulência

Com relação à temperatura ao longo do forno, os perfis podem ser comparados através da Figura 6.24, que expõe o comportamento para o caso 2 juntamente com o caso 1. No caso 2, o perfil de temperatura axial apresentou um extremo de temperatura de aproximadamente 2100K em uma posição próxima a 7m do maçarico. Este pico de temperatura é menor do que o revelado para o estudo de caso 1, onde este extremo de temperatura se aproximou de 2200K. No entanto, o caso 2 apresentou uma queda na temperatura mais amena ao longo da câmara de combustão, resultado do aumento da carga de combustível. Já para o caso 1, este extremo de temperatura apresentou-se em uma faixa axial muito "estreita" de maneira que pode-se concluir que o combustível foi consumido em uma região muito próxima à saída do maçarico, o que pode ser comprovado pelo menor comprimento de chama, conforme discutido anteriormente. Este comportamento resultou em uma maior queda de temperatura ao longo de quase todo o forno, quando comparado ao caso 2.

Um comportamento incosistente nas curvas de temperatura axial da Figura 6.24 foi observado próxima à posição 50 m ao longo do forno. O caso 1 exibiu uma temperatura maior que a apresentada pelo caso 2 o que pode ser considerado irrealista termodinâmicamente uma vez que o caso 2 tem o dobro da carga de combustível apresentada pelo caso 1. Esse comportamento pode ser atribuído à dificuldade encontrada na convergência ao se trabalhar com multifluído na peça de ar de transporte para o estudo de caso 1, ou seja, ao invés de ser inserido apenas metano por este canal, houve a inclusão de nitrogênio para completar o balanço mássico, uma vez que a vazão massica deveria ser mantida constante e igual para todos os casos.

Na Figura 6.25, que expõe os perfis de temperatura em secções transversais na câmara de combustão, também pode ser verificado a influência do aumento da vazão de combustível. Este aumento em 50% na carga de metano para o caso 2 deslocou em, aproximadamente, 450K a curva representativa do perfil de temperatura obtida a 5m da saída do maçarico, em comparação ao caso 1. A mesma tendência de aumento na carga térmica, porém em menor intensidade, pode ser visualizada para a distância de 20m do maçarico.

Figura 6.24: Gráfico comparativo de temperatura axial para estudo de caso 2 e 1 utilizando o modelo $k-\epsilon$ de turbulência

Figura 6.25: Gráfico comparativo de temperatura em secções transversais para estudos de caso 2 e 1 utilizando o modelo $k-\epsilon$ de turbulência

Na Figura 6.26 é possível comparar os dados de fração massica dos componentes para os estudos de caso 2 e 1. No caso 2 observa-se uma maior fração massica de CH_4 presente na região de 0 a 10*m*, em comparação ao caso 1, conforme esperado. Em contrapartida, o perfil de concentração do oxigênio para o caso 2 foi menor em toda a extensão da câmara de combustão em comparação ao caso 1, devido ao aumento no consumo de O_2 na reação de combustão resultante do incremento de combustível ao processo.

Figura 6.26: Gráfico comparativo das frações mássicas ao longo da câmara de combustão para estudos de caso 2 e 1 utilizando o modelo $k - \epsilon$ de turbulência

Perante os resultados qualitativos sobre influência da carga de combustível na combustão em um forno para produção de cimento, conclui-se que a ferramenta computacional utilizada foi capaz de predizer o comportamento fluidodinâmico esperado. Verificou-se que com o aumento da vazão de combustível em 50% para o caso 2 em comparação ao caso 1, a chama incrementou em aproximadamente 70% o seu comprimento. Este aumento levou a uma intensificação na carga térmica que se prolongou ao longo de toda a câmara de combustão, conforme o gráfico comparativo de temperatura entre os casos 1 e 2 apresentado nas Figura 6.24 e 6.25 para as direções axial e radial, respectivamente. O aumento da carga do combustível foi comprovada através do gráfico comparativo entre as frações massicas do combustível e comburente para os casos 1 e 2, conforme exposto na Figura 6.26.

O último tópico a seguir, Seção 6.4, apresenta uma comparação suscinta, entre os casos 2 e 4, procurando analisar a influência do aumento da vazão na corrente do ar radial (Peça 2). Também é explicado o porquê da não apresentação dos resultados referentes ao estudo do caso 3.

6.4 Influência do Ar Radial no Formato da Chama

Para investigar a influência da vazão de ar radial sobre o comportamento da chama, no interior da câmara de combustão, vários experimentos computacionais foram realizados através dos estudos de caso 2, 3 e 4 reunidos nas Tabelas 5.3 a 5.5 apresentados na Seção 5.2 do Capítulo 5. No entanto, somente os resultados referentes ao estudo de caso 4 serão utilizados para análise comparativa que será realizada frente aos resultados do estudo de caso 2 expostos na Seção 6.3. Tal decisão de comparar apenas os resultados do estudo de caso 4 com o 2, deixando o caso intermediário (caso 3) de fora, é justificada pelo caráter tendencioso verificado no comportamento aerodinâmico da chama ao se duplicar ou triplicar a vazão do ar radial. Com relação à escolha do caso 4 para comparar ao caso 2, foi devido exclusivamente ao fato do caso 4 apresentar uma vazão massica de ar radial 3 vezes maior do que a injetada no caso 2.

6.4.1 Formato da Chama Utilizando o Model
o $k-\epsilon$ de Turbulência

Devido à semelhança entre os resultados foi decidido expor nesta seção somente a iso-superfíce de temperatura da chama para este estudo de caso 4. O motivo de tal procedimento é atribuído ao fato da iso-superfíce ilustrar de maneira mais perceptível o comportamento da chama frente ao aumento na intensidade de giros ("swirl") ao escoamento. Primeiramente é exposto o formato da chama utilizando o modelo $k - \epsilon$ de turbulência e comparado com o estudo de caso 2 já apresentado. Em seguida é analisado o formato desta mesma chama utilizando o modelo RSM de turbulência.

Comparando a Figura 6.27, obtida para o estudo de caso 4, com a Figura 6.22, obtida para o caso 2, apresentada na Seção 6.3, é possível verificar que à medida que se aumentou a intensidade de giros, induzido pelo aumento da vazão na corrente do ar radial, houve uma pequena retração, praticamente imperceptível, no comprimento da chama seguido por um aumento no diâmetro.

Figura 6.27: Iso-superfíce da temperatura de chama para estudo de caso 4 utilizando o modelo $k-\epsilon$ de turbulênci

6.4.2 Formato da Chama Utilizando o Modelo RSM de Turbulência

Mediante as análises realizadas para o formato de chama utilizando o modelo $k - \epsilon$, exposto anteriormente, esperava-se que houvesse uma retração mais evidente em seu comprimento advindo do aumento da quantidade de movimento na direção radial. Tal comportamento não foi devidamente constatado, conforme as comparações entre a Figura 6.27, para o estudo de caso 4, e a Figura 6.22, do estudo de caso 2. Este comportamento fluidodinâmico esperado foi devidamente comprovado através dos resultados obtidos utilizando o modelo RSM de turbulência, tanto para o estudo de caso 3 como para o caso 4.

A Figura 6.28, de iso-superfíce na temperatura de 1700K, expõe o comportamento da mesma chama apresentada na Figura 6.27, referente ao estudo de caso 4, porém aplicando o modelo RSM de turbulência.

Comparando, neste mesmo estudo de caso 4, a Figura 6.28 de temperatura de chama, obtida com o modelo RSM de turbulência, com a Figura 6.27, obtida com o modelo $k - \epsilon$, observa-se um "encurtamento" de mais de 2m na extensão da chama quando utiliza-se do modelo de turbulência RSM, resultado da maior captação das intensas regiões de mistura no centro da chama promovidas pelo aumento da quantidade de movimento angular. Este aumento no fluxo radial não foi devidamente captado pelo modelo $k - \epsilon$. Entretanto, tanto com o modelo isotrópico quanto com o anisotrópico de turbulência, verificou-se uma retração no comprimento da chama, e em contrapartida, um aumento no seu diâmetro a medida que se aumentou a vazão de ar radial.

De acordo com KHALIL, (1981), à medida que se aumenta a intensidade de giros no escoamento, as regiões recirculantes próximas à parede da câmara tendem a desaparecer. Tal comportamento não foi observado quando utilizou-se do modelo $k - \epsilon$ de turbulência,

Figura 6.28: Iso-superfície da temperatura de chama para estudo de caso 4 utilizando o modelo RSM de turbulência

pois o mesmo apresentou um comportamento semelhante ao exposto pela Figura 6.1, apresentado na Seção 6.2.1 deste capítulo, obtida com 1/3 da intensidade de giros do apresentado nesta Seção 6.4. No entanto, o comportamento relatado pelo autor foi captado com o emprego do modelo RSM de turbulência. Comparando a Figura 6.29 com a Figura 6.13, apresentada na Seção 6.2.2 do presente capítulo, ambas utilizando o modelo RSM de turbulência, é possível verificar que a recirculação observada na região acima do escoamento principal da Figura 6.13 desapareceu com o aumento da corrente de ar radial, conforme mostra a Figura 6.29.

Figura 6.29: Vetores velocidade ao longo do forno para estudo de caso 4 utilizando o modelo RSM de turbulência

Capítulo 7

Conclusões e Sugestões

7.1 Principais Conclusões

Até recentemente era muito comum que os pesquisadores na área de CFD desenvolvessem códigos próprios que personalizassem seus respectivos anseios. O aspecto positivo era que o programador tinha total domínio de sua ferramenta tecnológica e podia implementar uma gama de modelos e algorítmos conforme suas necessidades. No entanto, estes cientistas esbarravam na dificuldade de implementação e os vários problemas encontrados durante este desenvolvimento, tais como erros de compilação e implementação, semanas de programação, necessidades de realizar cópias reserva de seu código, entre outros.

Em tempos recentes, os códigos comerciais de CFD foram ganhando espaço e conquistando mercado. Por um lado oferecem versatilidade de se trabalhar com quaisquer objetos de estudo, dependendo da área de interesse do pesquisador, aliada a uma enorme quantidade de modelos e algorítmos necessários para abordar seu respectivo problema. Porém, o investimento financeiro na compra e manutenção de um código comercial e o tempo necessário para seu aprendizado e treinamento são consideravelmente custosos, sem contar que muitos pacotes comerciais são verdadeiras "caixas pretas" onde o usuário limitase a inserir seus modelos e algorítmos somente em partes personalizáveis do pacote comercial.

A versatilidade de códigos comerciais de CFD, para trabalhar com geometrias quaisquer, foi o grande incentivador para a realização desta pesquisa na área de combustão em um forno para produção de cimento. A complexa geometria do maçarico aliada a sua ínfima dimensão quando comparada a câmara de combustão, formaram um complicador que seria muito difícil de ser rompido sem o auxílio de um código específico para malhas, que neste caso foi o $ICEM^{TM}$. Ultrapassada esta barreira da geometria e malha, os diversos fenômenos tais como combustão e turbulência acoplados a transferência de calor faria com que um cientista programador levasse muito mais que 1 ano de trabalho intenso, já que este foi o tempo gasto para a realização da pesquisa como tema de mestrado.

As principais características do escoamento e reação no interior do forno foram reproduzidas nas simulações computacionais desenvolvidas durante este trabalho, por intermédio de técnicas de fluidodinâmica computacional.

Através da Seção 6.2 do Capítulo 6, foi apresentada a importância da escolha de um modelo de turbulência através das análises comparativas entre os resultados obtidos com o modelo $k - \epsilon$ e os tensores de Reynolds (RSM). A chama predita com este último foi mais retraída do que com a utilização do $k - \epsilon$. No último tópico, na Seção 6.4, mais uma vez foi evidenciada a capacidade sensitível do RSM frente a escoamentos com forte intensidade de giros.

Observou-se que o modelo de EDM respondeu às variações na taxa de alimentação do combustível conforme as análise comparativas entre os comprimentos de chamas, perfis de temperatura radial e axial e outros mais para os casos 1 e 2 apresentados na Seção 6.3 do Capítulo 6. No último tópico, foi apresentado o comportamento do escoamento no interior do equipamento assim como o formato da chama proporcionada por este tipo de maçarico. Verificou-se que o modelo $k - \epsilon$ respondeu de maneira branda à intensificação na vazão de ar radial. No entanto, quando aplicado o modelo RSM verificou-se que o mesmo captou fortemente a influência da intensificação dos giros como predito por estudos de literatura. Desta maneira foi comprovada a recomendação na utilização dos tensores de Reynolds para escoamentos reativos dotados de intensos movimentos giratórios.

A busca por corroboração dos resultados apresentados neste trabalho deve ser um fator agravante uma vez que se trata de um projeto específico de equipamento. Assim, todos os resultados, sejam eles qualitativos ou quantitativos, apresentados nesta dissertação têm caráter meramente ilustrativo e não devem ser interpretados como uma absoluta verdade. Desta maneira, espera-se que tais resultados forneçam subsídios para exploração e investigação mais aprofundada nesta linha de pesquisa, de combustão turbulenta em fornos industriais.

7.2 Algumas Sugestões para Trabalhos Futuros

Devido à gama de fenômenos encontrados em trabalhos envolvendo um forno rotativo, inúmeras sugestões poderiam ser listadas aqui neste tópico, porém apenas serão citadas algumas como propostas de trabalho futuro:

• Otimizar a malha existente para que reduza o tempo computacional necessário ou, até mesmo, acoplar uma câmara de combustão menor para reduzir a dimensão da malha;

 Avaliar outros modelos matemáticos para os fenômenos inerentes ao forno, tais como inserção de um mecanismo cinético para a reação de combustão. Analisar outros modelos de discretização numérica; • Fixar um excesso de ar para um valor pré-estabelecido e realizar testes envolvendo variações nas correntes de ares radial e axial com o intuito de analisar a configuração que forneça uma mistura mais eficiente entre os reagentes e conseqüentemente uma completa combustão;

• Avaliar a influência das vazões de ares primário e secundário, assim como a temperatura destas correntes na comportamento do escoamento no interior do forno e conseqüentemente o formato de chama;

• Analisar experimentos numéricos com vários combustíveis ainda no estado gasoso; Em seguida verificar o comportamento deste tipo de maçarico frente a combustíveis líquidos e sólidos;

• Acoplar cinéticas de formação de poluentes ao processo de combustão, tais como as reações de formação dos monóxidos de carbono e de nitrogênio;

• Auferir, por meio de simulações numéricas, outras configurações geométricas de maçarico para buscar um projeto que forneça uma mistura eficiente entre os reagentes e desta maneira uma maior economia no gastos com combustíveis e menor emissão de poluentes para a atmosfera;

Referências Bibliográficas

- ANAND, M. S.; HSU, A. T. and POPE, S. B. Calculations of Swirl Combustors Using Joint Velocity-Scalar Probability Density Function Method AIAA Journal 35(7): 1143-1150, 1997
- BARREIROS, A.; CARVALHO, M. G.; COSTA, M. and LOCKWOOD, F. C. Prediction of the Near Burner Region and Measurements of NOX and Particle Emissions in Heavy Fuel Oil Spray Flames *Combustion and Flame* 92: 231-240, 1993
- BARTH, T. J., JESPERSON, D. C. The Design and application of Upwind Schemes on Unstructured Meshes AIAA Paper 89-0366, 1989.
- BEÉR, J. M. and CHIGIER, N. A. COMBUSTION AERODYNAMICS, Applied Science Publishers Ltda, London, p.264, 1974.
- BIRD, R. B., STEWART, W. E. and LIGHTFOOT, E. N. Transport Phenomena John Wiley e Sons, pp. 780, 1960.
- BRINK, A.; MUELLER, C.; KILPINEN P. and HUPA, M. Possibilities and Limitations Of The Eddy Break Up Model COMBUSTION AND FLAME Elsevier Sciense Limited, 123:275-279, 2000.

BUI, R. T., TARASIEWICZ, S., CHARETTE, A. A Computer Model For The Ciment

Kiln *IEEE TRANSACTIONS ON INDUSTRY APPLICATIONS* Vol. IA-18, N. 4, pp. 424-430, 1982.

- CEBECI, T. e SMITH, A.M. Analysis of Turbulent Boundary Layers *Acadmic Press* New York, U.S.A, 1974
- CLARKE, D. C. and WILKES, N. S. The Calculation of Turbulent Flows in Complex Geometries Using a Differential Stress Model Report AERE-R 13428, Engeneering Sciences Division Harwell Laboratory, 1989
- COIMBRA, C. F. M.; AZAVEDO, J. L. T. and CARVALHO, M. G. 3D Numerical Model for Predicting NOx Emissions from an Industrial Pulverized Coal Combustor Fuel 13: 249-292, 1987
- DAMKOHLER, G. Jahrb. deut. Luftfartforsch Z. ELETROCHEM. 1940, p. 601. English Transation, NACA Tech. Menmo 1112, 1947.
- EASTWICK, C. N., PICKERING, S. J., AROUSSI, A. Comparisions Of Two Commercial Computational Fluid Dynamics Codes In Modelling Pulverised Coal Combustion *APPLIED MATHEMATICAL MODELLING*, v. 23, p. 437-446, 1999.
- FUDIHARA, T. J., MORI, M., LAURITO, J., SPITZNER, JR. Perfis Axiais de Temperatura e Análises de Sensitividade Paramétrica em um Incinerador Tipo Forno Rotativo *REVISTA CIÊNCIA E TECNOLOGIA* v. 12, p. 29-46, 1996.
- FUDIHARA, T. J., GOLDSTEIN, L. JR., MORI, M. Aerodinâmcia Computacional De Um Queimador De Blocos Móveis de Número de Rotação Variável 9th BRAZILIAN CONGRESS OF THERMAL ENGINEERING AND SCIENCES, Paper CIT02-0790, 2002.
- FUDIHARA, T. J. Método dos Volumes Finitos Aplicado à Modelagem Matemática e

Simulação Computacional de Um Forno Aquecido Por Jato de Chama com Escoamento em Vórtice *TESE DE DOUTORADO* Universidade Estadual de Campinas, 165p., 2000.

- GARCIA, R. COMBUSTÍVEIS E COMBUSTÃO INDUSTRIAL Editora Interciência Ltda, 2002.
- GARDE, R.J. Turbulent Flow John Wiley & Sons Inc, New Delhi, India 1994.287p.
- GOROG, J. P., ADAMS, T. N., BRIMACOMBE, J. K. Heat Transfer From Flames In Rotary Kiln METALLURGICAL TRANSACTIONS B., v. 14B, p. 411-424, 1983.
- CFX5.6 / Guia do Usuário do CFX versão 5.6 Ansys 2003.
- HUBNER, A. W., TUMMERS, M. J., HANJALIÉ, K., MEER, TH. H. van der Experiments on a rotating-pipe swirl burner *EXPERIMENTAL THERMAL AND FLUID SCIENCE* p. 1-9, 2003.
- JAZBEC, M., FLETCHER, D. F., HAYNES, B. S. Simulation Of The Ignition Of Lean Methane Mixtures Using CFD Modelling And A Reduced Chemistry Mechanism AP-PLIED MATHEMATICAL MODELLING, v. 24, p. 689-696, 2000.
- KHALIL, E. E.; SPALDING, D. B. e WHITELAW, J. H. The Calculation of Local Flow Properties in Two-Dimensional Furnaces *Int. J. Heat Mass Transfer* 18: 775-791, 1975.
- KHALIL, E. E. Modelling of Furnaces and Combustors Abacus Press, 1982.
- KUMAR, S. e TAMARU, T. Computation of Turbulent Reaction Flow in a Jet Assisted Ram Combustor Computers and Fluids 26: 117-133, 1997.
- LAUNDER, B. E., REECE, G. J. and RODI, W. Progress in the Developments of a Reynolds-Stress Turbulence Closure *Journal of Fluid Mechanics* Vol. 68, pp. 537-566, 1975.

- LAUNDER, B. E. and SPALDING, D. B. The Numerical Computation of Turbulent Flows
 Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering Elsivier Science Limited, Vol.
 3, 269-289, 1974
- LAUNDER, B. E. and SPALDING, D. B. The Numerical Computation of Turbulent Flows COMPUTER METHODS IN APPLIED MECHANICS AND ENGINEERING, 3:269-289, 1974.
- LIAKOS, H. H., FOUNTI, M. A., MARKATOS, N. C. Modelling of Stretched Natural Gas Diffusion Flames APPLIED MATHEMATICAL MODELLING v. 24, p. 419-435, 2000.
- LIXING, Z. Theory and Numerical Modelling of Turbulent Gas-Particle Flows and Combustion Science Press, 1993. 231p.
- LUO, X. -L., BOYD, R. K. and KENT, J. H. Computational Investigation of Burnout in a Furnace Firing Pulverised Coal *Journal of the Institute of Energy* 64: 230-238, 1991
- MAGNUSSEN, B. F. e HJERTAGER, B. H. On Mathematical Modeling of Turbulent Combustion with Special Emphasis on Soot Formation and Combustion. In Proceedings of the 16th Symposium (International) on Combustion 1976
- MALISKA, C. R. Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional LTC -Livros Técnicos e Científicos - Editora S.A., 1995.
- MASTORAKOS, E., MASSIAS, A., TSAKIROGLOU, C. D., GOUSSIS, D. A., BURGA-NOS, V.N., PAYATAKES, A. C. CFD Predictions For Cement Kilns Inlcuding Flame Modelling, Heat Transfer And Clinker Chemistry APPLIED MATHEMATICAL MO-DELLING, v. 23, p. 55-76, 1999.
- MAY, H. O. A Tree-Dimensional Numerical Model of a Waste Incinerator Proceeding of Institution of Mechanical Engineers 208: 237-247, 1994

- MOLES, F. D., WATSON, D., LAIN, P. B. JOURNAL INST. OF FUEL, v. 46, p. 353-362, 1973.
- PATANKAR, S. V. Numerical Heat Transfer and Fluid Flow Hemisphere Publishing Corporation, 1980.
- PERRY, R. H. and CHILTON, C. H. PERRY'S CHEMICAL ENGINEERING HAND-BOOK - Seventh Edition, International Editions, 1998.
- POPE, S. B. PDF Methods for Turbulent Reacting Flows Progress in Energy and Combustion Science 11: 119-192, 1985
- RAITHBY, G. D. Equations Of Motions For Reacting, Particle Laden Flows THERMAL SCIENCE LTDA. Progress Report, 1991.
- RONEL, J., BALIGA, P. F. A Finite Element Method for Unstead Heat Conduction in Materials with or whitout Phase Change AMERICAN SOCIETY OF MECHANICAL ENGINEERS PAPER American Society of Mechanical Engineers Winter Annual Meeting, USA, 1979.
- RUHLAND, W. JOURNAL INST. OF FUEL, v. 40, p. 69-75, 1973.
- SCHNEIDER, G. E., RAW, M. J. A Skewed, Positive Influence Coefficient Upwinding Procedure for Control-Volume-Based Finite Element Convection-Difusion Computation NUMERICAL HEAT TRANSFER 8:1-26, 1986.
- SCHNEIDER, G. E., RAW, M. J. Control Volume Finite Element Method for Heat Transfer and Fluid Flow Using Co-Located Variables-1. Computational Procedure NUMERICAL HEAT TRANSFER 11:363-390, 1987.
- SILVA, M. G, XIMENES, C. S., MORI, M. Análise Numérica do Processo de Combustão em um Forno Rotativo Usando as Técnicas de Fluido Dinâmica Computacional

(CFD) CILANCE-XXIV IBERIAN LATIN-AMERICAN CONGRESS ON COMPU-TATIONAL METHODS IN ENGINEERING, October 29th-2003, Ouro Preto - Minas Gerais - Brazil, p.154, 2003.

- SPALDING, D. B. Mixing and Chemical Reaction in Steady Confined Turbulent Flames Thirteenth Symposium (International) on Combustion The Combustion Institute, pp. 649-657.
- SPANG III, H. A. A Dynamic Model of a Cement Kiln *AUTOMATICA* v. 8, p. 309-323, 1972.
- VERSTEEG, H. K., MALASEKERA, W. An Introduction to Computational Fluid Dynamics - The Finite Volume Method. England: Longmsn Group Ltda. 1995
- WILCOX, D. C. Multiscale Model for Turbulent Flows In AIAA 24th Aerospace Sciences Meeting American Institute of Aeronautics and Astronautics, 1986