

Modelagem térmica e química da câmara de combustão de uma turbina a gás

Felipe Roman Centeno¹

René Lucio Rech²

Resumo

Este trabalho apresenta a análise térmica e química da câmara de combustão de uma turbina a gás, considerando a metodologia de modelagem por dois reatores de mistura perfeita em série. Para tal, considera-se um mecanismo de dois passos para a reação de combustão e verificam-se os efeitos das variações nas vazões de combustível e de ar nos resultados (interior e saídas dos reatores). O ar fornecido à câmara é proveniente de um compressor. Os resultados alcançados concordam fisicamente com o esperado, uma vez que a temperatura na saída do primeiro reator é acima da temperatura de chama adiabática e existe uma pequena quantidade de combustível e de poluentes na sua saída, os quais são eliminados/reduzidos durante a passagem pelo segundo reator, o qual apresenta temperatura inferior à do primeiro na saída. Esses resultados demonstram a importância de modelos idealizados para a simulação de complexos sistemas de combustão, podendo ser analisados diversos parâmetros que participam das reações químicas e térmicas nos mesmos.

Palavras-chave: Reator de mistura perfeita. Combustão. Modelagem térmica e química de reatores.

Abstract

This paper presents the thermal and chemical analysis of a gas turbine combustion chamber, considering the methodology of modeling by two well-stirred reactors of perfect mixture in series. For this, it is considered a two-step mechanism for the combustion reaction and it is verified the effects of variations in fuel and air discharges in the results (inside and outside the reactors). The air supplied to the camera is from a compressor. The obtained results agree physically with the expected ones, since the temperature in the outer part of the first reactor is above the adiabatic flame temperature and there is a small amount of fuel and pollutants at its output, which are eliminated/reduced during the passage through the second reactor, which displays lower than the first temperature on its output. These results show the importance of idealized models for the simulation of combustion complex systems, and it is possible to analyze several parameters that take part in thermal and chemical reactions.

Keywords: Well-stirred reactor. Combustion. Reactor thermal and chemical modeling.

¹ Mestre em Engenharia Mecânica pela Universidade Federal do Rio Grande do Sul (UFRGS), Porto Alegre, RS, Brasil; doutorando em Engenharia Mecânica pela UFRGS e professor da Universidade do Vale do Rio dos Sinos (UNISINOS), São Leopoldo, RS, Brasil. E-mail: frcenteno@unisinos.br

² Mestre em Engenharia Química pela Universidade Federal do Rio de Janeiro (UFRJ), Rio de Janeiro, RJ, Brasil e doutorando em Engenharia Química pela Universidade Federal do Rio Grande do Sul (UFRGS), Porto Alegre, RS, Brasil. E-mail: renerech@gmail.com

Artigo recebido em 04/08/2011 e aceito em 27/04/2012.

1 Introdução

A compreensão do processo de combustão foi aprimorada a partir da década de 1950, quando se iniciou a utilização de modelos de cinética química e acoplamento entre as análises química e térmica através do estudo de reatores idealizados. Bragg (1953 Novoselov *et al.*, 2006) modelou uma câmara de combustão de uma turbina aeronáutica, através da associação de um reator, perfeitamente misturado, seguido de um reator de escoamento uniforme, adotando uma cinética química global para determinação da taxa da reação. Os estudos mostraram o volume ideal do primeiro reator, assim como a condição de entrada de combustível e de ar no segundo. Em seguida, Longwell e Weiss (1955) verificaram, experimentalmente, esse tipo de abordagem, apresentando boa concordância e motivando, assim, a continuidade dos estudos.

Uma cadeia de reatores, formada por um reator perfeitamente agitado, seguido de um reator de escoamento uniforme foi utilizada por Steele *et al.* (1995), com o objetivo de comparar com dados experimentais de um reator misturado por jatos, obtendo boa concordância para tempos de residência inferiores a 4 milissegundos.

A utilização de códigos de dinâmica de fluidos computacional (CFD) tem se mostrado importante como ponto de partida para a modelagem de câmaras de combustão com cadeia de reatores idealizados, utilizando os resultados de CFD para a montagem das cadeias de reatores e investigação do processo de combustão (FARAVELLI *et al.*, 2001; 2002a; 2002b; NIKSA; LIU, 2002; NOVOSSELOV *et al.*, 2006). O cálculo de emissões de CO e NO_x em uma turbina a gás, operando com gás natural, foi abordado em Novoselov *et al.* (2006), através do desenvolvimento de uma cadeia de trinta e um reatores. Naquele estudo, os autores aplicaram o *software* CFD Star-CD e dois mecanismos de combustão de gás natural, sendo um deles de 8 etapas e outro, denominado GRI-Mech 3.0 (Smith *et al.*, 1999), composto por 325 etapas de reação.

Nesse ponto, deve-se observar outro aspecto utilizado na simulação de combustão que é o mecanismo de reação empregado na análise, assim como a forma de determinar as taxas de reações. Um exemplo é o trabalho apresentado por Andreini e Facchini (2004), que estuda as emissões de diferentes modelos de queimadores de turbinas a gás, através de cadeias de reatores e, utilizando bibliotecas do *software* CHEMKIN, para solução da cinética química e cálculo das taxas das reações. Outro estudo, relacionado ao emprego do *software* CHEMKIN, foi feito por Orbegoso *et al.* (2011), que avaliaram a formação de po-

luentes em uma turbina a gás, utilizando três cadeias de reatores. Neste estudo, os autores propuseram as cadeias de reatores baseadas em parâmetros geométricos do combustor, assim como na avaliação do parâmetro de segregação da mistura ar-combustível e resolveram as equações das taxas de reação, utilizando o *software* mencionado.

Este trabalho apresenta a simulação computacional da câmara de combustão de uma turbina a gás, utilizando o modelo de reator de mistura perfeita. Para tal, considera-se que a câmara é constituída por duas zonas de combustão em série, fazendo-se, então, a modelagem de dois reatores de mistura perfeita associados em série. Ainda é considerado um mecanismo de reação de dois passos, e faz-se a análise da influência da variação da vazão de alimentação de combustível, assim como da quantidade de ar que é proveniente de um compressor. Essa análise é de fundamental importância para a compreensão do fenômeno da reação de combustão em turbinas a gás, uma vez que o desempenho desses equipamentos está intimamente relacionado ao processo de combustão. Além disso, este trabalho também tem como objetivo mostrar, de forma simples, porém detalhada, a aplicação da modelagem inerente ao processo de simulação de câmaras de combustão, através de cadeia de reatores com acoplamento de modelagem térmica e química, mostrando que esse tipo de abordagem é viável mesmo sem disponibilidade de *softwares* avançados.

2 Modelagem de reatores de mistura perfeita

Reator de mistura perfeita é um reator idealizado no qual uma mistura homogênea é alcançada dentro do volume de controle, conforme mostrado na figura 1 (TURNS, 2000). Reatores experimentais com alta velocidade na entrada podem ser aproximados por esse modelo ideal e são utilizados no estudo de muitos parâmetros em combustão, tais como estabilização de chamas (LONGWELL; WEISS, 1955) e formação de NO_x (MALTE *et al.*, 1977; BRADLEY *et al.*, 1977; DUTERQUE *et al.*, 1981; GLARBOG *et al.*, 1986). Reatores de mistura perfeita também são utilizados para obtenção de parâmetros globais da reação (BRADLEY *et al.*, 1977).

Para modelagem de reatores de mistura perfeita, utiliza-se a equação da conservação da massa de uma espécie arbitrária *i*, a qual deve ser reescrita, conforme mostra a equação (1), obtida através das seguintes considerações:

- a taxa de geração de massa da espécie *i* está

intimamente relacionada à taxa de produção desta espécie ($\dot{\omega}_i$);

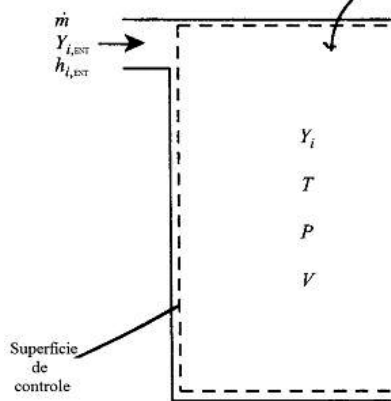
- a vazão mássica da espécie i é o produto da vazão mássica total (\dot{m}) e da fração mássica da espécie i (Y_i);

- o reator opera em regime permanente

$$\left(\frac{d m_{i,vc}}{d t} = 0\right)$$

$$\dot{\omega}_i M W_i V + \dot{m}(Y_{i,ent} - Y_{i,saida}) = 0$$

Figura 1 - Diagrama esquemático de um reator de mistura perfeita



Fonte: adaptado de Turns, (2000).

em que i representa cada uma das espécies que fazem parte da reação, MW_i é a massa molecular da espécie i , em kg/kmol, V é o volume do reator, em m^3 , \dot{m} é a vazão mássica total, em kg/s, $Y_{i,ent}$ é a fração mássica da espécie i na entrada do reator, kg/kg_{mix} e $Y_{i,saida}$ é a fração mássica da espécie i na saída do reator, kg/kg_{mix}. Nesse ponto, deve-se observar que as frações mássicas na saída do reator, $Y_{i,saida}$ são iguais às frações mássicas dentro do reator (Y_i). A composição dentro do reator é a mesma em todos os lugares, então, a composição na saída é a mesma do interior. Com isso, pode-se mostrar que as taxas de produção de cada espécie são da forma:

$$\dot{\omega}_i = f([X_i]_{vc}, T) = f([X_i]_{saida}, T)$$

na qual as frações mássicas e as concentrações molares são relacionadas por

$$Y_i = \frac{[X_i] M W_i}{\sum_{j=1}^N [X_j] M W_j}$$

A equação (1), quando escrita para cada espécie fornece N equações, com $N+1$ incógnitas (Y_i e T), considerando \dot{m} e V conhecidos. A equação

da conservação de energia para regime permanente, desconsiderando alterações nas energias cinética e potencial, aplicado ao reator de mistura perfeita é

$$\dot{Q} = \dot{m}(h_{saida} - h_{ent}) = \dot{m} \left(\sum_{i=1}^N Y_{i,saida} h_i(T) - \sum_{i=1}^N Y_{i,ent} h_i(T_{ent}) \right)$$

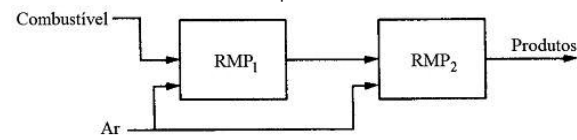
onde

$$h_i(T) = h_{f,i}^0 + \int_{T_{ref}}^T c_{p,i} dT$$

2.1 Aplicações para modelagem de sistemas de combustão

Várias combinações de reatores de mistura perfeita são frequentemente utilizadas para a aproximação de sistemas de combustão mais complexos. Um exemplo é a modelagem do combustor de uma turbina a gás, utilizando dois reatores de mistura perfeita, associados em série, como mostrado na figura 2. Nessa figura, o primeiro reator (RMP₁) representa a zona primária de queima, e o segundo reator (RMP₂), a zona secundária. Algumas vezes, outros modelos de reatores podem ser combinados para modelar determinados tipos de câmaras de combustão de turbinas, fomalhas ou de caldeiras. Exemplos desses são o modelo de reator de escoamento pistonado e os modelos de reatores à pressão ou volume constante.

Figura 2. Modelo de turbina a gás, utilizando a combinação de dois reatores de mistura perfeita (RMP) em série



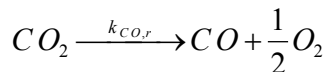
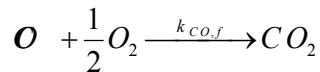
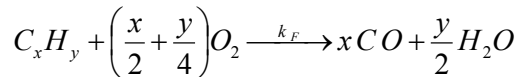
Fonte: Os autores, (2011).

3 Definição do problema

O problema consiste na análise térmica e química da câmara de combustão de uma turbina a gás, utilizando para modelagem dois reatores de mistura perfeita em série, no qual o primeiro reator represente a zona primária de queima, e o segundo reator, a zona secundária. O primeiro reator tem volume de 0,030 m^3 e é alimentado com combustível e ar em proporção correspondente à razão de equivalência unitária. O segundo reator, de volume 0,015 m^3 , é alimentado com os produtos de reação, oriundos da primeira câmara, e o ar restante. O ar, admitido nas duas câmaras, é proveniente de um compressor (admitir processo de compressão isentrópico) que opera com razão

de pressão 1:15, alimentado com ar a pressão atmosférica e temperatura de 298 K.

O combustível é decano, para o qual é proposto o mecanismo de dois passos a seguir:



A oxidação de CO a CO₂ é catalisada pela umidade, então, as expressões das taxas de conversão dessas espécies são dadas, respectivamente, por:

$$\frac{d[CO]}{dt} = -k_{CO,f}[CO][H_2O]^{0,5}[O_2]^{0,25} \quad (9)$$

$$\frac{d[CO_2]}{dt} = -k_{CO,r}[CO_2] \quad (10)$$

com as constantes de velocidade da reação de CO dadas por

$$k_{CO,f} = 2,24 \cdot 10^{12} \left[\left(\frac{kmol}{m^3} \right)^{-0,75} \frac{1}{s} \right] \exp \left[\frac{-1,674 \cdot 10^8 (J/kmol)}{R_u T (K)} \right] \quad (11)$$

$$k_{CO,r} = 5,0 \cdot 10^8 \left(\frac{1}{s} \right) \exp \left[\frac{-1,674 \cdot 10^8 (J/kmol)}{R_u T (K)} \right] \quad (12)$$

em que *T* é a temperatura no interior do reator (ou a temperatura na saída), em K, e *R_u* é a constante universal dos gases, *R_u* = 8,314 kJ/(kg.K).

Para a oxidação do decano em um passo, a taxa de conversão e constante de velocidade são dadas, respectivamente, por

$$\frac{d[C_{10}H_{22}]}{dt} = -k_F [C_{10}H_{22}]^{0,25} [O_2]^{1,5} \quad (13)$$

$$k_F = 2,64 \cdot 10^9 \left[\left(\frac{kmol}{m^3} \right)^{-0,75} \frac{1}{s} \right] \exp \left[\frac{-15098 (K)}{T (K)} \right] \quad (14)$$

O problema proposto consiste em:

- escrever as equações governantes, considerando a razão de equivalência em cada zona como parâmetros conhecidos. Assumir calores específicos constantes para cada espécie química;

- implementar o modelo numericamente e utilizá-lo para estudar a influência da vazão de

combustível e da razão de equivalência global sobre a temperatura e composição da mistura em cada zona da câmara de combustão da turbina. A faixa de operação corresponde a uma vazão média de combustível de 0,122 kg/s e razão de equivalência média igual a 0,7. No estudo, considerou-se uma variação de -10% a +10% desse valor médio para cada parâmetro.

4 Método de solução

Para solução da combustão nos reatores acima descritos, o sistema de equações é composto por:

- equação (1), escrita para cada espécie *i*;
- equação (3), escrita para cada espécie *i*;
- equação (4), referente à conservação de energia, reescrita como segue (reator adiabático):

$$\sum_{i=1}^N h_{f,i}^0 (Y_{i,saida} - Y_{i,ent}) + \sum_{i=1}^N Y_{i,saida} c_{p,i} (T - T_{ref}) + \sum_{i=1}^N Y_{i,ent} c_{p,i} (T_{ent} - T_{ref}) = 0$$

Na equação (1), as taxas de produção/consumo de cada espécie *i* são dadas por:

$$\dot{\omega}_{C_{10}H_{22}} = \frac{d[C_{10}H_{22}]}{dt} \quad (16)$$

$$\dot{\omega}_{CO} = -10 \frac{d[C_{10}H_{22}]}{dt} + \frac{d[CO]}{dt} - \frac{d[CO_2]}{dt} \quad (17)$$

$$\dot{\omega}_{O_2} = 10,5 \frac{d[C_{10}H_{22}]}{dt} + 0,5 \frac{d[CO]}{dt} - 0,5 \frac{d[CO_2]}{dt} \quad (18)$$

$$\dot{\omega}_{CO_2} = -\frac{d[CO]}{dt} + \frac{d[CO_2]}{dt} \quad (19)$$

$$\dot{\omega}_{H_2O} = -11 \frac{d[C_{10}H_{22}]}{dt} \quad (20)$$

em que $\frac{d[C_{10}H_{22}]}{dt}$, $\frac{d[CO]}{dt}$ e $\frac{d[CO_2]}{dt}$ são dados pelas equações (9), (10) e (13), e $\dot{\omega}_{N_2}$ é nulo.

As entalpias de formação padrão, conforme Turns (2000), são:

$$h_{f,C_{10}H_{22}}^0 = -1758 \text{ kJ/kg}$$

$$h_{f,CO}^0 = -3948 \text{ kJ/kg}$$

$$h_{f,CO_2}^0 = -8944 \text{ kJ/kg}$$

$$h_{f,H_2O}^0 = -13436 \text{ kJ/kg}$$

$$h_{f,N_2}^0 = h_{f,N_2}^0 = 0 \text{ kJ/kg}$$

Os valores específicos à pressão constante, assumidos constantes para cada espécie química, conforme Turns (2000), são:

$$c_{p,C_{10}H_{22}} = 3,005 \text{ kJ/(kg.K)}$$

$$c_{p,CO} = 1,283 \text{ kJ/(kg.K)}$$

$$c_{p,CO_2} = 1,358 \text{ kJ/(kg.K)}$$

$$c_{p,H_2O} = 2,761 \text{ kJ/(kg.K)}$$

$$c_{p,O_2} = 1,166 \text{ kJ/(kg.K)}$$

$$c_{p,N_2} = 1,271 \text{ kJ/(kg.K)}$$

4.1 Condições de entrada no 1º reator

Conforme mencionado, anteriormente, na seção 3, a razão de equivalência no reator 1 é unitária, sendo assim, a massa de ar que é admitida nesse reator é igual à massa de ar estequiométrica. A partir da reação global, mostrada na equação (21),



$$\text{obtém-se } \left(\frac{m_{ar}}{m_{comb}} \right)_{esteq} = 15 \frac{kg_{ar}}{kg_{comb}}$$

A vazão mássica de combustível (\dot{m}_{comb}) fornecida para esse reator é de 0,122 ($\pm 10\%$) kg/s. Assim, a vazão mássica de ar (\dot{m}_a) na entrada do reator deve ser: $\dot{m}_a = 15 \dot{m}_{comb}$. Finalmente, pode-se expressar a vazão mássica total na entrada do reator 1 como:

$$\dot{m} = \dot{m}_a + \dot{m}_{comb} = 16 \dot{m}_{comb} \quad (22)$$

A temperatura de admissão do ar no reator 1 é obtida pela equação (23), a qual é válida para um processo de compressão isentrópica. Admite-se que o combustível é alimentado no reator à mesma temperatura do ar.

$$\frac{T_{desc}}{T_{adm}} = \left(\frac{P_{desc}}{P_{adm}} \right)^{\left(\frac{k-1}{k} \right)}$$

Dessa forma, T_{adm} é a temperatura do ar na admissão do compressor (298 K), P_{adm} é a pressão do ar na admissão do compressor (1 atm), T_{desc} é a temperatura do ar na descarga do compressor (obtida pela equação (23)), $T_{desc} = 646 \text{ K}$, P_{desc} é a pressão do ar na descarga do compressor (15 atm), e k é o

coeficiente isentrópico para o ar ($k = 1,4$).

As frações mássicas de $C_{10}H_{22}$, O_2 e N_2 na entrada do reator 1, necessárias para o cálculo da equação (15), podem ser obtidas através das equações (21) e (22), obtendo:

$$Y_{C_{10}H_{22},ent} = 0,0625$$

$$Y_{O_2,ent} = 0,1970$$

$$Y_{N_2,ent} = 0,7405$$

Alternativamente, pode-se determinar uma das frações mássicas como (utilizando N_2 como exemplo):

$$Y_{N_2,ent} = 1 - (Y_{C_{10}H_{22},ent} + Y_{O_2,ent})$$

Observa-se, nessa perspectiva, que as frações mássicas de H_2O , CO e CO_2 são nulas na entrada do reator 1.

4.2 Condições de entrada no 2º reator

A razão de equivalência global do sistema de reatores em série pode ser escrita da seguinte forma:

$$\phi = \frac{\left(\frac{m_{ar}}{m_{comb}} \right)_{esteq}}{\left(\frac{m_{ar}}{m_{comb}} \right)_{Reator\ 2} + \left(\frac{m_{ar}}{m_{comb}} \right)_{Reator\ 1}}$$

Assim, a massa de ar que é fornecida ao 2º reator é:

$$\dot{m}_{ar,2} = \dot{m}_{ar,1} \left(\frac{1-\phi}{\phi} \right) = 15 \dot{m}_{comb,1} \left(\frac{1-\phi}{\phi} \right)$$

A vazão mássica total no reator 2 (\dot{m}_2) é a soma da vazão mássica total no reator 1 (\dot{m}_1 dada pela equação 22) e a vazão mássica de ar novo fornecida ao reator 2 ($\dot{m}_{ar,2}$ dada pela equação 29), ou seja:

$$\dot{m}_2 = \dot{m}_1 + 15 \dot{m}_{comb,1} \left(\frac{1-\phi}{\phi} \right) = 16 \dot{m}_{comb,1} + 15 \dot{m}_{comb,1} \left(\frac{1-\phi}{\phi} \right) = \dot{m}_{comb,1} \left(\frac{15+\phi}{\phi} \right)$$

As frações mássicas de $C_{10}H_{22}$, O_2 , N_2 , H_2O , CO e CO_2 na entrada do reator 2 são determinadas como segue:

$$Y_{C_{10}H_{22},ent,2} = \frac{\dot{m}_1 Y_{C_{10}H_{22},saida,1}}{\dot{m}_2} = \frac{16 \dot{m}_{comb} Y_{C_{10}H_{22},saida,1}}{\dot{m}_{comb} \left(\frac{15+\phi}{\phi} \right)} = \frac{16\phi}{15+\phi} Y_{C_{10}H_{22},saida,1}$$

$$Y_{CO,ent,2} = \frac{16\phi}{15+\phi} Y_{CO,saida,1}$$

$$Y_{CO_2,ent,2} = \frac{16\phi}{15+\phi} Y_{CO_2,saida,1}$$

$$Y_{H_2O,ent,2} = \frac{16\phi}{15+\phi} Y_{H_2O,saida,1}$$

$$Y_{O_2,ent,2} = \frac{16\phi}{15+\phi} Y_{O_2,saida,1} + 0,21 \frac{\dot{m}_{ar,2}}{\dot{m}_2} = \frac{16\phi}{15+\phi} Y_{O_2,saida,1} + 0,21 \cdot 15 \frac{(1-\phi)}{(15+\phi)}$$

$$Y_{N_2,ent,2} = \frac{16\phi}{15+\phi} Y_{N_2,saida,1} + 0,79 \cdot 15 \frac{(1-\phi)}{(15+\phi)}$$

Alternativamente, pode-se determinar uma das frações mássicas como (utilizando N_2 como exemplo):

$$Y_{N_2,ent} = 1 - (Y_{C_{10}H_{22},ent} + Y_{O_2,ent} + Y_{CO_2,ent} + Y_{CO,ent} + Y_{H_2O,ent})$$

Observa-se que as frações mássicas de H_2O , CO e CO_2 não são nulas na entrada do reator 2, pois essas espécies químicas são produtos da combustão no reator 1.

Assume-se que a temperatura na entrada do reator 2, utilizada na equação (15), seja a média entre a temperatura de saída do reator 1 (T_1) e a temperatura de descarga do ar comprimido ($T_{desc} = 646$ K), ponderada pelas frações mássicas de ar comprimido e de produtos do reator 1.

5 Análise dos resultados

Resolvendo o sistema de equações algébricas (equações 1, 3 e 15), com as condições de entrada descritas na seção 4.1, obtém-se a temperatura dos produtos do reator 1 e as frações mássicas das espécies químicas, envolvidas no processo ($C_{10}H_{22}$, O_2 , N_2 , H_2O , CO e CO_2), conforme apresentado

na tabela 1. Uma vez que os reagentes (decano e ar) são alimentados à temperatura de 646 K, a temperatura dentro do reator (a qual é igual à da saída desse reator) é superior à temperatura adiabática de chama do combustível ($T_{ac} = 2277$ K (TURNES, 2000)). Observa-se, nesta tabela, que existe uma pequena parcela de combustível não reagido (0,60 % em massa) e que existe emissão de poluentes por este reator, justificando a instalação e operação em série de um segundo reator. Observa-se, ainda, que a variação na vazão mássica de combustível, fornecida ao reator ($\dot{m}_{comb} = 0,122 \pm 10\%$ kg/s), tem pouca influência sobre os resultados mostrados na tabela 1, sugerindo que o volume utilizado para este reator está acima do necessário.

Para o reator 2, considera-se a solução das mesmas equações (equações 1, 3 e 15), porém com as condições de entrada descritas na seção 4.2. A tabela 2 apresenta as temperaturas e frações mássicas na entrada e na saída (a qual é a mesma do interior) do reator 2, fixando a razão de equivalência global em 0,7 e variando a vazão mássica de combustível entre 0,1098 e 0,1342 kg/s. Novamente, observa-se a pequena influência na variação dos resultados (temperatura e frações mássicas das espécies) com a variação da vazão de combustível. Dessa forma, a tabela 2 apresenta um valor, apenas, para cada parâmetro, não havendo, portanto, a necessidade de explicitar a variação de vazão de combustível. Os resultados revelam que a variação da temperatura no reator 2 é pequena, quando comparada à variação no reator 1. Isso se deve ao fato de que a quantidade de combustível admitida no reator 2 é muito pequena ($Y_{C_{10}H_{22},ent,2} = 0,0043$ e $Y_{C_{10}H_{22},ent,1} = 0,062$). Além disso, observa-se uma substancial redução na fração mássica de CO , considerado um gás poluidor atmosférico.

Tabela 1- Temperaturas e frações mássicas de $C_{10}H_{22}$, O_2 , N_2 , H_2O , CO e CO_2 no reator 1, $f = 1,0$

	T (K)	$Y_{C_{10}H_{22}}$	Y_{O_2}	Y_{N_2}	Y_{CO_2}	Y_{CO}	Y_{H_2O}
Entrada	646	0,062	0,20	0,74	0	0	0
Saída	2414	0,0060	0,0000013	0,74	0,17	0,00044	0,079

Fonte: Os autores, (2011).

Tabela 2- Temperaturas e frações mássicas de $C_{10}H_{22}$, O_2 , N_2 , H_2O , CO e CO_2 no reator 2, $f = 0,7$

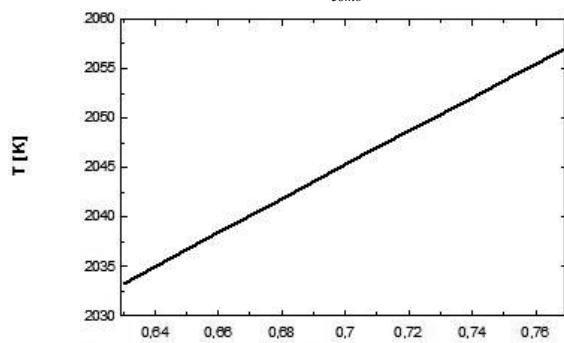
	T (K)	$Y_{C_{10}H_{22}}$	Y_{O_2}	Y_{N_2}	Y_{CO_2}	Y_{CO}	Y_{H_2O}
Entrada	1908	0,0043	0,060	0,75	0,12	0,00032	0,056
Saída	2045	4,2E-32	0,045	0,75	0,14	0,000025	0,062

Fonte: Os autores, (2011).

Em uma segunda análise, a vazão de combustível é assumida constante ($\dot{m}_{comb} = 0,122 \text{ kg/s}$), enquanto a razão de equivalência global (equação 28) é variada entre 0,63 e 0,77. Deve-se observar que razões de equivalência menores que 1 indicam uma mistura pobre (com excesso de ar) e, quanto menor a razão de equivalência, maior é o excesso de ar. Para esse caso, o mesmo conjunto de equações deve ser resolvido, ou seja, equações (1), (3) e (15), considerando as condições de entrada descritas nas seções 4.1 e 4.2, para os reatores 1 e 2, respectivamente. Uma vez que o reator 1 opera com razão de equivalência constante e unitária, os resultados obtidos para esse reator são os mesmos que estão mostrados na tabela 1. Porém, para o reator 2, a variação na razão de equivalência global influencia as suas condições de entrada, conforme evidenciado pelas equações (29) e (37), e, conseqüentemente, as condições de saída (ou no interior) desse reator. Pela figura 3, observa-se que o aumento da razão de equivalência na faixa descrita faz com que a temperatura no reator 2 aumente, uma vez que, aumentando a razão de equivalência, o excesso de ar é menor e, então, menos energia é consumida para aquecer o excesso de ar. Ainda, a relação entre o aumento da razão de equivalência e a redução no excesso de ar fica evidente através da

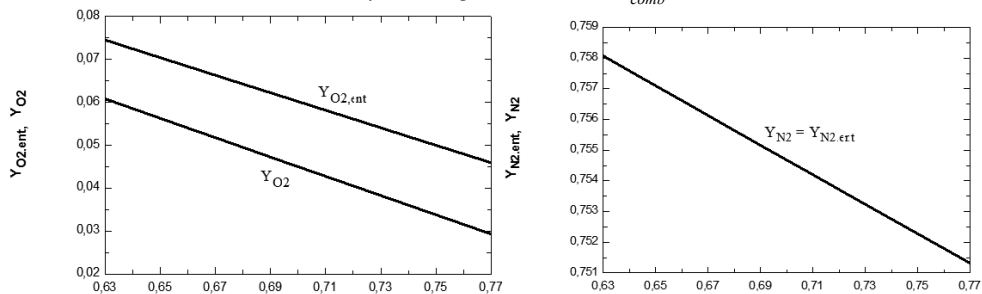
figura 4, onde se encontram evidenciadas a variação nas frações mássicas de O_2 e de N_2 na entrada e na saída do reator 2, em função da razão de equivalência global. As figuras 5 e 6 apresentam os resultados obtidos para as variações nas frações mássicas de $C_{10}H_{22}$, H_2O , CO_2 e CO na entrada e na saída do reator 2, em função da razão de equivalência global. Pode-se observar claramente, através dessas figuras as relações entre as formações de H_2O e CO_2 , assim como o consumo de $C_{10}H_{22}$ e CO , com a variação no excesso de ar.

Figura 3. Temperatura do reator 2 em função da razão de equivalência global, mantendo \dot{m}_{comb} constante



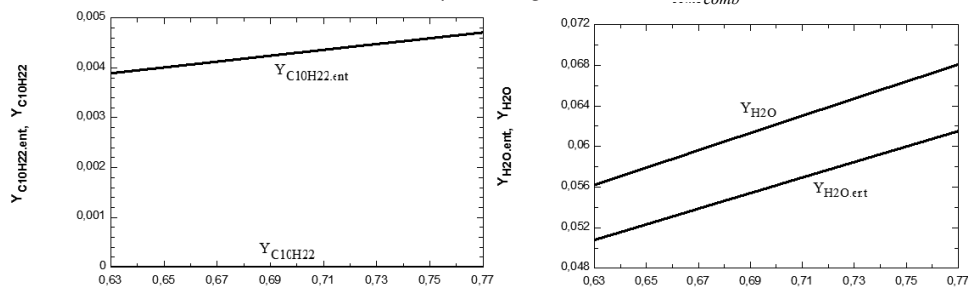
Fonte: Os autores, (2011).

Figura 4- Frações mássicas de O_2 (esquerda) e de N_2 (direita) na entrada e na saída do reator 2, em função da razão de equivalência global, mantendo \dot{m}_{comb} constante



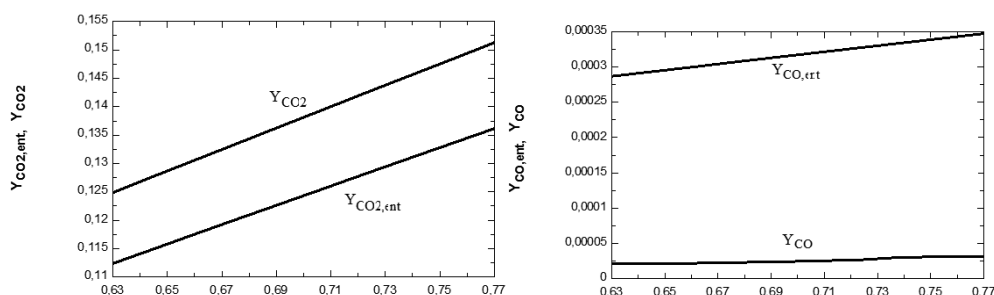
Fonte: Os autores, (2011).

Figura 5- Frações mássicas de $C_{10}H_{22}$ (esquerda) e de H_2O (direita) na entrada e na saída do reator 2, em função da razão de equivalência global, mantendo \dot{m}_{comb} constante



Fonte: Os autores, (2011).

Figura 6- Frações mássicas de CO₂ (esquerda) e de CO (direita) na entrada e na saída do reator 2, em função da razão de equivalência global, mantendo \dot{m}_{comb} constante



Fonte: Os autores, (2011).

6 Conclusões

O objetivo do presente estudo consiste na análise térmica e química da câmara de combustão de uma turbina a gás, considerando a metodologia de modelagem por dois reatores de mistura perfeita, associados em série. Considera-se ainda um mecanismo de dois passos para a reação, e verificam-se os efeitos das variações nas vazões de combustível e de ar nos resultados. De uma maneira geral, os resultados alcançados concordam fisicamente com o esperado, uma vez que a temperatura na saída do reator 1 é acima da temperatura de chama adiabática e existe uma pequena quantidade de combustível e de poluentes na sua saída, os quais são eliminados/reduzidos durante a passagem pelo reator 2, que apresenta temperatura na saída inferior à do primeiro reator.

Esses resultados demonstram a importância de modelos idealizados para a simulação de sistemas de combustão complexos, podendo ser analisados diversos parâmetros que participam das reações químicas e térmicas.

Referências

ANDREINI, A.; FACCHINI, B. Gas turbines design and off-design performance analysis with emissions evaluation. **Journal of Engineering for Gas Turbines and Power**, v. 126, p. 83-91, 2004.

BRADLEY, D.; CHIN, S. B.; HANKINSON, G. Aerodynamic and flame structure within a jet-stirred reactor. **Sixteenth Symposium (International) on Combustion**, The Combustion Institute, Pittsburgh, PA, p. 1571, 1977.

DUTERQUE, J.; AVEZERD, N.; BORGHI, R. Further results on nitrogen oxides production in combustion zones. **Combustion Science and Technology**, v. 25, p. 85 – 95, 1981.

FALCITELLI, M.; PASINI, S.; TOGNOTTI, L. Modeling practical combustion systems and predicting NOx emissions with an integrated CFD based approach. **Computers and Chemical Engineering**, v. 26, p. 1171-1183, 2002a.

FALCITELLI, M.; PASINI, S.; ROSSI, N.; TOGNOTTI, L. CFD+reactor network analysis: an integrated methodology for the modeling and optimisation of industrial systems for energy saving and pollution reduction. **Applied Thermal Engineering**, v. 22, p. 971-979, 2002b.

FARAVELLI, T.; BUA, L.; FRASSOLDATI, A.; ANTIFORA, A.; TOGNOTTI, L.; RANZI, E. A new procedure for predicting NOx in furnaces. **Computers and Chemical Engineering**, v. 25, p. 613-618, 2001.

GLARBOG, P.; MILLER, J. A.; KEE, R. J. Kinetic modelling and sensitivity analysis of nitrogen oxide formation in well-stirred reactors. **Combustion and Flame**, v. 65, p. 177 – 202, 1986.

LONGWELL, J. P.; WEISS, M. A. High temperature reaction rates in hydrocarbon combustion. **Industrial & Engineering Chemistry**, v. 47, p. 1634 – 1643, 1955.

MALTE, P. C.; SCHMIDT, S. C.; PRATT, D. T. Hydroxyl radical and atomic oxygen concentrations in high-Intensity turbulent combustion. **Sixteenth Symposium (International) on Combustion**, The Combustion Institute, Pittsburgh, PA, p. 145, 1977.

NIKSA, S.; LIU, G.-S. Incorporating detailed reaction mechanisms into simulations of coal-nitrogen conversion in p.f. flames. **Fuel**, v. 81, p. 2371-2385, 2002.

NOVOSELOV, I. V.; MALTE, P. C.; YUAN, S.; SRINIVASAN, R.; LEE, J. C. Y. Chemical reactor network application to emissions prediction for industrial DLE gas turbine. **Proceedings of GT2006 ASME Turbo**

Expo 2006: Power for Land, Sea and Air, Barcelona, 2006.

ORBEGOSO, E. M. M.; ROMEIRO, C. D.; FERREIRA, S. B.; FIGUEIRA DA SILVA, L. F. Emissions and thermodynamic performance simulation of an industrial gas turbine. **Journal of Propulsion and Power**, v. 27, p. 78-93, 2011.

SMITH, GREGORY, P., GOLDEN, DAVID M., FRENKLACH, MICHAEL, MORIARTY, NIGEL W., EITENEER, BORIS, GOLDENBERG, MIKHAIL, BOWMAN, C. THOMAS, HANSON, RONALD K,

SONG, SOONHO, GARDINER Jr., WILLIAM C., LISIANSKI, VITALI V., e QIN, ZHIWEI, 1999. **GRI-Mech 3.0**, Disponível em: <http://www.me.berkeley.edu/grin_mech/>. Acesso em: jul. 2011.

STEELE, R. C.; MALTE, P. C.; NICOL, D. G.; KRAMLICH, J. C. NO_x and N₂O in lean-premixed jet-stirred flames. **Combustion and Flame**, v. 100, p. 440-449, 1995.

URNS, S. R. **An introduction to combustion – conception and applications**. 2. ed. Singapore: McGraw-Hill, 2000.

