



VI CONGRESSO NACIONAL DE ENGENHARIA MECÂNICA  
VI NATIONAL CONGRESS OF MECHANICAL ENGINEERING  
18 a 21 de agosto de 2010 – Campina Grande – Paraíba - Brasil  
August 18 – 21, 2010 – Campina Grande – Paraíba – Brazil

## SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL DE CORRELAÇÕES ENTRE A FORMAÇÃO DA FULIGEM E DE NO<sub>x</sub>, RADIAÇÃO TÉRMICA E OEC

**Alex Álisson Bandeira Santos, alex.santos@cimatec.fieb.org.br**

SENAI CIMATEC – Centro Integrado de Manufatura e Tecnologia

CiEnAm – Centro Interdisciplinar em Energia e Ambiente – Universidade Federal da Bahia

**Ednildo Andrade Torres, ednildo@ufba.br**

Laboratório de Energia e Gás, Departamento de Engenharia Química, Universidade Federal da Bahia

CiEnAm – Centro Interdisciplinar em Energia e Ambiente – Universidade Federal da Bahia

**Pedro Afonso de Paula Pereira, pedroapp@ufba.br**

Instituto de Química, Universidade Federal da Bahia

CiEnAm – Centro Interdisciplinar em Energia e Ambiente – Universidade Federal da Bahia

**Resumo:** A simulação computacional em processos de combustão que tentam exprimir o comportamento da fuligem como meio participante na radiação térmica tem uma grande dificuldade para obtenção de resultados adequados por conta da falta de modelo de cinética química adequada para o cálculo da concentração da fuligem e posteriormente para o cálculo do coeficiente de emissão de radiação desta partícula e da radiação térmica emitida pela partícula. Quando se é utilizada na combustão a técnica de combustão enriquecida por oxigênio – OEC –, a precisão desta simulação diminui consideravelmente já que não existe modelo de cinética química para a produção de fuligem com o uso da OEC. Para a confirmação destas impossibilidades, o presente trabalho simulou em um pacote comercial de grande inserção no mercado, o ANSYS CFX, o processo de correlações entre a formação de fuligem, radiação térmica e a emissão de NO<sub>x</sub> com a utilização da OEC em uma câmara de combustão horizontal cilíndrica – chama confinada –, verificando divergências encontradas com a expectativa do fenômeno físico a ser desenvolvido baseado em trabalhos anteriores.

**Palavras-chave:** NO<sub>x</sub>, OEC, CFX, Fuligem

### 1. INTRODUÇÃO

A eficiência energética é um dos pontos fundamentais para a redução de gases estufas, emitidos dos processos de combustão industrial. Os queimadores industriais são, portanto, um dos principais equipamentos que devem ter a sua eficiência térmica implementada a fim de diminuir o consumo de combustíveis, como também reduzir a emissão de gases poluentes e estufas. Inúmeras técnicas são usadas para tal, como queima estagiada, queimadores com injeção de ar com swirl e recirculação de gases. Todavia, nem sempre a eficiência energética conseguida é suficiente para diminuir o consumo de combustíveis a níveis necessários na realidade atual.

Há cerca de uma década, surgiu o processo de combustão enriquecida por oxigênio (OEC), em que o ar de combustão é enriquecido por oxigênio, sendo que, segundo Baukal (1998), traz resultados interessantes, como o aumento de produtividade, eficiência térmica, menor volume de gases de exaustão, maior eficiência dos processos de transferência de calor e redução do consumo de combustível. Esta é uma técnica já difundida em processos que trabalham com altas temperaturas como siderurgias, cerâmicas e em incineradores de resíduos, todavia sem registros de utilização em plantas termoeletricas e na indústria de petróleo e gás.

Já a simulação computacional em processos de combustão que tentam exprimir o comportamento da fuligem como meio participante na radiação térmica tem uma grande dificuldade para obtenção de resultados adequados por conta da falta de modelo de cinética química adequada para o cálculo da concentração da fuligem e posteriormente para o cálculo do coeficiente de emissão de radiação desta partícula e da radiação térmica emitida pela partícula. Quando se é utilizada na combustão a técnica de OEC, a precisão desta simulação diminui consideravelmente já que não existe modelo de cinética química para a produção de fuligem com o uso da OEC.

Na literatura existem trabalhos que estudaram a emissão de radiação térmica e de fuligem em chamas abertas turbulentas difusas de CO, H<sub>2</sub>, CH<sub>4</sub>, C<sub>2</sub>H<sub>6</sub>, C<sub>3</sub>H<sub>8</sub>, C<sub>2</sub>H<sub>4</sub> e C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>, variando as condições de operação desde a produção de convecção forçada no escoamento do ar até a condição de convecção livre (Becker e Liang, 1982).

A modelagem da formação de fuligem em chamas é uma difícil tarefa porque, sendo necessário contabilizar a interação entre a mistura de componentes causada pela turbulência, estrutura da chama, química da formação da fuligem e a radiação térmica (Faeth et al., 1989).

Os efeitos da radiação transiente para a resolução da equação de entalpia total numa fração de mistura foram estudados (Gore e Jang, 1992). Um simples, mas efetivo tratamento da radiação foi usado a partir de uma relação de estado da fração volumétrica da fuligem, baseada em dados experimentais. A taxa de dissipação da fração da mistura foi tratada como parâmetro. Uma única estrutura de chama foi observada, envolvendo um ponto de inflexão na temperatura quando analisada a partir da fração da mistura, próximo da camada de fuligem formada na chama, identificando a influência da fuligem na participação da transferência de calor na chama.

A formação da fuligem em chamas turbulentas pela interação de um modelo de formação, Leung (1991) com o modelo de turbulência k- $\epsilon$  e um modelo de combustão laminar foi estudada (Fairweather et al., 1992). Os efeitos da radiação foram computados assumindo que fração fixa da energia química gerada pela combustão é perdida na fronteira via radiação térmica. Resultados experimentais obtidos em chamas não pré-misturadas de propano foram próximos às predições do modelo.

O efeito de atenuação do fluxo de calor por radiação causado pelo efeito barreira das partículas de fuligem, notadamente um meio dominante nos processos de absorção/emissão da radiação térmica foi avaliado (Chen, 1983). Os autores avaliaram que os efeitos de condução e convecção na chama não podem ser negligenciados.

As patentes americanas nº 5.199.866 (Joshi et al., 1993), nº 5.256.058 (Slavejkov et al., 1993) e a de nº 5.346.390 (Slavejkov et al., 1994) apresentam queimadores e métodos para a produção de chamas luminosas. Todas estas patentes utilizam a técnica de enriquecimento da combustão com O<sub>2</sub>. Tem sido encontrado que alguns queimadores possuem baixa luminosidade para altas taxas de combustão. Chamas com baixa luminosidade, não possuem transferência de calor por radiação eficiente e produzem altas temperaturas de chama, ocasionando alta emissão de NOx. As chamas cobertas nestas patentes estão limitadas a queimadores com formatos cilíndricos.

Já a patente americana nº 5.302.112 Nabors e Andrews (1994) apresenta o desenvolvimento de um queimador que opera com uma menor emissão de NOx e de particulado. O queimador opera com enriquecimento de O<sub>2</sub>. Através de arranjos escalonados de mistura entre combustível e oxidante, os autores afirmam ter conseguido o controle da luminosidade da chama – indicativo de radiação térmica – e por consequência, o queimador seria capaz de operar com altas ou baixas temperaturas de chama, dependendo da aplicação desejada. Isto indica mais um aspecto do controle da radiação participante da fuligem (radiação luminosa) numa chama, em uma aplicação de aquecimento, em que altas produtividades devem estar alinhadas a baixa emissão de poluentes.

Na patente americana nº 5.575.637, Slavejkov et al. (1993) foi apresentado o desenvolvimento de um queimador que usa ar enriquecido, em que, segundo o autor, aumentaria a transferência de calor por radiação em faixas do espectro visível, em chamas de gás natural ou em outros combustíveis gasosos, devido a grande participação da fuligem neste mecanismo de transferência de calor. Além de um melhor efeito de transferência de calor por radiação, os autores informaram uma redução da emissão de NOx, ocasionado pela redução da temperatura de chama decorrente da transferência de calor da chama. Os autores afirmaram que chamas luminosas e não luminosas (produzidas pela emissão de radiação por H<sub>2</sub>O e CO<sub>2</sub>) produzem em torno de 15% e 6% da radiação no comprimento de onda entre 0,6 e 1,5  $\mu$ m, respectivamente. Também seria importante notar que a radiação induzida pela fuligem não está limitada a faixa de 0,6-1,5  $\mu$ m, como também em maiores comprimentos de onda.

A proposição de patente, já descrita anteriormente, de Slavejkov et al. (1996) de um projeto de queimador que possibilita o aumento artificial da fuligem e em consequência a perda de calor por radiação da chama e a redução de emissão de NOx foi avaliada (Wang et al., 2002). Para esta avaliação, os autores utilizaram o teor de 30% de O<sub>2</sub> no oxidante. Para esta condição, a avaliação numérica executada apresentou resultados que sugerem que a implementação da formação da fuligem pode ser uma ferramenta efetiva na estratégia de redução de redução de NOx e maximização da transferência de calor.

Na literatura um estudo experimental em que foram analisadas as características da combustão e da radiação térmica em chamas de metano/ar e de metano/oxigênio, identificando o papel da fuligem na radiação foi implementado (Hwang e Gore, 2002).

A influência da OEC na formação da fuligem, radiação térmica e nas características de emissão de poluentes, em especial, especificamente de CO e NOx, em chamas turbulentas de propano, gás natural e eteno foi estudada (Kent e Bastin, 1984). A concentração de fuligem foi calculada a partir dos dados experimentais pela técnica de extinção da luz de laser (LLE) utilizada primeiramente com este objetivo por Kent e Bastin (1984).

Um estudo computacional foi elaborado baseado na fluidodinâmica computacional (CFD) da interação entre fuligem, radiação térmica e emissão de NOx em chamas turbulentas difusas enriquecidas com O<sub>2</sub>, utilizando como combustível o propano (Wang et al., 2005). Os autores fizeram um modelo estruturado da dinâmica da turbulência, acoplada ao mecanismo químico de formação da fuligem e de NOx, além do modelo de transferência de calor por radiação. Aqui vale ressaltar os modelos de formação de fuligem e de radiação utilizados no trabalho. O modelo seguido de formação da fuligem, avaliando desde o crescimento à oxidação desta, foi o de Wang e Frencklach (1987), que associado à equação mestra de Smoluchowski de momentum, apresentada por Frencklach (2002), forneceu a evolução da distribuição das partículas de fuligem, além de sua dinâmica.

Cao et al. (2010) usaram o pacote de CFD Fluent para analisar a formação de NOx em um processo de combustão com o uso da OEC.

O presente trabalho simulou em um pacote comercial de CFD de grande inserção no mercado, o ANSYS CFX, o processo de correlações entre a formação de fuligem, radiação térmica e a emissão de NOx com a utilização da OEC em uma câmara de combustão horizontal cilíndrica, uma chama confinada. A expectativa é que fosse verificada uma ampliação da radiação térmica com o uso da OEC, e, em decorrência do aumento da formação da fuligem, e, por

consequente, uma redução da formação de NOx com a redução da temperatura de chama, identificando assim as correlações entre estes parâmetros.

## 2. APRESENTAÇÃO DO PROBLEMA

A simulação proposta analisa chamas geradas numa câmara de combustão, a qual consiste de um queimador com dois tubos concêntricos: um tubo central com 5mm de diâmetro, e um tubo externo com 100mm de diâmetro, e uma câmara com 1,35m de comprimento. Gás natural escoava através do tubo interno, enquanto o ar puro, ou ar enriquecido, escoava através da região anular entre os tubos externo e interno. O ar puro e oxigênio foram pré-misturados antes da entrada na câmara de combustão para a produção do ar enriquecido. Foram calculados na simulação a concentração da fuligem, emissão de NOx na saída da câmara como também a radiação térmica emitida na câmara na faixa de influência da fuligem, entre 0,6 a 3 µm.

Para examinar os efeitos do teor de oxigênio no ar de combustão, as simulações foram realizadas comparando os teores com 23 e 25% de O<sub>2</sub> no ar de combustão – níveis de enriquecimento com O<sub>2</sub> de 2% e 4%, respectivamente – com as realizadas com o ar puro (21% O<sub>2</sub>). Nos testes foram mantidos razões de equivalência (Φ) entre 1,3 – 0,7. A vazão de gás natural foi mantida em 0,0003m<sup>3</sup>/s (18 L/min), estabelecido com 20°C e pressão atmosférica (101kPa). A tabela 1 sumariza as condições usadas nas simulações.

**Tabela 1. Condições testadas.**

Teores de O <sub>2</sub>	Φ
21%, 23%	1,3
e	1,1
25%	1,0
	0,9
	0,7

## 3. MODELO NO ANSYS CFX

O ANSYS CFX processa numericamente a resolução em conjunto das equações de conservação de momentum, energia e de massa de forma tridimensional, resultando em perfis de vários parâmetros, como temperatura, concentração de NOx, pressão, velocidade entre outros. O modelo de turbulência utilizado foi o modelo k-ε.

O modelo utilizado para o cálculo da formação de fuligem baseia-se numa metodologia descrita por Magnussen e Hjertager (1976), que propõe um modelo de cinética química para a formação e oxidação da fuligem. O modelo de formação da fuligem é descrito em dois estágios, o primeiro representa a formação do radical núcleo precursor da fuligem, e o segundo estágio representa a formação da partícula de fuligem a partir destes radicais núcleos. As equações 5.9 e 5.10 representam estes dois estágios. A concentração da fuligem é determinada através da resolução de um sistema composto pelas equações 5.9 e 5.10.

$$R_{n,f} = n_o + (f - g)n - g_o n N \quad (1)$$

$$n_o = a_o c_f \exp\left(\frac{-E}{RT}\right) \quad (2)$$

R<sub>n,f</sub> é a taxa de formação de radicais núcleos percussores da partícula de fuligem de origem do combustível dada em partículas/ m<sup>3</sup>/s, n é a concentração dos radicais núcleos (partículas/m<sup>3</sup>), f,g, g<sub>o</sub> são coeficientes da reação de formação da partícula, e, N é a concentração das partículas de fuligem dada em partículas/m<sup>3</sup>.

O item no da equação é a taxa de formação espontânea dos radicais núcleos dada em partículas/ m<sup>3</sup>/s, a<sub>o</sub> é uma constante de reação, c<sub>f</sub> é a concentração mássica de combustível (kg/m<sup>3</sup>), E é a energia de ativação da reação, T a temperatura absoluta, e R a constante universal dos gases.

A oxidação da fuligem no modelo proposto é também dividida em dois estágios. O primeiro determina a oxidação em regiões nas quais a concentração da fuligem é maior que a concentração de oxigênio disponível, enquanto o segundo estágio determina o nível de oxidação em regiões onde a oxidação de fuligem compete com a oxidação de hidrocarbonetos dissociados do combustível não queimados. Estes dois estágios de oxidação são expressos pelas equações 5.11 e 5.12.

$$R_{s,c} = A c_s \left(\frac{\varepsilon}{k}\right) \quad (3)$$

$$R_{s,c} = A \left( \frac{\bar{c}_{O_2}}{r_s} \right) \left( \frac{\bar{\epsilon}}{k} \right) \left( \frac{\bar{c}_s r_s}{\bar{c}_s r_s + \bar{c}_f r_f} \right) \quad (4)$$

$R_{s,c}$  representa a taxa de combustão da fuligem dada em  $\text{kg/m}^3/\text{s}$ ,  $\bar{c}_{O_2}$ ,  $\bar{c}_s$  e  $\bar{c}_f$  são as concentrações médias locais de oxigênio, fuligem e hidrocarbonetos dissociados não queimados,  $r_s$  é o oxigênio requerido para queima estequiométrica de 1kg de fuligem,  $e$ ,  $r_f$  é o oxigênio requerido para a queima estequiométrica de 1kg de hidrocarbonetos dissociados não queimados.  $E$  é a taxa de dissipação da energia cinética turbulenta e  $k$  é a energia cinética turbulenta.

Com o balanço entre formação e oxidação da fuligem o modelo prediz o perfil de concentração da fuligem ao longo da chama. Neste modelo não está previsto a condição de utilização da OEC, e, perdas de energia por radiação térmica.

Para a simulação da transferência de calor por radiação térmica foi utilizado o método estatístico de Monte Carlo, que segundo Goldstein (1986) este faz a análise da probabilidade de absorção de pacotes de energia, sendo um método bastante utilizado nas aplicações de engenharia. No software ANSYS CFX foi estabelecido este método para aplicação em meios participantes, ou seja, a transferência de calor em meios que transferem calor entre si, como ocorre em chamas. Nesta análise foram verificadas as taxas de calor por radiação no espectro de influência da fuligem, de 0,6 a 3  $\mu\text{m}$ .

Já a formação de  $\text{NO}_x$  é calculada através das contribuições dos modelos de  $\text{NO}_x$  térmico de Zeldovich como também pelo modelo de  $\text{NO}_x$  imediato de Fenimore, os dois descritos anteriormente na revisão da literatura. Como critérios de convergência foram utilizados erros residuais na simulação entre  $10^{-3}$  e  $10^{-4}$ .

#### 4. RESULTADOS DA SIMULAÇÃO

Nas figuras 1 e 2 são apresentados os perfis de concentração da fuligem calculados para a razão de equivalência de 0,9 com teores de  $\text{O}_2$  21 e 25%. Já as figuras 3 e 4 apresentam os perfis de concentração da fuligem para a razão de equivalência de 1,1 com teores de  $\text{O}_2$  de 21 e 25%. Estas razões de equivalência exprimem a tendência de formação para as outras razões de equivalência estudadas.

Analisando a linha de centro da câmara onde é desenvolvida a chama, percebe-se que a utilização da OEC trouxe as chamas uma tendência de aumento da concentração da fuligem ao longo da câmara em comparação a queima com o ar atmosférico.

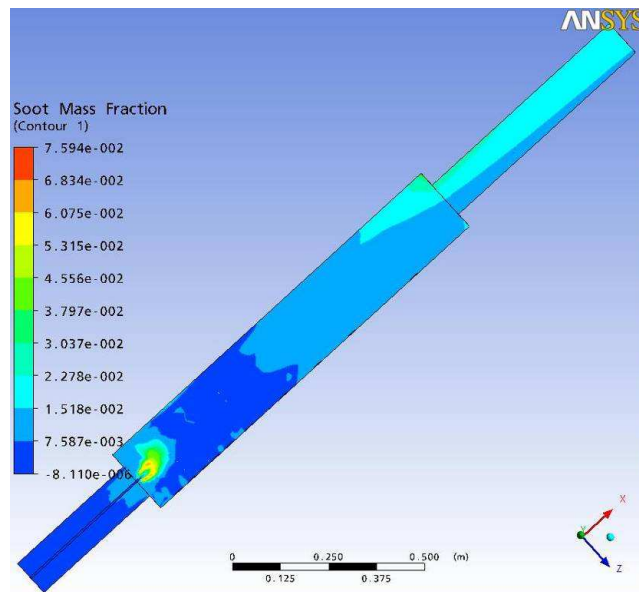


Figura 1: Fração mássica da fuligem encontrada ao longo da câmara em função da razão de equivalência  $RE = 0,9$  e teor de  $\text{O}_2$  de 21%.

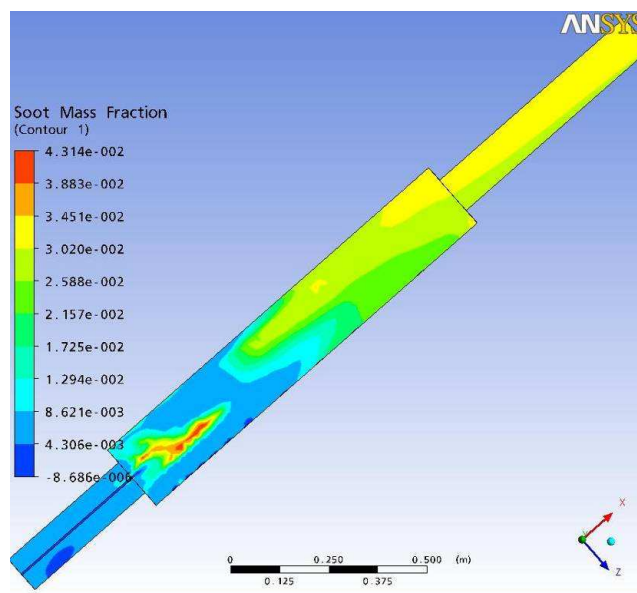


Figura 2: Fração mássica da fuligem encontrada ao longo da câmara em função da razão de equivalência  $RE = 0,9$  e teor de  $O_2$  de 25%.

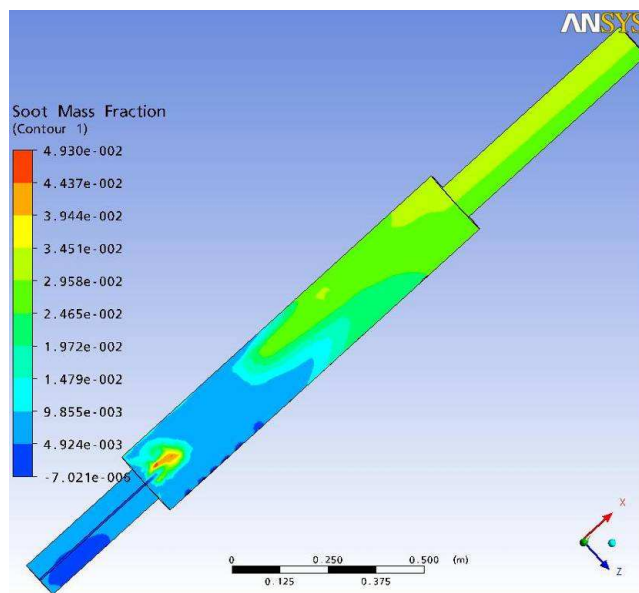


Figura 3: Fração mássica da fuligem encontrada ao longo da câmara em função da razão de equivalência  $RE = 1,1$  e teor de  $O_2$  de 21%.

Apesar do modelo do CFX não ser específico para o uso da OEC, qualitativamente a expectativa de aumento da concentração da fuligem no início da chama foi atendida. Todavia a de redução no fim da câmara não foi verificada.

Para a avaliação da interação entre a formação de fuligem, radiação térmica e formação de  $NO_x$  com o uso da OEC também foram simulados no CFX o comportamento destes parâmetros nas várias razões de equivalência e teores de  $O_2$  no oxidante.

Na Figura 5 são apresentados as concentrações de  $NO_x$  encontradas na saída da câmara de combustão em todas as razões de equivalência testadas.

Como expectativa, o aumento de formação da fuligem traria um aumento da radiação térmica e, por conseguinte uma redução da emissão de  $NO_x$  na saída da câmara. Todavia, o que se verifica na simulação é o aumento da emissão de  $NO_x$  na câmara, possivelmente pelo aumento da temperatura percebido na simulação com o uso da OEC, não atendendo a expectativa gerada em torno da análise.

Na figura 5 percebe-se claramente a tendência verificada em todas as razões de equivalência do aumento da emissão de  $NO_x$  com o uso da OEC. O aumento da formação da fuligem não trouxe resultados na redução da emissão de  $NO_x$ .

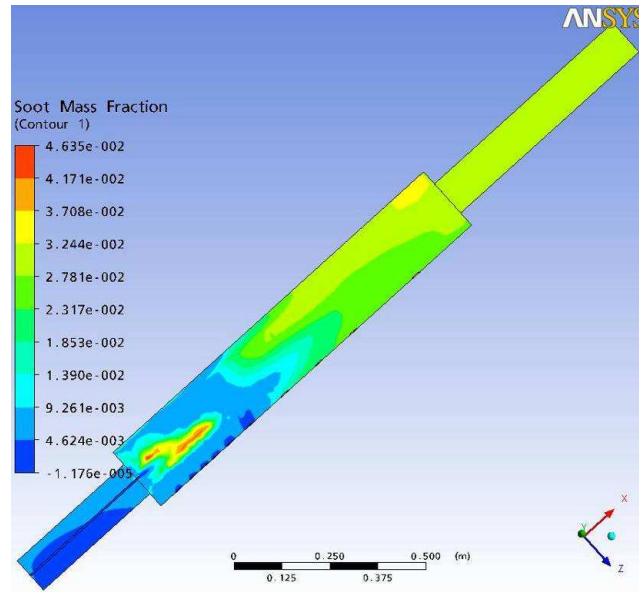


Figura 4: Fração mássica da fuligem encontrada ao longo da câmara em função da razão de equivalência  $RE = 1,1$  e teor de  $O_2$  de 25%.

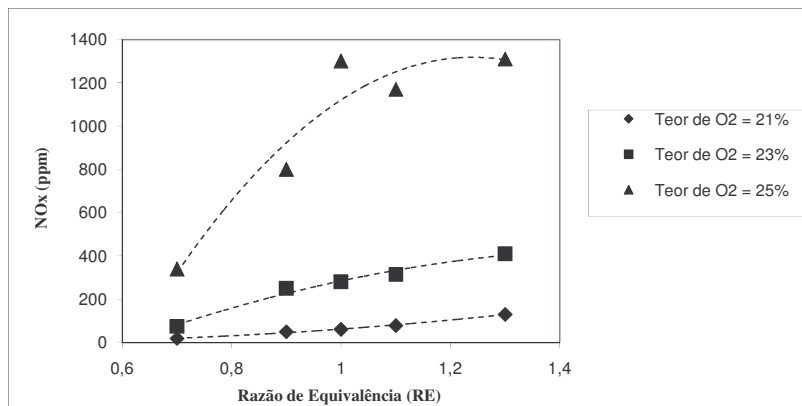


Figura 5: Concentração de NO na saída da câmara de combustão.

Também foi simulada a radiação térmica que emerge nos pontos de medição na câmara. A figura 6 apresenta a média dos valores encontrados nos dez pontos de medição, para cada condição testada, mostrando a tendência da simulação para a radiação no espectro de influência da fuligem.

Verifica-se um aumento da transferência de calor com o uso da OEC, sendo potencializado nas duas condições de enriquecimento, em especial na condição de 25%. Isto possivelmente decorra do aumento em conjunto da temperatura da chama como também da formação de fuligem.

Com o aumento da temperatura espera-se um aumento da energia disponível para transferência como também da formação da fuligem. Com o aumento da concentração da fuligem, o meio para a transferência de calor é potencializado na chama.

Por fim percebe-se que a simulação em CFX não possui a correlação esperada entre a formação da fuligem e de NOx, e, da radiação térmica. Apesar de que a radiação térmica tenha aumentado com a implementação da fuligem na chama.

Um dos possíveis pontos para a falha da interação entre estes fenômenos é a falta de um modelo adequado para a formação da fuligem com a OEC, bem como de um modelo adequado de radiação térmica que introduza a fuligem como meio participante na radiação.



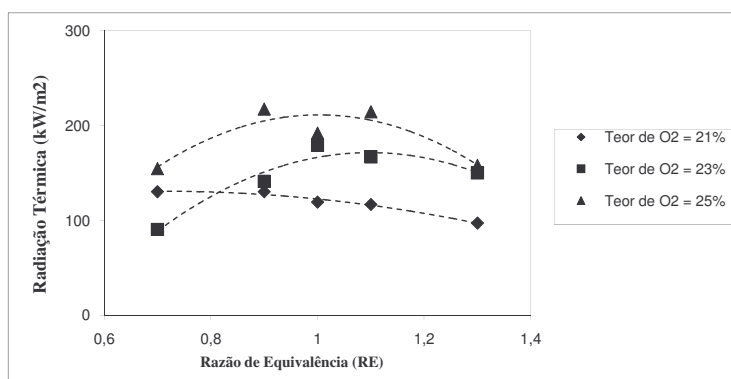


Figura 6: Radiação Térmica média encontrada ao longo da câmara em função da razão de equivalência.

Para a validação das considerações apresentadas, o modelo foi comparado com resultados experimentais de formação de NOx apresentados por Santos et al. (2009). A formação de NOx foi escolhida já que é o parâmetro que exprime a consequência das correlações entre fuligem, radiação, OEC. Aumentando a concentração da fuligem, implementa-se a radiação reduzindo a temperatura de chama e por consequência, reduz-se a formação de NOx térmico, principal fonte de formação de NOx em sistemas de combustão.

A figura 7 apresenta a comparação dos resultados entre a simulação em CFX e Santos et al. (2009). Os resultados numéricos para a concentração de NOx divergem bastante da condição experimental, em especial na condição de 4% de enriquecimento. Os resultados encontrados para a queima com o ar possuíram boa aderência aos resultados experimentais, o que mostra que a simulação no que tange a formação de NOx apresenta-se adequada para a queima com ar.

Possivelmente isto é em decorrência do modelo não produzir adequadamente as correlações da OEC, concentração de fuligem, radiação térmica e formação de NOx. Como o modelo não exprime adequadamente estas correlações, os níveis de temperatura permanecem mais elevados, aumento os níveis de concentração de óxidos de nitrogênio através do mecanismo de NOx térmico.

## 5. CONCLUSÕES

Conclui-se que a simulação em CFX não possui a correlação esperada entre a formação da fuligem e de NOx, e, da radiação térmica, apesar de que a radiação térmica tenha aumentado com a implementação da fuligem na chama. Um dos possíveis pontos para a falha da interação entre estes fenômenos é a falta de um modelo adequado para a formação da fuligem com a OEC, bem como de um modelo adequado de radiação térmica que introduza a fuligem como meio participante na radiação.

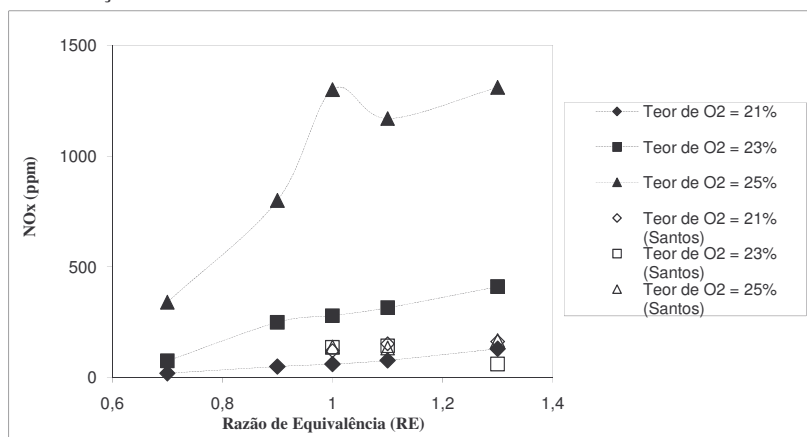


Figura 7: Comparação dos resultados em CFX e em Santos et al. (2009) da Concentração de NO na saída da câmara de combustão.

## 6. REFERÊNCIAS

- Baukal Jr., C.E. "Oxygen-Enhanced Combustion", 1st ed. New York: CRC Press, 1998, 369p.
- Becker, H.A., Liang, D., 1982, "Total Emission of Soot and Thermal Radiation by Free Turbulent Diffusion Flames", *Combustion and Flame*, v. 44, p. 305-318.
- Cao, H., Sun, S., Liu, Y., Wall, T.F., 2010, "Computational Fluid Dynamics Modeling of NO<sub>x</sub> Reduction Mechanism in Oxy-Fuel Combustion", *Energy & Fuels*, v. 24, p. 131-135.
- Faeth, G. M., Gore, J. P., Chuech, S. G., Jeng, S. M., 1989, *Annu. Rev. Numerical Fluid Mech. Heat Trans.*, v. 2, p.1-38.
- Fairweather, M., Jones, W. P., Lindstedt, R. P., 1992, *Combust. Flame*, v. 89, p.45-63.
- Frenklach, M., 2002, *Chem. Eng. Sci.* V. 57, p.2229-2239.
- Goldstein Jr, L. "Apostila Radiação Térmica", 1a. ed. Campinas: UNICAMP, 1986.
- Gore, J. P., Jang, J. H., 1992, *J.Heat Transfer*, v, 114, p.234-242.
- Hwang S.S., Gore, J.P., 2002, "Characteristics of combustion and radiation heat transfer of an oxygen-enhanced flame burner", *Proc Instn Mech Engrs, J Power and Energy*, v. 216 Part A, p. 379-386.
- Joshi, M.L., Nabors, J.K., Slavejkov, A.G., 1993, "Adjustable Momentum Self-Cooled Oxy/Fuel Burner for Heating in High Temperature Environments", U.S. Patent nº 5.199.866.
- Kent, J.H., Bastin, S.J., 1984, "Parametric effects on sooting in turbulent acetylene", *Combustion and Flame*, v. 56, p. 29-42.
- Leung, K.M., Lindstedt, R.P., 1991, "A simplified reaction mechanism for soot formation in non premixed flames", *Combustion and Flame*, v. 87, p. 289-305.
- Magnussen, B. F., and Hjertager, B. H., 1976, "On Mathematical Modeling of Turbulent Combustion with Special Emphasis on Soot Formation and Combustion", Sixteenth Symposium (International) on Combustion, p.719-729.
- Nabors Jr, J.K., Andrews, W.C., 1994, "Burner Apparatus and Method of Operation Thereof", U.S. Patent nº 5.302.112.
- Santos, A.A.B., Torres, E.A., Pereira, P.A.P., 2002, "Experimental Investigation of O<sub>2</sub> Enriched Confined Flames", 22nd International Conference on Efficiency, Cost, Optimization Simulation and Environmental Impact of Energy Systems, Foz do Iguaçu.
- Slavejkov, A.G., Zurecki, Z., Joshi, M.L., Nabors, J.K., 1993, "Method and Apparatus for Oxy-fuel Heating with Lowered NO<sub>x</sub> in High Temperature Corrosive Environments", U.S. Patent nº 5.256.058.
- Slavejkov, A.G., Zurecki, Z., Joshi, M.L., Nabors, J.K., 1994, "Method and Apparatus for Oxy-fuel Heating with Lowered NO<sub>x</sub> in High Temperature Corrosive Environments", U.S. Patent nº 5.346.390.
- Slavejkov, A.G., Gosling, T.M., Knorr Jr, R.E., 1996, "Method and Device for Low NO<sub>x</sub> High Efficiency Heating in High Temperature furnaces", U.S. Patent nº 5.575.637.
- Wang, L., Endrud, N. E., Turns, S.R., D'Agostini, M.D., Slavejkov, A. G., 2002, "A study of the influence of Oxygen Index on soot, radiation, and emission characteristics of turbulent jet flames", *Combustion Science and Technology*, v. 174(8), p. 45-72.
- Wang, H., Frenklach, M., 1997, *Combust. Flame*, v. 110, p. 173-221.
- Wang, L., Haworth, D.C., Turns, S.R., Modest, M.F., 2005, "Interactions Among Soot, Thermal Radiation, and NO<sub>x</sub> Emissions in Oxygen-Enriched Turbulent Nonpremixed Flames: A Computational Fluid Dynamics Modeling Study", *Combustion and Flame*, v. 141, p. 170-179.

## 7. DIREITOS AUTORAIS

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





**VI CONGRESSO NACIONAL DE ENGENHARIA MECÂNICA**  
**VI NATIONAL CONGRESS OF MECHANICAL ENGINEERING**  
**18 a 21 de agosto de 2010 – Campina Grande – Paraíba - Brasil**  
*August 18 – 21, 2010 – Campina Grande – Paraíba – Brazil*

## **COMPUTATIONAL SIMULATION OF CORRELATIONS AMONG SOOT AND NO<sub>x</sub> FORMATION, THERMAL RADIATION AND OEC**

**Alex Álisson Bandeira Santos, alex.santos@cimatec.fieb.org.br**

SENAI CIMATEC – Integrated Center of Manufacturing and Technology

CiEnAm - Interdisciplinary Center of Energy and Environment – Federal University of Bahia

**Ednildo Andrade Torres, ednildo@ufba.br**

Laboratory of Energy and Gas, Department of Chemical Engineering, Federal University of Bahia

CiEnAm - Interdisciplinary Center of Energy and Environment – Federal University of Bahia

**Pedro Afonso de Paula Pereira, pedroapp@ufba.br**

Chemistry Institute, Federal University of Bahia

CiEnAm - Interdisciplinary Center of Energy and Environment – Federal University of Bahia

***Abstract.** A computational simulation of combustion processes that attempt to express the behavior of soot as a participant in the thermal radiation has a great difficulty in obtaining adequate results due to the lack of chemical kinetics model for calculating the soot concentration and then to the calculating the emission coefficient of particle radiation and thermal radiation emitted by the particle. When it is used in the combustion technique of oxygen-enhanced combustion - OEC - the accuracy of the simulation is significantly reduced since there is no model of chemical kinetics for the production of soot with the use of OEC. For confirmation of these impossibilities, this paper simulated in a package large commercial market integration, ANSYS CFX, the process of correlation between the soot formation, thermal radiation and the emission of NO<sub>x</sub> with the use of OEC in a horizontal cylindrical combustion chamber - confined flames - by checking differences found with the expectation of a physical phenomenon to be developed based on previous work.*

**Keywords:** NO<sub>x</sub>, OEC, CFX, Soot

### **1. RESPONSIBILITY NOTICE**

The authors are the only responsible for the printed material included in this paper.