

DETERMINAÇÃO DE NO_x E CO NA EXAUSTÃO DE UMA CÂMARA DE COMBUSTÃO A PARTIR DA METODOLOGIA DE CADEIA DE REATORES QUÍMICOS.

J. A. VIALICH¹, F. Y. NARA¹, E. M. YAMAO¹, T. C. MELLO¹, T. B. MARCHESE¹, F. CHIESA²

¹ Institutos Lactec

² Usina Elétrica a Gás de Araucária - UEGA
E-mail para contato: josevialich@gmail.com

RESUMO – O presente trabalho propõe a utilização da metodologia de cadeia de reatores químicos para descrever o processo de combustão do gás natural no interior do combustor de uma turbina *Heavy-Duty*, 176 MW. O combustor foi modelado utilizando Fluidodinâmica Computacional (CFD) de modo que fossem identificadas regiões de escoamento turbulento e de escoamento com uma direção preferencial. A partir dos resultados obtidos por CFD foram propostas três cadeias de reatores químicos que melhor representasse o escoamento. A partir das cadeias de reatores químicos propostas, foram realizadas simulações do processo de combustão do gás natural utilizando o *software* ANSYS Chemkin e foi identificada a cadeia que melhor representasse os resultados das concentrações das emissões de NO_x e de CO medidos em campo.

1. INTRODUÇÃO

Óxidos de nitrogênio (NO_x) são compostos por NO e NO₂ e são formados em processos de combustão (MAFRA, 2000). Esses gases são altamente poluentes e devido a sua ação oxidante possuem efeitos sobre a saúde humana podendo causar problemas respiratórios e pulmonares (RAUB, 1999).

Outro gás tóxico formado nos processos de combustão é o monóxido de carbono (CO). Este gás é formado em processos de combustão em situações não ideais, ou seja, em processos em que nem todo o carbono disponível é oxidado a dióxido de carbono (CO₂). A alta toxicidade do CO está relacionada com a alta afinidade com a hemoglobina do sangue, substituindo o oxigênio reduzindo a alimentação de O₂ ao cérebro e outros órgãos (RAUB, 1999).

Através da modelagem por cadeia de reatores químicos, é possível se realizar a modelagem térmica e química de um processo de combustão em um combustor de uma turbina a gás natural. Através desta metodologia, a mecânica dos fluidos é simplificada, entretanto é dado um tratamento mais detalhado da cinética química. Ela consiste na utilização de modelos matemáticos idealizados de dispositivos utilizados em processos químicos como reatores químicos de mistura perfeita (CSTR) e reatores químicos de escoamento uniforme (PFR) (JUNIOR, 2012).

A simulação da cadeia de reatores químicos proposta no presente trabalho foi realizada utilizando o *software* CHEMKIN-PRO. Este *software* possui modelos que representam diversos tipos de reatores químicos, assim como modelos que representam as entradas de gás, zonas de mistura sem reação química e exaustão. O *software* utilizado faz uso do algoritmo de solução numérica denominado TWOPNT, utilizado na solução numérica de problemas em regime estacionário (JUNIOR, 2012).

O mecanismo de formação de NO_x e de CO em um processo de combustão é muito complexo, devido a isto foram propostos diversos mecanismos de reação. Dentre os mecanismos propostos, o mecanismo GriMech3.0 se destaca devido a capacidade de descrever a ignição e a propagação de chama do gás natural (SMITH, et al. 2000).

2. METODOLOGIA

O presente trabalho tem como objetivo o estudo do uso da metodologia de cadeia de reatores químicos para descrever o processo de combustão no interior do combustor de uma turbina a gás através da predição de concentrações de NO_x e CO na exaustão da turbina.

Neste trabalho o combustor de uma turbina do tipo *Heavy-Duty*, 176 MW, câmara de combustão tipo anelar com 16 combustores, 16 estágios de compressão e 4 estágios de turbina operando a plena carga, foi idealizado como uma cadeia de reatores químicos de mistura perfeita (CSTR) e reatores químicos de escoamento uniforme (PFR), a partir do perfil de escoamento conforme Vialich *et al.* (2016).

As simulações das cadeias de reatores químicos foram realizadas utilizando o *software* Chemkin e como mecanismo de reações químicas envolvidas no processo de combustão do gás natural foi utilizado o mecanismo GriMech3.0.

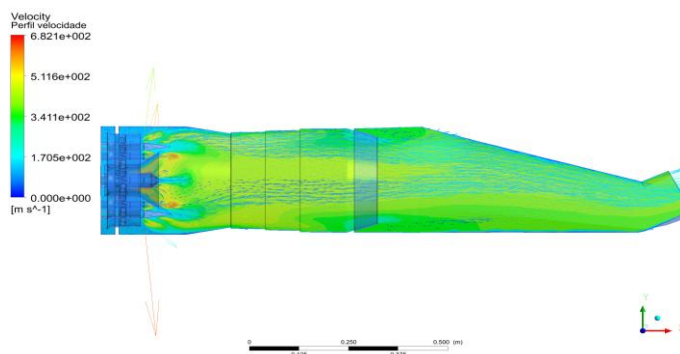
Foram propostas três cadeias de reatores químicos distintas mantendo as vazões de combustível e ar constantes, apenas variando a quantidade de reatores e as distribuições de alimentações. A cadeia de reatores químicos, que melhor descreve o combustor analisado, foi determinada a partir da comparação dos resultados das concentrações de NO_x e CO na exaustão da simulação com valores medidos em campo.

3. RESULTADOS

Para descrever o processo de combustão do gás natural no interior do combustor foi utilizado o mecanismo de reação GriMech3.0 devido ao *software* Chemkin conter este mecanismo como código nativo. A composição do gás natural utilizado nas simulações foi de 91,54 % de CH_4 , 4,97% de C_2H_6 , 1,45% C_3H_8 , 0,02% de CO_2 , 1,01 % de N_2 e 1,01% de O_2 . A composição do ar utilizado foi de 21% de O_2 e 79% de N_2 .

As cadeias de reatores químicos foram propostas fazendo uso do perfil de escoamento dos gases no interior do combustor analisado, Figura 1, conforme Vialich, *et al.* (2016).

Figura 1 - Perfil de escoamento dos gases no interior do combustor.



Através da análise do perfil de escoamento foi possível se determinar as regiões em que o escoamento foi preferencialmente turbulento e as regiões nas quais o escoamento apresentou uma direção preferencial. Regiões nas quais o escoamento foi preferencialmente turbulento foram idealizadas como reatores de mistura perfeita (CSTR) e regiões nas quais o escoamento apresentou uma direção preferencial foram idealizadas como reatores químicos de escoamento uniforme (PFR). Com a análise dos perfis obtidos através de simulações CFD foram propostas três cadeias distintas, mantendo constantes as temperaturas médias e as vazões totais de ar e combustível e o volume total do combustor, variando a conformação da cadeia de reatores e a disposição das alimentações. As cadeias propostas estão expostas nas Figuras 2, 3 e 4.

Figura 2 - Primeira cadeia de reatores químicos proposta.

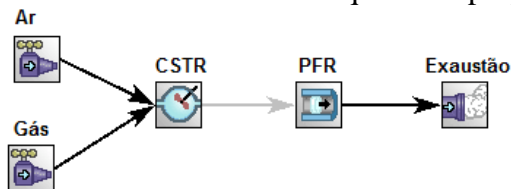


Figura 3 - Segunda cadeia de reatores químicos proposta.

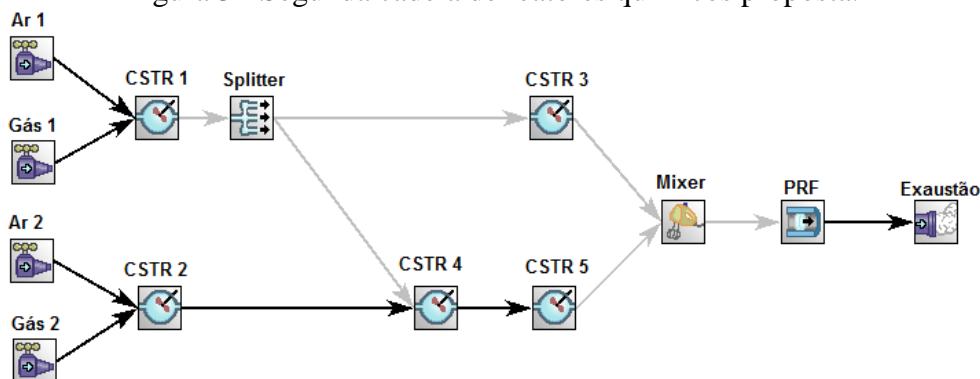
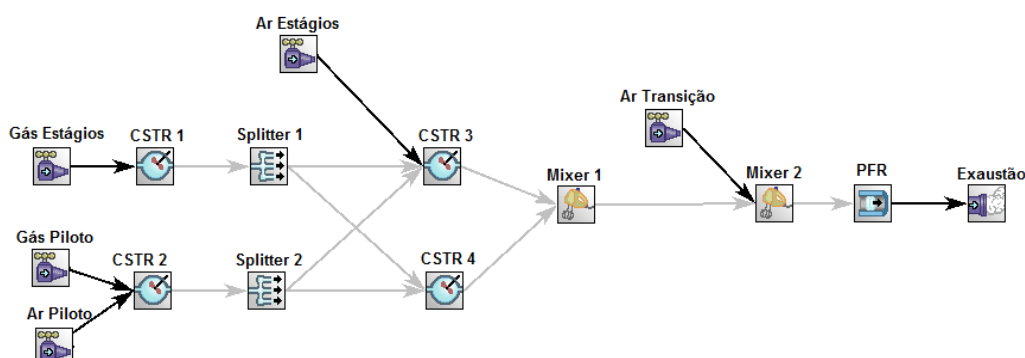


Figura 4 - Terceira cadeia de reatores químicos proposta.



Na segunda e terceira cadeia de reatores foi necessária a utilização de *splitters* e de *mixers*, componentes nos quais não ocorrem reações químicas, apenas a mistura e a divisão de correntes, respectivamente. Os *splitters* foram utilizados para a divisão das correntes de saída de um CSTR em duas de modo que a sua saída fosse utilizada como alimentação para outros reatores. Os *mixers* foram utilizados para unir duas correntes de modo que não ocorresse nenhuma reação química, a utilização dos *mixers* foi necessária devido ao PFR utilizado possibilitar apenas uma alimentação. O valor das vazões e temperaturas de ar e de combustível em cada uma das alimentações das 3 cadeias estão expostas na Tabela 1.

Tabela 1 – Vazões de gás combustível e de ar para cada uma das cadeias de reatores.

Cadeia	Componente	Vazão mássica (kg/s)	Temperatura (K)
1 Cadeia	Gás	0,5978	560
	Ar	21,183	693
2 Cadeia	Gás 1	0,5620	560
	Gás 2	0,0358	560
	Ar 1	20,610	693
	Ar 2	0,5330	693
3 cadeia	Gás Piloto	0,0358	560
	Gás Estágios	0,5620	560
	Ar Piloto	0,5330	693
	Ar Estágios	14,150	693
	Ar Transição	6,500	693

A Tabela 2 apresenta as dimensões e temperatura dos reatores utilizados em cada uma das cadeias propostas. Para todos os reatores e *mixers*, a pressão de operação foi de 13,247 bar. Para a segunda cadeia, o *splitter* divide a corrente de modo que 90% da saída do CSTR 1 é alimentado no CSTR 3. Para a terceira cadeia de reatores, o *splitter 1* divide a corrente de saída do CSTR 1 de modo 90% desta corrente é alimentado ao CSTR 3, o *splitter 2* divide a corrente de saída do CSTR 2 de modo que 90% desta corrente é alimentada ao CSTR 4.

Tabela 2 - Dimensões dos reatores utilizados em cada cadeia proposta

Cadeia	Parâmetro	CSTR 1	CSTR 2	CSTR 3	CSTR 4	CSTR 5	PFR
1 Cadeia	Volume (cm ³)	3,15*10 ⁴	-	-	-	-	-
	Temperatura (K)	1700	-	-	-	-	-
	Comprimento (cm)	-	-	-	-	-	61,00
	Diâmetro (cm)	-	-	-	-	-	36,65
2 Cadeia	Volume (cm ³)	2,90*10 ³	1,6*10 ³	1,55*10 ⁴	7,90*10 ³	3,4*10 ³	-
	Temperatura (K)	1700	2200	1700	1600	1600	-
	Comprimento (cm)	-	-	-	-	-	61,00
	Diâmetro (cm)	-	-	-	-	-	36,65
3 Cadeia	Volume (cm ³)	2,90*10 ³	1,6*10 ³	1,55*10 ⁴	1,15*10 ⁴	-	-
	Temperatura (K)	1700	2200	1700	1600	-	-
	Comprimento (cm)	-	-	-	-	-	61,00
	Diâmetro (cm)	-	-	-	-	-	36,65

Para a determinação da cadeia de reatores, que melhor descrevesse o processo de combustão do gás natural no interior do combustor, foi obtida através da análise das emissões de NO_x e CO na exaustão obtidas pela simulação utilizando o *software* Chemkin. Os valores das concentrações das emissões obtidas por simulação foram comparados com os valores medidos em campo. A Tabela 3 apresenta os valores das concentrações de NO_x e CO medidas em campo, os resultados obtidos a partir da simulação da cadeia de reatores e o erro relativo entre os valores obtidos por simulação e o medido em campo.

Tabela 3 – Concentrações de NO_x e CO medidas em campo e obtidas pela simulação e erro relativo.

	Concentração NO _x (ppm@15% O ₂)	Concentração CO (ppm@15% O ₂)	Erro NO _x (%)	Erro CO (%)
Medição em campo	27,257	2,547	-	-
Cadeia 1	1,500	1,342	94,5	47,3
Cadeia 2	27,367	1,309	0,40	48,6
Cadeia 3	27,212	2,529	0,17	0,7

A partir da análise dos erros relativos entre as concentrações de NO_x e CO obtidas através da simulação e dos valores medidos em campo, foi possível se determinar que a terceira cadeia de reatores químicos proposta pode representar o processo de combustão no interior do combustor analisado pois representou melhor os valores medidos em campo.

A primeira cadeia proposta não representa bem a situação real de operação da turbina analisada devido à simplicidade da cadeia, contendo apenas um reator de mistura perfeita e um reator de escoamento uniforme. Os resultados obtidos para esta cadeia reforçam a importância de discriminar a turbina em mais reatores químicos.

A segunda cadeia de reatores químicos proposta apresentou um erro baixo para as emissões de NO_x , entretanto, apresentou um erro alto para as emissões de CO de modo a não representar totalmente as emissões da turbina.

A terceira cadeia de reatores químicos proposta, Figura 4, foi a mais complexa, de modo que ela permite a simulação da injeção de combustível e ar nos estágios em locais distintos. Também é realizada a alimentação de ar na peça de transição da turbina. Através destas considerações a cadeia proposta se aproximou com a situação real de operação da turbina analisada, na qual a alimentação de combustível e de ar nos estágios ocorre em regiões distintas e no estágio piloto ocorre a alimentação de uma mistura de ar e combustível. Devido a estas considerações a simulação desta cadeia resultou em resultados mais precisos de emissões de NO_x e de CO.

4. CONCLUSÃO

Através do presente trabalho foi possível avaliar a utilização de uma cadeia de reatores químicos para realizar a simulação de um combustor de uma turbina a gás natural utilizada em uma usina termelétrica. A cadeia de reatores químicos proposta que melhor representou os valores das concentrações de NO_x e CO na exaustão da turbina, foi constituída por 4 reatores químicos de mistura perfeita e um reator químico de escoamento uniforme e apresentaram erros entre os valores medidos em campo e os obtidos por simulação menores que 1%.

5. AGRADECIMENTOS

A equipe de pesquisa e desenvolvimento do presente trabalho agradece a Usina Elétrica a Gás de Araucária – UEGA, na pessoa do gestor do projeto Flávio Chiesa, assim como os demais colaboradores dos Intitutos Lactec pela oportunidade e apoio.

6. REFERÊNCIAS

JUNIOR, A. R. de T. Modelagem da combustão de gás natural em um queimador industrial utilizando cadeia de reatores químicos. *Dissertação de mestrado*. Porto Alegre, 2012.

MAFRA, M. R.; Estudo da Influência do Número de Rotação na Formação de NO_x em uma Câmara de Combustão Cilíndrica. *Dissertação de mestrado*. Universidade Estadual de Campinas. São Paulo, 2000.

RAUB, J. Inter-Organization Program for The Sound Management of Chemicals – Carbon Monoxide. *Geneva: W.H.O.* 1999.

GRI-MECH 3.0 - SMITH, G. P.; FRENKLACH, M.; BOWMAN, T. <http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/>. Acesso em 10/01/2017.

VIALICH, J. A.; BARBOSA, L. B. B.; NARA, F. Y.; YAMAO, E. M.; CHIESA, F.; MELLO, T. C.; Metodologia para predição das emissões de Nox de uma turbina a gás utilizando o modelo de cadeia de reatores químicos. In: XXI Congresso Brasileiro de Engenharia Química, Fortaleza, 2016.