



METODOLOGIA SIMPLIFICADA PARA A AVALIAÇÃO DO USO DE COMBUSTÍVEIS ALTERNATIVOS NO PROJETO DE COMBUSTORES EM TURBINAS A GÁS FLEX USANDO EQUILÍBRIO TERMOCINÉTICO E MECANISMOS QUASE-GLOBAIS

WASHINGTON ORLANDO IRRAZABAL BOHORQUEZ, JOÃO ROBERTO BARBOSA

Centro de Referência em Turbinas a Gás
Instituto Tecnológico de Aeronáutica
São José dos Campos, SP, Brasil

(Recibido 10 de noviembre de 2011, para publicación 24 de febrero de 2012)

Resumo – As turbinas a gás têm diversas aplicações: aeronáutica, naval, geração de eletricidade e na indústria do petróleo. Aplicações aeronáuticas pretendem reduzir as emissões poluentes usando misturas dos combustíveis aeronáuticos convencionais com seus novos substitutos, os biocombustíveis e os combustíveis sintéticos. Na geração de eletricidade, as restrições no fornecimento de gás natural e outros combustíveis destilados do petróleo, com baixo teor de cinzas, têm causado interesse no uso de combustíveis alternativos em turbinas a gás estacionárias. Geralmente são considerados como combustíveis alternativos todos aqueles combustíveis líquidos e gasosos a partir da biomassa, gás de síntese a partir do carvão, biogás, gás de refinaria e de outras fontes não convencionais. Nos últimos anos, com o objetivo de fazer os processos industriais e aeronáuticos mais amigáveis ambientalmente, têm-se promovido pesquisas desses combustíveis alternativos para uso em turbinas a gás. Uma grande vantagem de uma turbina a gás, que usa um processo contínuo de combustão, é sua capacidade de queimar com sucesso uma ampla variedade de combustíveis. Esta capacidade é denominada, em inglês, *fuel flexible gas turbine combustor* e, daí, em português “turbina flex”. Este artigo visa a descrever uma metodologia para dimensionar combustores de turbinas a gás flex e analisar o escoamento nessas câmaras de combustão. Para o dimensionamento da câmara de combustão utilizam-se a metodologia de modelagem zero e unidimensional desenvolvida por Lefebvre, Melconian e Modak e a metodologia desenvolvida por Gordon e McBride para o equilíbrio termocinético, o limite de flamabilidade e os mecanismos cinéticos simplificados quase globais. Essas metodologias são utilizadas simultaneamente com os métodos numéricos de Newton-Raphson, fatoração de matrizes LU e o polinômio de Lagrange, implementados em um código computacional próprio, desenvolvido para a aplicação desse estudo. O presente trabalho descreve os modelos numéricos utilizados para estudar a eficiência da combustão desses combustíveis no combustor projetado e sua influência na emissão dos poluentes sob condições operacionais representativas, gerando informações que podem ser utilizadas já na fase de projeto de uma turbina a gás.

Palavras-chave – Métodos numéricos, escoamentos reativos, combustores, turbinas a gás, combustíveis alternativos.

1. INTRODUÇÃO

A câmara de combustão de uma turbina a gás é um dispositivo para incrementar a temperatura do ar entrante pela adição e combustão de combustível. Com esse propósito, a câmara de combustão deverá satisfazer muitos diferentes requisitos [1]. Deverá ser capaz de iniciar a combustão facilmente e deverá funcionar de maneira estável na ampla faixa de operação da turbina a gás [2].

Em todos os pontos operacionais deverá prover uma combustão completa do combustível, enquanto minimiza a formação e emissão de poluentes indesejáveis [3,4].

O combustor também deve funcionar com uma baixa perda de pressão para manter uma alta eficiência global do ciclo termodinâmico em que opera a turbina a gás. Todas essas funções devem ser realizadas em uma configuração que envolva volume, peso e custo mínimo e que seja suficientemente durável para conseguir um aceitável tempo de operação [6].

Uma câmara de combustão de turbina a gás consta de [7]:

- Uma carcaça exterior resistente à pressão dos gases da combustão;
- Uma carcaça interior submetida a elevadas temperaturas, permitindo dilatações térmicas.

As condições operacionais desempenham um dos principais fatores que precisam ser levados em conta. Entre eles podem-se mencionar os seguintes [7]:

- Há grandes variações da relação ar/combustível, mas a combustão tem que ser estável;
- A velocidade do ar na região de combustão é relativamente alta frente à velocidade de chama dos combustíveis usuais.

Para que exista uma combustão completa dentro da câmara de combustão, é necessário que todos os processos se realizem com suficiente rapidez, num escoamento de ar a uma velocidade não muito baixa. Devido a isto, a combustão nessas câmaras só é possível quando a velocidade de propagação da chama é da mesma ordem de grandeza da velocidade do escoamento [8,9,10].

As perdas de carga numa câmara de combustão de uma turbina a gás devem ser mínimas para evitar afetar muito o consumo específico e a potência específica da turbina. Outro aspecto importante são as perdas térmicas através das paredes e pela combustão incompleta. Essas perdas devem ser mantidas em valores mínimos [11,12].

Do ponto de vista da contaminação ambiental, a emissão de poluentes é outro dos fatores que precisam ser tomados em consideração, seja nas turbinas a gás de uso industrial, seja nas de uso aeronáutico. É também muito importante a facilidade e a segurança no acesso à câmara. As baixas pressões e as altas velocidades dificultam a partida, aspecto que nas turbinas a gás de uso aeronáutico adquire uma importância considerável [13,14].

Esses fatores descritos anteriormente podem ser incompatíveis entre si, pelo que resulta óbvia a complexidade do dimensionamento e análise do desempenho de uma câmara de combustão, sobretudo se o regime de funcionamento é variável [15].

O estudo visa a desenvolver modelos numéricos para estudar a eficiência da combustão desses combustíveis no combustor projetado e sua influência na emissão dos poluentes sob condições operacionais representativas, gerando informações que possam ser utilizadas já na fase de projeto de uma turbina a gás.

Procuram-se inicialmente informações qualitativas para estudo de tendências, com vistas a se chegar a um projeto otimizado da câmara de combustão, ponto de partida para outros estudos de otimização [16].

2. CALCULANDO A GEOMETRIA DO COMBUSTOR FLEX

Para o dimensionamento do combustor foram utilizadas a metodologia de modelagem zero e unidimensional desenvolvida por Lefebvre, Melconian e Modak e a metodologia desenvolvida por Gordon e McBride para o equilíbrio termocinético, o limite de flamabilidade e os mecanismos cinéticos simplificados quase globais.

Essas metodologias descritas anteriormente foram aplicadas simultaneamente com substituições sucessivas utilizando os métodos numéricos de Newton-Raphson, fatoração de matrizes LU e o polinômio de Lagrange [6,17].

Para o dimensionamento do combustor foi necessário analisar vários aspectos considerados importantes, entre os que se podem mencionar [18]:

- Considerações aerodinâmicas e químicas para o cálculo das áreas transversais da carcaça e tubo de chama do combustor, assim como a determinação da geometria das zonas primária, secundária e de diluição;
- Estimativa da distribuição de ar de resfriamento e vazão de ar nas zonas primária, secundária e de diluição;
- Características do difusor;
- Características do swirler;
- Determinação da temperatura de chama nas zonas do combustor;

- Determinação das fendas para admissão de ar nas diferentes zonas do combustor.

2.1. Parâmetros aerodinâmicos

Os processos aerodinâmicos têm uma parte vital no projeto e desempenho dos sistemas de combustão das turbinas a gás. Se o projeto aerodinâmico é bom e o sistema de injeção de combustível é combinado adequadamente, então é assegurada a operação de um combustor livre de grandes problemas [9].

O processo de mistura ar e combustível é de extrema importância nas zonas de combustão e diluição. Na zona primária uma boa mistura é essencial para obter uma elevada taxa de queima e para minimizar a formação de fuligem e NO_x . A consecução de uma adequada distribuição de temperatura nos gases de exaustão é dependente do grau de mistura alcançado entre o ar de diluição e os produtos da combustão na zona de diluição. Uma característica importante no projeto do combustor é obter uma satisfatória mistura ar-combustível dentro do tubo de chama e um escoamento estável através de todo o combustor, sendo necessário alcançar isto em um comprimento mínimo, sem perdas parasitas de ar e com mínimas perdas de pressão [12].

Dois parâmetros adimensionais que relacionam a perda de pressão no combustor são importantes no projeto do combustor. O primeiro deles é a razão entre a perda de pressão total no combustor e a pressão total de entrada ($\Delta P_{3-4}/P_3$) e o segundo é a razão entre a perda de pressão total no combustor e a pressão dinâmica de referência ($\Delta P_{3-4}/q_{ref}$). A (1) demonstra como esses parâmetros estão relacionados e como são utilizados para calcular a área de referência da carcaça do combustor [9,18].

$$A_{ref} = \left[\frac{R_a}{2} \left(\frac{\dot{m}_3 T_3^{0,5}}{P_3} \right)^2 \left(\frac{\Delta P_{3-4}}{q_{ref}} \right) \left(\frac{\Delta P_{3-4}}{P_3} \right)^{-1} \right]^{0,5} \quad (1)$$

onde 3 e 4 são as estações de entrada e de saída da câmara de combustão, A é a área transversal da carcaça do combustor, \dot{m} é a vazão, P é a pressão total, T é a temperatura total, q é a pressão dinâmica, R é a constante do gás, ref indica referência e o subscrito a que o gás é o ar.

Da (1) pode-se estabelecer que um critério satisfatório para o desempenho da mistura seria a razão entre a perda de pressão estática através do tubo de chama (Δp_L) e a pressão dinâmica do escoamento na zona de combustão (q_{ZC}). A área transversal do tubo de chama e a área transversal da carcaça do combustor podem ser relacionadas usando a (2) e nela pode ser observado que se é atingido um valor ótimo dessa razão (k_{oti}) é possível obter um valor alto de $\Delta p_L/q_{ZC}$ [9,18].

$$k_{oti} = 1 - \left[\frac{(1 - m_{sn})^2 - \lambda}{\left(\frac{\Delta P_{3-4}}{q_{ref}} \right) - \lambda r^2} \right]^{1/3} \quad (2)$$

onde m_{sn} é razão entre o ar do difusor e o ar total entrando no combustor, λ é o coeficiente de perda de pressão no difusor, r é a razão entre a área da carcaça e a área na entrada do combustor e k_{oti} é o valor ótimo da razão entre a área transversal do liner e a área da carcaça.

2.2. Parâmetros termoquímicos

Os combustores de turbinas a gás precisam ter uma queima estável de combustível em uma ampla faixa de condições operacionais com níveis de eficiência de combustão próximos de 100%. Outra característica importante é uma partida fácil e confiável (reacendimento) enquanto o motor está desenvolvendo a velocidade de auto-sustentação. Os parâmetros de desempenho da combustão, que são de enorme importância para a turbina a gás, são a eficiência de combustão, a estabilidade e a ignição [18].

O propósito primário da combustão é elevar a temperatura do escoamento de ar mediante uma eficiente queima do combustível. Do ponto de vista de projeto, um requisito importante é a forma de relacionar a eficiência de combustão com os parâmetros operacionais de pressão, temperatura e vazão em massa do ar, em conjunto com as dimensões do combustor.

A metodologia usada nesta seção está relacionada com a velocidade de queima: para uma dada razão combustível/ar (F/A), a eficiência de combustão η_θ é correlacionada com um parâmetro θ , apresentado na equação (3). Dados experimentais sugerem que, quando o valor de θ é $73E+06$ (SI), os combustores projetados têm uma eficiência de combustão próxima de 100%. Assim, a área transversal da carcaça do combustor pode ser calculada [9,18] a partir da (3),

$$\eta_\theta = f(\theta) = \theta = \left[\frac{P_3^{1,75} A_{ref} D_{ref}^{0,75} \exp\left(\frac{T_3}{b}\right)}{\dot{m}_3} \right] \quad (3)$$

onde D_{ref} está relacionado com o diâmetro da área transversal da carcaça do combustor (m), b é um fator de correção da temperatura T_3 , θ é um parâmetro de correlação da eficiência de combustão, η_θ representa a eficiência de combustão do combustor.

O parâmetro b é um fator de correção da temperatura de entrada à câmara de combustão, dado pela (4) [18].

$$\begin{aligned} b &= 245[1,39 + \ln(\phi_{ZP})] \quad \text{para } 0,6 < \phi_{ZP} \leq 1,0 \\ \text{ou} \\ b &= 170[2,00 - \ln(\phi_{ZP})] \quad \text{para } 1,0 < \phi_{ZP} \leq 1,5 \end{aligned} \quad (4)$$

onde ϕ_{ZP} é a razão de equivalência na zona primária.

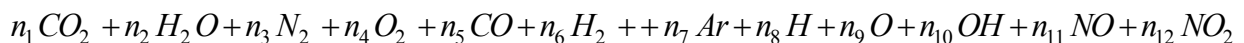
Para obter o valor apropriado da razão de equivalência na zona primária (ϕ_{ZP}) é necessário construir a curva de flamabilidade do combustível a ser queimado sob as condições operacionais de funcionamento da turbina a gás [18], utilizando conceitos de equilíbrio termocinético.

A condição de equilíbrio químico é estabelecida usando a minimização da energia livre de Gibbs e as variáveis termodinâmicas utilizadas são a pressão e a temperatura.

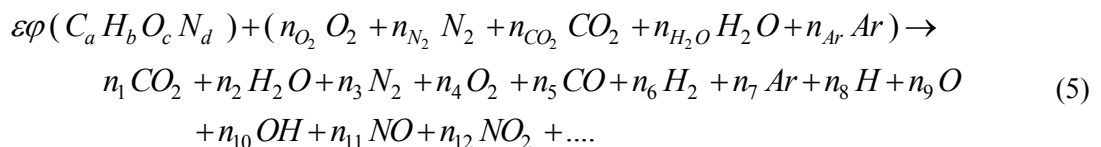
Em geral, é possível considerar um combustível reagindo e formando produtos de combustão em equilíbrio. Neste trabalho são considerados (n) espécies químicas e (k) elementos químicos. A lei da conservação de elementos químicos fornecerá (k) equações relacionadas às concentrações dessas (n) espécies químicas [17].

O combustível a ser utilizado poderá conter carbono, hidrogênio, oxigênio e nitrogênio, com fórmula química $C_a H_b O_c N_d$. O ar considerado para a combustão é considerado como composto de oxigênio, nitrogênio, argônio, gás carbônico e vapor de água: $n_{O_2} O_2 + n_{N_2} N_2 + n_{Ar} Ar + n_{CO_2} CO_2 + n_{H_2O} H_2O$

Os produtos de combustão contêm 12 espécies, consideradas as mais significativas para o presente estudo:



Uma equação genérica de reação química para esses combustíveis, com uma razão de equivalência ϕ , reagindo com ar, pode ser dada pela (5) [17].



Considerando as 12 espécies químicas (n_i) nos produtos da combustão a uma dada temperatura e pressão, serão necessárias 12 equações para obter a concentração molar dessas n_i espécies químicas. Cinco equações podem ser obtidas do balanço de massa dos elementos químicos C, H, N, O e Ar existentes nos reagentes e produtos. As sete equações restantes são relativas à dissociação química [17], dependentes da temperatura. Informações adicionais para resolução desse sistema de equações (não lineares) podem ser obtidas, por exemplo, das tabelas termodinâmicas JANAF, com o uso da (6).

$$\log K_p \Big|_{\text{reação}} = \sum_{\text{produtos}} n_e \log K_p - \sum_{\text{reagentes}} n_e \log K_p \quad (6)$$

onde K_p é a constante de equilíbrio a pressão constante, n_e são os coeficientes molares na equação de equilíbrio.

Os dados das constantes de equilíbrio mostradas na equação (6) podem ser ajustados de forma polinomial à temperatura usando a relação funcional geral mostrada na equação (7).

$$\log K_p \Big|_{\text{reação}} = A_e \ln \left(\frac{T}{1000} \right) + \frac{B_e}{T} + C_e + D_e T + E_e T^2 \quad (7)$$

A equação (5) poder ser rearranjada em função das constantes de equilíbrio da equação (7) e representada em função das frações molares do N_2 , O_2 , CO e H_2 respectivamente.

Esse conjunto de equações é utilizado para calcular a fração molar de todas as espécies em termos de y_{N_2} , y_{O_2} , y_{CO} e y_{H_2} , como indicado no sistema de equações (8).

Para calcular a fração molar de todas as espécies dos produtos da combustão em termos de y_{N_2} , y_{O_2} , y_{CO} e y_{H_2} , é utilizado o sistema de equações indicado em (8).

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial y_3} \Delta y_3 & \frac{\partial f_1}{\partial y_4} \Delta y_4 & \frac{\partial f_1}{\partial y_5} \Delta y_5 & \frac{\partial f_1}{\partial y_6} \Delta y_6 = -f_1 \\ \frac{\partial f_2}{\partial y_3} \Delta y_3 & \frac{\partial f_2}{\partial y_4} \Delta y_4 & \frac{\partial f_2}{\partial y_5} \Delta y_5 & \frac{\partial f_2}{\partial y_6} \Delta y_6 = -f_2 \\ \frac{\partial f_3}{\partial y_3} \Delta y_3 & \frac{\partial f_3}{\partial y_4} \Delta y_4 & \frac{\partial f_3}{\partial y_5} \Delta y_5 & \frac{\partial f_3}{\partial y_6} \Delta y_6 = -f_3 \\ \frac{\partial f_4}{\partial y_3} \Delta y_3 & \frac{\partial f_4}{\partial y_4} \Delta y_4 & \frac{\partial f_4}{\partial y_5} \Delta y_5 & \frac{\partial f_4}{\partial y_6} \Delta y_6 = -f_4 \end{bmatrix} \quad (8)$$

onde $\partial f_i / \partial y_j$ para $i=1, 2, 3, 4$ e $j=3, 4, 5, 6$ representam as derivadas parciais das i equações com respeito das j frações molares, os Δy_j representam o vetor das variações das frações molares baseadas em N_2 , O_2 , CO e H_2 , f_j representa o vetor das funções lineares baseadas nas frações molares y_j .

O conjunto de equações (8) pode ser reescrito em forma matricial segundo a equação (9). Esse sistema matricial é resolvido utilizando-se conceitos de álgebra de matrizes, especificamente a Fatoração LU, simultaneamente com o método de Newton-Raphson. Dessa forma pode ser obtido o conjunto de valores das frações molares dos produtos da combustão [14,17].

$$[A_{il}] [\Delta y_j] = [-f_i] \quad (8)$$

onde $[A_{il}]$ para $i=1, 2, 3, 4$ e $l=1, 2, 3, 4$ representam a matriz das $\partial f_i / \partial y_j$.

As equações indicadas permitem que se construa a curva de flamabilidade de cada um dos combustíveis utilizados. Por exemplo, pode-se construir essa curva de flamabilidade, para todo o envelope operacional do combustor, a partir da solução do sistema matricial (9) e da aplicação da condição da conservação da energia, com hipótese de combustão adiabática, segundo a equação (10), variando a razão de equivalência desde uma mistura pobre até uma mistura rica.

$$\sum_r N_r \left(h_{f,r}^* + \Delta h_{s,r}^* \right) - \sum_p N_p \left(h_{f,p}^* + \Delta h_{s,p}^* \right) = 0 \quad (10)$$

onde p representa aos produtos, r aos reagentes, f formação, s sensível, h^* entalpia específica, Δh^* variação da entalpia específica, N número total de moles.

Cada curva de estabilidade da combustão representa a temperatura de chama adiabática em função da razão de equivalência. Conhecida a temperatura, por interpolação inversa utilizando o Polinômio de Lagrange obtém-se o valor procurado de ϕ_{ZP} .

O valor da razão de equivalência na zona primária do combustor ϕ_{ZP} é utilizado na Eq. (4) para calcular o fator de correção da temperatura de entrada da câmara de combustão e posteriormente esse parâmetro é utilizado na equação (3) para determinar a área transversal da carcaça do combustor e depois, a área transversal do liner para as considerações termoquímicas [18].

2.3. Características do combustor flex

Baseando-se nas considerações aerodinâmicas e termoquímicas escolhe-se a maior área transversal da carcaça e do tubo de chama do combustor para acomodar as características operacionais aerodinâmicas e químicas em qualquer regime de operação [18].

Com os dados obtidos anteriormente é possível determinar o dimensionamento preliminar das diferentes zonas do combustor segundo as equações (11), (12), (13) e (14).

$$L_{ZP} = 0,75 D_{ft} \quad (11)$$

$$L_{ZS} = 0,5 D_{ft} \quad (12)$$

$$L_{ZD} = \left(\frac{T_{\max} - T_4}{T_4 - T_3} \right) D_{ft} \quad (13)$$

$$L_{TZD} = 0,5 L_{ZD} \quad (14)$$

onde L representa o comprimento em m , os subscritos ZP , ZS , ZD , TZD respectivamente à zona primária, secundária, diluição e transição da zona de diluição, D_{ft} ao diâmetro da área transversal do liner, T é a temperatura em K , os subscritos 3 , 4 , \max respectivamente à entrada, saída do combustor e valor máximo no combustor.

Com o valor calculado da razão de equivalência na zona primária ϕ_{ZP} também é possível calcular a distribuição de ar nas diversas zonas do combustor segundo as equações (15), (16), (17) e (18), [19].

$$\dot{m}_{res} = (0,1 T_3 - 30) \dot{m}_3 \quad (15)$$

$$\dot{m}_{ZP} = \dot{m}_3 \left(\frac{\phi_{global}}{\phi_{ZP}} \right) \quad (16)$$

$$\dot{m}_{ZS} = \dot{m}_3 \left(\frac{\phi_{global_{\max}}}{0,8} \right) - \dot{m}_{ZP} \quad (17)$$

$$\dot{m}_{ZD} = \dot{m}_3 - \dot{m}_{ZP} - \dot{m}_{ZS} - \dot{m}_{res} \quad (18)$$

onde \dot{m} representa a vazão mássica em kg/s , o subscrito res resfriamento, ϕ razão de equivalência, os subscritos $global$ e $global_{\max}$ respectivamente total e total máximo.

Um aspecto importante no projeto do combustor da turbina a gás flex está relacionado com a adequada seleção do difusor, quando devem ser considerados três aspectos básicos:

- a) O espaço disponível;
- b) A perda de pressão máxima admissível;
- c) O desenvolvimento uniforme do perfil da velocidade do ar entrando na câmara de combustão

Uma equação básica que é utilizada para dimensionar o difusor é apresentada na equação (19) [11,18].

$$\frac{\Delta P_{dif}}{P_3} = 1,75 R_{ar} \left[\frac{T_3 \dot{m}_3^2 (\tan \Psi_0)^{1,22}}{(P_3 A_3)^2} \right] \left[1 - \frac{A_3}{A_0} \right]^2 \quad (19)$$

onde $(\Delta P_{dif}/P_3)$ representa a razão entre a perda de pressão total no difusor e a pressão total de entrada ao combustor, A_0 a área do invólucro na entrada de ar primário em m^2 , A_3 a área transversal na saída do compressor em m^2 , Ψ_0 o ângulo de abertura do difusor em $^\circ$.

Outros pontos importantes para o dimensionamento do combustor são o swirler e os orifícios de admissão de ar nas zonas primária, secundária, de diluição e de resfriamento. Para dimensionar esses elementos são utilizadas relações semi-empíricas, como a (20), para calcular a vazão de ar que passa pelo swirler para uma dada queda de pressão, que usualmente é assumida igual à queda de pressão no espaço entre a carcaça externa e o tubo de chama.

$$\dot{m}_{sw} = \frac{\left(2 \rho_3 \Delta P_{sw} / KT_{sw} \right)^{0,5}}{\sqrt{\left(\sec \theta / A_{sw} \right)^2 - \left(1 / A_{ft}^2 \right)}} \quad (20)$$

onde o subscrito $_{sw}$ corresponde ao swirler, ΔP representa a queda de pressão, KT a constante de correlação das pás do swirler com um valor de 1,3 quando as pás são retas e 1,15 quando as pás são curvas, ρ a massa específica do ar em kg/m^3 , θ é o ângulo da pá, o subscrito $_{ft}$ corresponde ao liner [20,21].

3. DESENVOLVIMENTO DO CÓDIGO COMPUTACIONAL

Para descrever completamente o processo de combustão é necessária a resolução simultânea das leis que governam a mecânica dos fluidos e a cinética das reações químicas. À medida que são utilizados mecanismos mais detalhados para descrever a cinética química da combustão o problema aumenta em complexidade [22, 23].

Utilizando os fundamentos teóricos detalhados anteriormente, foi desenvolvido um código computacional próprio, para calcular as principais características do combustor de uma turbina a gás flex, usando os combustíveis líquidos, etanol (C_2H_5OH), metanol (CH_3OH) e diesel ($C_{14,4}H_{24,9}$). Nas Figuras 1, 2, e 3 são apresentados alguns dos principais diagramas de fluxo que permitiram o desenvolvimento dessa ferramenta computacional na linguagem de programação em FORTRAN.

O uso de substituições sucessivas, combinado com a fatoração LU e o procedimento de Newton-Raphson, assim como a aplicação de outros métodos numéricos permitiu o cálculo rápido da temperatura adiabática em função da razão de equivalência e a concentração de espécies químicas nos produtos da combustão evitando os habituais problemas com singularidades [24].

O programa principal está composto por várias sub-rotinas que permitem a entrada dos dados aerodinâmicos e termoquímicos, os dados do combustível a ser utilizado, o cálculo da temperatura adiabática para todas as razões de equivalência utilizadas, a construção das curvas de flamabilidade e a avaliação do combustor projetado [25].

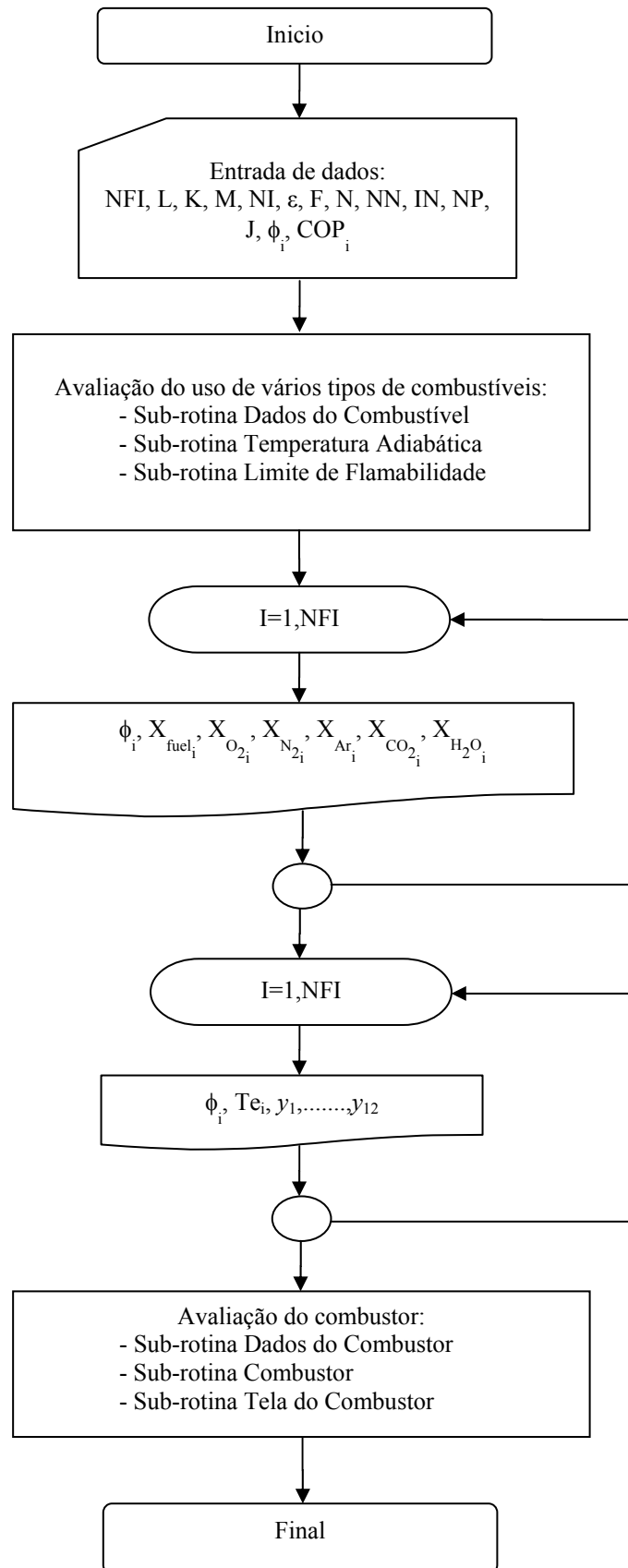


Fig. 1. Características do combustor flex.

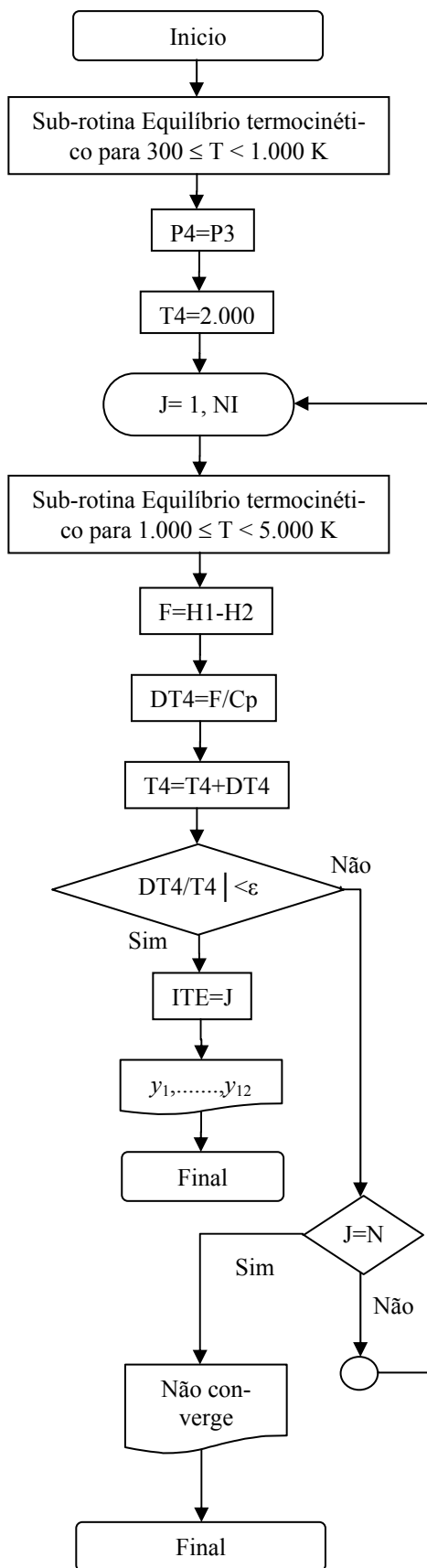


Fig. 2. Temperatura adiabática da chama.

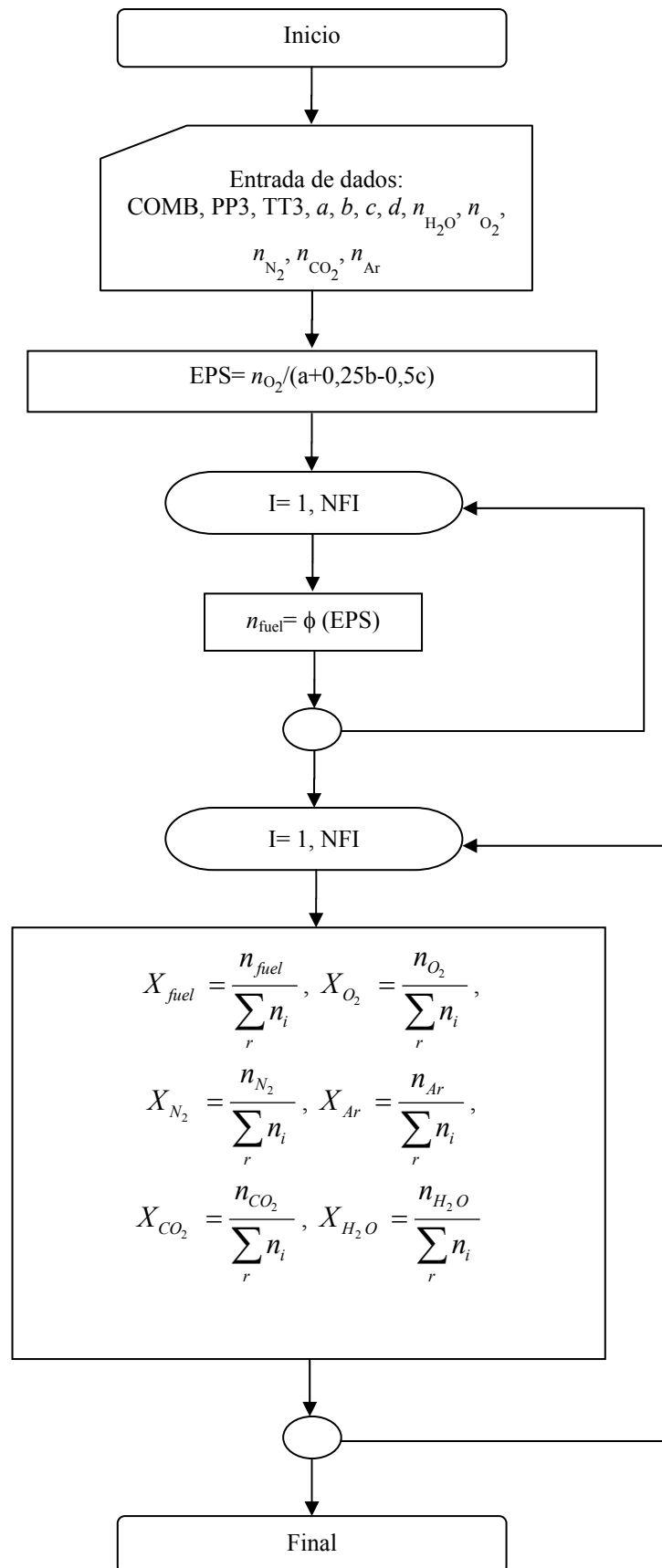


Fig. 3. Datos de cada tipo de combustible.

4. DISCUSSÃO DOS RESULTADOS

O modelo detalhado acima foi implementado em um código computacional escrito em linguagem FORTRAN e utilizado para os cálculos das informações apresentadas neste documento. Tendo-se por base os resultados obtidos pode-se afirmar a validade, a funcionalidade e a versatilidade desses modelos quando aplicados ao dimensionamento de câmaras de combustão de turbinas flex.

Os resultados obtidos servem para descrever a geometria do combustor tubular de uma turbina a gás flex estacionária utilizando como combustíveis o diesel, o etanol ou o metanol líquido. Servem, também, para definição dos limites de flamabilidade, dos valores de referência da carcaça e do tubo de chama do combustor, da razão de equivalência global (ϕ_{global}), da razão de equivalência pobre (ϕ_{pobre}), da razão de equivalência rica, (ϕ_{rica}), da razão de equivalência na zona primária (ϕ_{ZP}). São citados apenas alguns dos parâmetros mais utilizados para descrever um combustor de turbina a gás, informações essas que são essenciais para a análise de uma câmara de combustão para todas as condições de funcionamento da turbina a gás em serviço, já na fase de projeto [26,27].

Esses resultados estão apresentados na Tabela 1 e nas Figuras 4, 5, 6 e 7.

Tabela 1. Parâmetros principais de um combustor flex

Parâmetro	Diesel	Etanol	Metanol
Temperatura de entrada ao combustor	800	800	800
Temperatura de saída do combustor	1.600	1.600	1.600
Razão de equivalência total (ϕ_{global})	0,35	0,35	0,35
Razão de equivalência pobre (ϕ_{pobre})	0,325	0,282	0,319
Razão de equivalência rica (ϕ_{rica})	2,8	2,8	2,8
Relação entre a razão de equivalência total e a razão de equivalência pobre ($\phi_{\text{global}}/\phi_{\text{pobre}}$)	1,07	1,23	1,087
Relação entre a razão de equivalência total e a razão de equivalência rica ($\phi_{\text{global}}/\phi_{\text{rica}}$)	0,124	0,124	0,124
Razão de equivalência na zona primária (ϕ_{ZP})	1,393	1,179	1,398

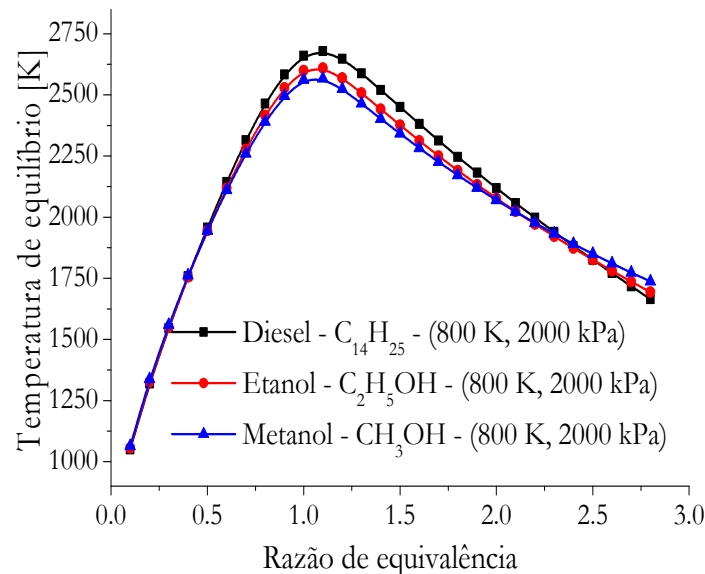


Fig. 4. Temperatura de equilíbrio como função da razão de equivalência para a combustão do diesel, etanol e metanol à pressão de 2.000 kPa e temperatura de 800 K.

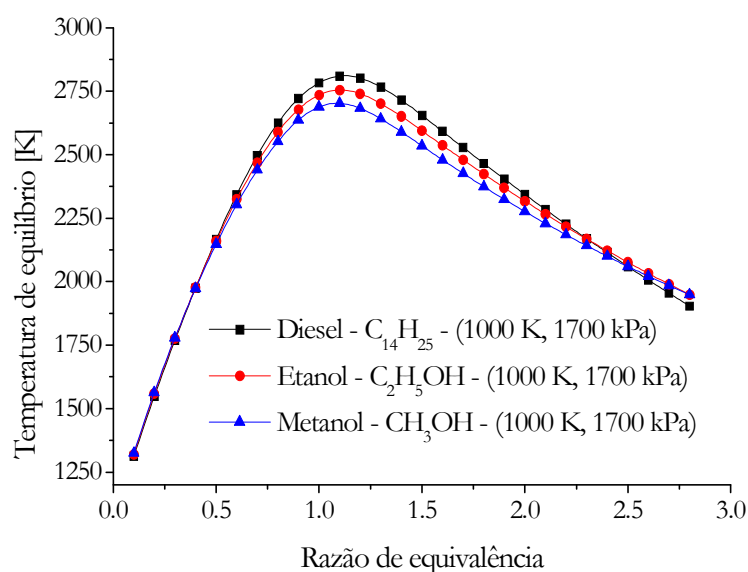


Fig. 5. Temperatura de equilíbrio como função da razão de equivalência para a combustão do diesel, etanol e metanol à pressão de 1.700 kPa e temperatura de 1.000 K.

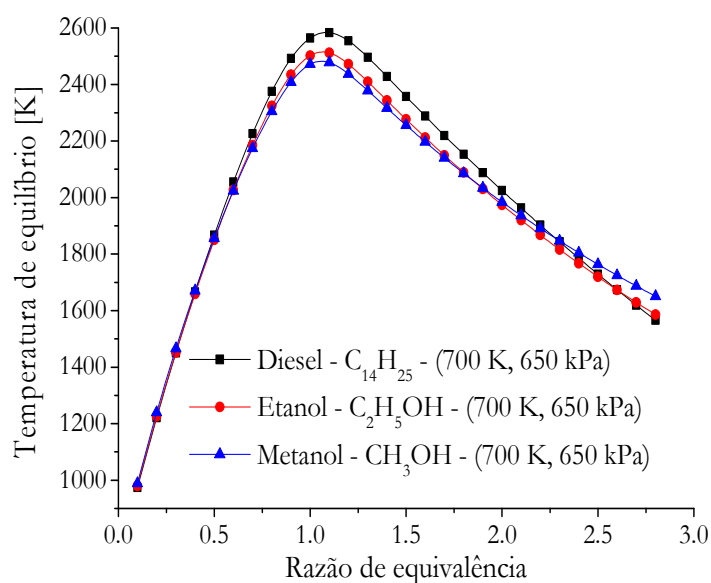


Fig. 6. Temperatura de equilíbrio como função da razão de equivalência para a combustão do diesel, etanol e metanol à pressão de 650 kPa e temperatura de 700 K.

Como foi detalhado nos itens 2 e 3, neste estudo se faz uso de métodos numéricos para a solução de sistemas matriciais de equações não lineares. Um dos problemas mais comuns nesse tipo de cálculos é relacionado a singularidades quando os elementos das matrizes têm um valor muito pequeno.

Neste estudo não foram encontrados problemas de singularidades na inversão das matrizes envolvidas nas operações matemáticas aplicando o método de substituição sucessiva combinada com fatoração LU e o procedimento de Newton-Raphson.

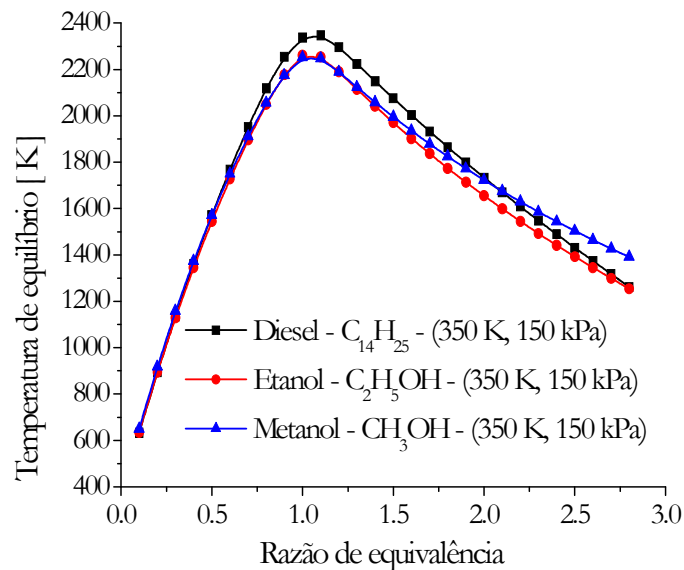


Fig. 7. Temperatura de equilíbrio como função da razão de equivalência para a combustão do diesel, etanol e metanol à pressão de 150 kPa e temperatura de 350 K.

A aplicação dos métodos numéricos mencionados no parágrafo anterior permite calcular a concentração das espécies químicas em equilíbrio nos produtos da combustão de uma forma mais rápida e, ressalte-se, sem problemas de convergência.

Nas Figuras 4, 5, 6 e 7 pode-se observar como a temperatura e a pressão dentro da câmara de combustão da turbina a gás são fatores importantes: elas afetam a curva de estabilidade da combustão, reduzindo os limites pobres e ricos da razão de equivalência na zona primária do combustor; com a redução da pressão no combustor. Os limites de flamabilidade são aumentados com o incremento da temperatura de entrada à câmara de combustão.

Uma análise da curva de estabilidade da combustão para os três tipos de combustíveis líquidos estudados, diesel, etanol e metanol, mostra que, quando a mistura ar-combustível tem uma razão de equivalência pobre, não existe uma marcada diferença na temperatura de equilíbrio desenvolvida na câmara de combustão para condições operacionais similares, indicando, portanto, uma eficiência de combustão similar na operação do combustor.

Quando a mistura ar-combustível tem uma razão de equivalência rica, isto é, quando $\phi > 1,0$, até alcançar o valor de 2,5; existem grandes diferenças entre os valores calculados para a temperatura de equilíbrio para uma razão de equivalência e condições operacionais similares, utilizando os diferentes combustíveis.

Para misturas muito ricas, como quando a razão de equivalência ϕ está entre os valores de 2,0 e 2,5, pressão de 2 MPa e temperatura de 800 K na entrada do combustor, obtêm-se como resultados as faixas de temperaturas de equilíbrio: 1.875 – 2.188 K para o diesel, 1.875 – 2.125 K para o etanol e 1.875 – 2.080 K para o metanol. Isto quer dizer, para condições operacionais similares, a curva de estabilidade da combustão do diesel vai-se estreitando ligeiramente até ficar abaixo das curvas de flamabilidade do etanol e do metanol, o que significa que, nessas condições, podem aparecer instabilidades nas sequências operacionais transitórias do combustor [28,29,30], como em variações bruscas de carga (potência ou tração).

Muitos autores afirmam que a uma maior temperatura de chama adiabática alcançada corresponde uma maior eficiência e estabilidade da combustão. Portanto, pode-se inferir que o uso do etanol e metanol como combustível em turbinas a gás representam uma boa alternativa atendendo desde o ponto de vista de eficiência e estabilidade de chama [29,30].

Nas tabelas 2, 3, 4 e 5 são apresentadas as principais características geométricas calculadas para uma câmara de combustão tubular de uma turbina a gás estacionária, que atende tanto os requisitos aerodinâmicos como os termoquímicos, queimando diesel, etanol ou metanol.

Tabela 2. Geometria básica de um combustor flex.

Característica	Diesel	Etanol	Metanol
Comprimento da zona primária, <i>m</i>	0,21025	0,21025	0,21025
Comprimento da zona secundária, <i>m</i>	0,14017	0,14017	0,14017
Comprimento da zona de diluição, <i>m</i>	0,36030	0,36030	0,36030
Comprimento da zona de transição, <i>m</i>	0,18015	0,18015	0,18015
Comprimento total do combustor, <i>m</i>	0,71073	0,71073	0,71073

Tabela 3. Distribuição do ar no combustor flex.

Parâmetro	Diesel	Etanol	Metanol
Ar de resfriamento, %	51,40	51,40	51,40
Ar na zona primária, %	25,00	30,00	25,00
Ar na zona secundária, %	18,37	13,37	18,37
Ar na zona de diluição, %	5,23	5,22	5,23
Vazão de ar de resfriamento, kg/s	9,30	9,30	9,30
Vazão de ar na zona primária, kg/s	4,53	5,43	4,53
Vazão de ar na zona secundária, kg/s	3,33	2,42	3,33
Vazão de ar na zona de diluição, kg/s	0,946	0,946	0,946

Tabela 4. Dimensionamento do difusor flex.

Parâmetro	Diesel	Etanol	Metanol
Área na entrada do difusor, m ²	0,0160	0,0160	0,0160
Velocidade do ar na entrada do difusor, m/s	136,88	136,88	136,88
Área anular na entrada do combustor, m ²	0,0265	0,0265	0,0265
Velocidade do ar na área anular, m/s	72,44	70,37	72,44
Ar na área anular, %	87,50	85,00	87,50
Vazão de ar na área anular, kg/s	15,83	15,38	15,83
Área na entrada do bocal, m ²	0,0038	0,0047	0,0038
Coefficiente da razão de expansão	1,89	1,95	1,89
Ângulo do difusor, °	21,52	20,52	21,52
Ângulo do bocal, °	30,92	29,23	30,93
Comprimento total do difusor, <i>m</i>	0,2439	0,2569	0,2439

Tabela 5. Dimensionamento do swirler.

Parâmetro	Diesel	Etanol	Metanol
Comprimento da zona de recirculação, <i>m</i>	0,1402	0,1402	0,1402
Ar na zona de recirculação, %	12,50	15,00	12,50
Vazão de ar na zona de recirculação, kg/s	2,2625	2,7150	2,2625
Vazão de ar no swirler, kg/s	1,267	1,267	1,267
Ângulo das pás do swirler, °	60,00	60,00	60,00
Ângulo de mudança de direção do fluxo, °	60,00	60,00	60,00
Tipo de pás do swirler	Finas retas	Finas retas	Finas retas
Área do swirler, m ²	0,0032	0,0032	0,0032
Diâmetro externo do swirler, <i>m</i>	0,0785	0,0785	0,0785
Diâmetro interno do swirler, <i>m</i>	0,0456	0,0456	0,0456
Espessura da parede do atomizador, <i>m</i>	0,0015	0,0015	0,0015
Espessura das pás do swirler, <i>m</i>	0,0015	0,0015	0,0015
Número de pás do swirler	9	9	9
Diâmetro do orifício de injeção, <i>m</i>	0,001	0,001	0,001
Diâmetro do atomizador, <i>m</i>	0,0426	0,0426	0,0426

A partir dos resultados mostrados nas tabelas 2, 3, 4 e 5 pode ser observado como as características geométricas calculadas para um combustor flex queimando diesel não diferem muito dos valores calculados para o combustor queimando etanol ou metanol, sendo que as características calculadas para a câmara de combustão queimando metanol são quase idênticas às calculadas quando se queima diesel.

As principais diferenças ocorrem na distribuição do ar nas zonas primária e secundária da câmara de combustão, o que exigiria uma otimização da geometria dos orifícios de entrada de ar nestas zonas do combustor, para obter uma combustão estável e de alta eficiência para garantir um adequado desenvolvimento termoquímico e uma estabilidade de chama confiável durante a operação da câmara de combustão [29].

Outro resultado importante está relacionado com a quantificação dos produtos da combustão na zona primária do combustor, pois a presença de altos valores de CO nos produtos da combustão representa redução da eficiência de combustão [18].

Esse modelo e seus resultados são úteis para calcular a variação das doze espécies consideradas neste estudo: CO_2 , H_2O , CO, H_2 , O_2 , N_2 , Ar, OH, O, H, NO e NO_2 .

As Figuras 8, 9, 10, 11, 12 e 13 apresentam essas espécies químicas calculadas em função da razão de equivalência.

Os resultados mostrados nas Figuras 8, 9, 10, 11, 12 e 13 são de muita importância, porque apresentam a mudança qualitativa das emissões poluentes com a variação da razão de equivalência, que pode representar o nível de potência desenvolvida pela turbina ou respostas às suas variações. É especialmente importante a observação da tendência das emissões de CO_2 , CO, NO e NO_2 porque as quantidades dessas espécies estão relacionadas com a ineficiência da câmara de combustão da turbina a gás e com o impacto ambiental produzido pela operação desse tipo de motor térmico [25].

Para a emissão de CO, pode-se observar que quando a razão de equivalência se incrementa com tendência às misturas ricas, há um aumento das emissões de CO e que a combustão do combustível diesel é o maior emissor deste poluente em comparação com a combustão do etanol e metanol.

As concentrações de H_2O provenientes da queima de diesel aumentam com o incremento da razão de equivalência, até atingir um valor máximo na razão estequiométrica, diminuindo posteriormente para valores insignificantes. Além disso, a concentração molar de H_2O a partir da combustão do etanol e metanol aumenta com a razão de equivalência, até atingir seu valor máximo na razão estequiométrica, caindo lentamente, posteriormente, mantendo uma tendência quase constante.

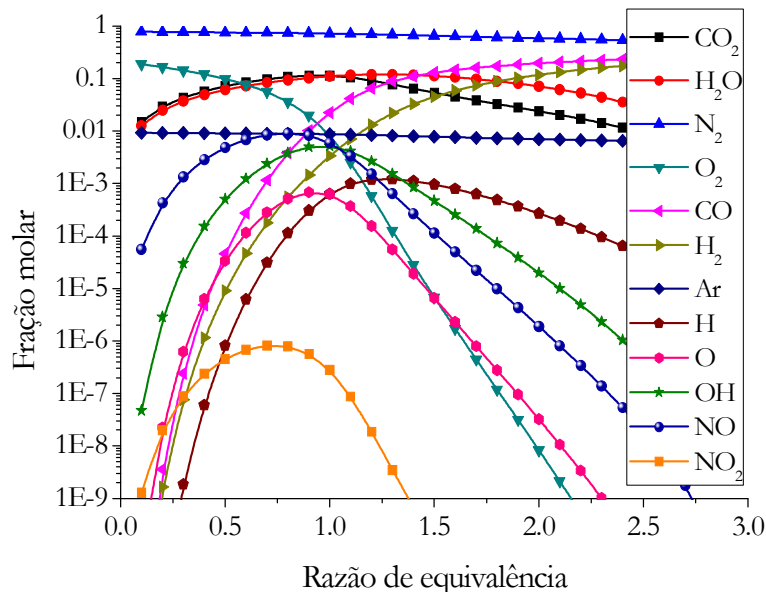


Fig. 8. Fração molar dos produtos da combustão em equilíbrio para a combustão do diesel a 2000 kPa e 800 K.

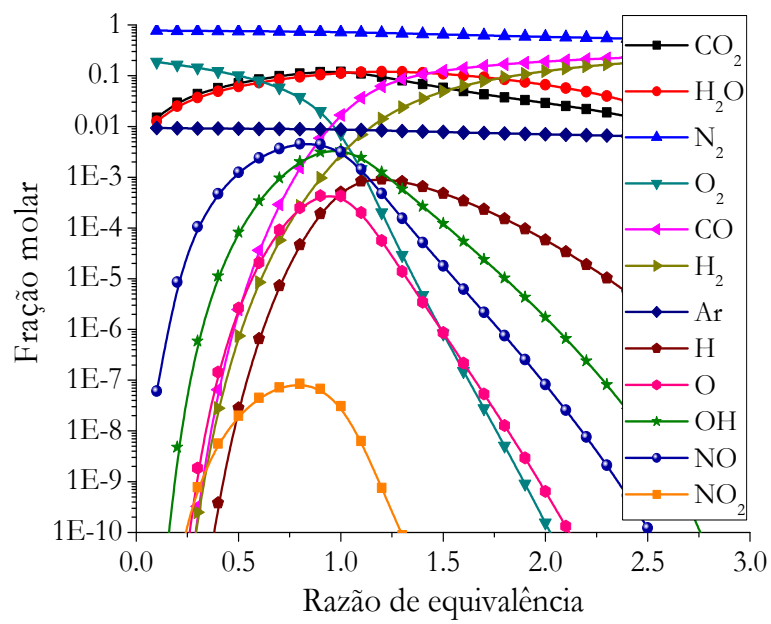


Fig. 9. Fração molar dos produtos da combustão em equilíbrio para a combustão do diesel a 150 kPa e 350 K.

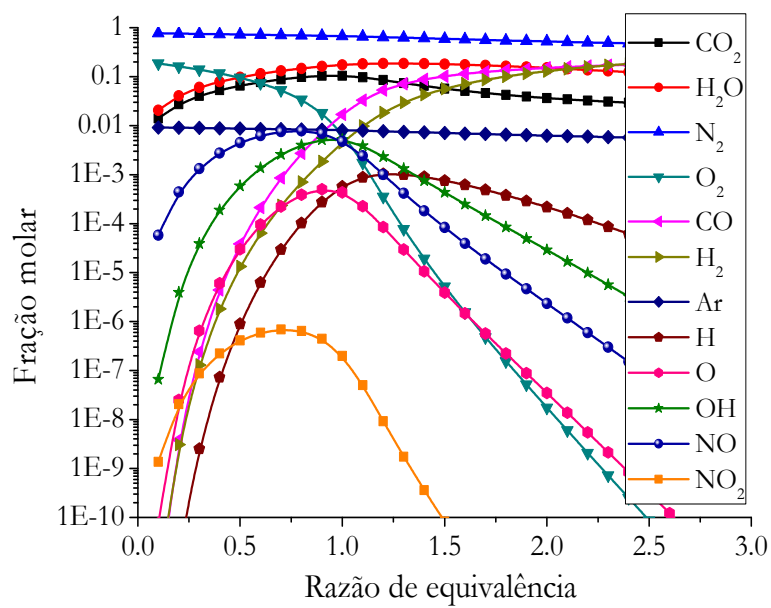


Fig. 10. Fração molar dos produtos da combustão em equilíbrio para a combustão do etanol a 2000 kPa e 800 K.

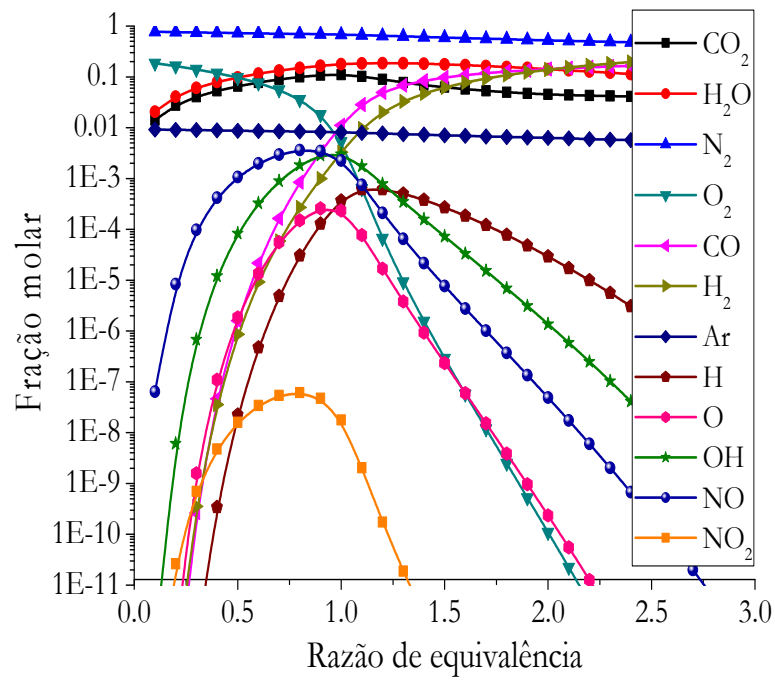


Fig. 11. Fração molar dos produtos da combustão em equilíbrio para a combustão do etanol a 150 kPa e 350 K.

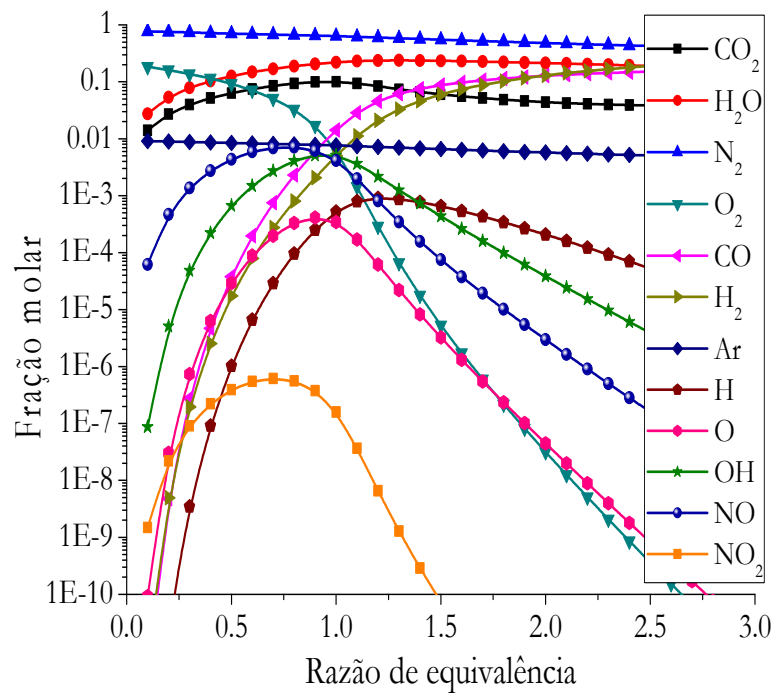


Fig. 12. Fração molar das emissões para a combustão do metanol a 2000 kPa e 800 K.

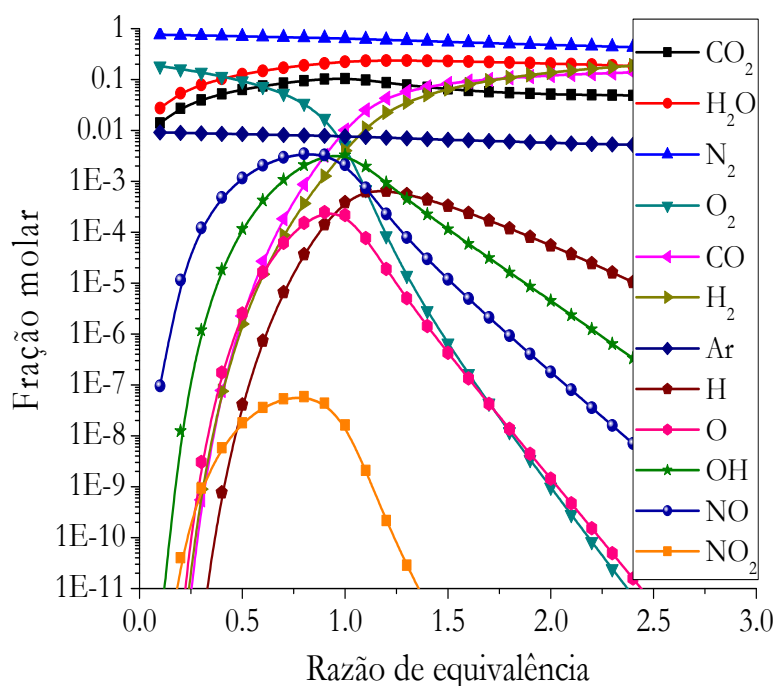


Fig. 13. Fração molar das emissões para a combustão do metanol a 150 kPa e 350 K.

5. COMENTÁRIOS DE ENCERRAMENTO

O uso de substituições sucessivas, combinado com a fatoração LU e o procedimento de Newton-Raphson, permitiu o cálculo rápido da concentração de espécies químicas em equilíbrio nos produtos da combustão evitando os habituais problemas com singularidades.

Embora o presente estudo apresenta os resultados para a aplicação de apenas três combustíveis (diesel, etanol e metanol), o código computacional é capaz de utilizar qualquer tipo de combustível queimado em turbinas a gás, exigindo apenas a composição química do combustível e seus coeficientes termodinâmicos.

A descrição do comportamento de cada concentração da espécie química estudada se realizou em função da razão de equivalência, as mesmas que foram detalhadas para cada tipo de combustível queimado e para as diversas condições de funcionamento do combustor. A ferramenta computacional passou a ser particularmente útil para a determinação das emissões de CO, CO₂, NO e NO₂ durante a simulação numérica da combustão do diesel, etanol e metanol em uma turbina a gás estacionária flex. Os resultados dos cálculos podem ser utilizados para o controle das emissões, com o dimensionamento adequado das partes do combustor que interferem nos parâmetros estudados.

REFERÊNCIAS

- [1] Barbosa, J.R., Bringhenti, C., “*Simulação Numérica do Desempenho de Turbinas a Gás*”, COBEM99, Águas de Lindóia, SP, Brazil, Anais do COBEM99 (1999)
- [2] Allaire, D.L., “*A Physics-Based Emissions Model for Aircraft Gas Turbine Combustors*”, Master’s Thesis, Department of Aeronautics and Astronautics, Massachusetts Institute of Technology, USA, Advisor: Karen Willcox, 1-105 (2006)

- [3] Barbosa, J.R., Pilidis, P., “GEOPHILES - Generation Of Power with High Levels of Environmental Friendliness - A Technology Transfer Project between Europe and South America”, international gas turbines congress, Munich, ASME PAPER GT-586 (2000)
- [4] Barbosa, J.R., Takeda, A.S., Monteiro, J.F., Mendonça, M.T., Ramsden, K.W., “A Small Gas Turbine for Drone Aircraft - Design Philosophy”, Gas Turbine and Aeroengine Congress, Brussels, ASME PAPER GT-196 (1990)
- [5] Barringer, M., “Design and Benchmarking of a Combustor Simulator Relevant to Gas Turbine Engines”, Master’s Thesis, Mechanical Engineering, Virginia Polytechnic Institute and state University, USA, Advisor: Karen A. Thole, 1-188 (2001)
- [6] Desantes, J.M., Pastor, J.V., García-Oliver, J.M., Pastor, J.M., “A 1D Model for the Description of Mixing-Controlled Reacting Diesel Sprays”, *Combustion and Flame*, **156**, 234-249 (2009)
- [7] Getino, L.H., Barbosa, J.R., “Limites de Operação de Uma Turbina a Gás”, VI ENCIT, Florianópolis, SC, Brazil (1996)
- [8] Pereira, F.C., “Numerical Simulation of a Two-Stage Turbine for Turbopumps of Liquid Propellant Rocket Engine”, Dissertação (Engenharia Aeronáutica e Mecânica), Instituto Tecnológico de Aeronáutica, Orientador: João Roberto Barbosa (1999)
- [9] Rodriguez, C.G., “One-Dimensional, Finite-Rate Model for Gas Turbine Combustors”, Doctorate Thesis, Mechanical Engineering, Virginia Polytechnic Institute and State University, USA, Advisor: W. F. O’Brien, 1-132 (1997)
- [10] Shakariyants, S.A., “Generic Methods for Aero-Engine Exhaust Emission Production”, Doctorate Thesis, Technische Universiteit Delft, The Netherlands, Advisor: J. P. van Buijtenen, 1-327 (2008)
- [11] Stuttaford, P.J., “Preliminary Gas Turbine Combustor Design Using a Network Approach”, Doctorate Thesis, School of Mechanical Engineering, Cranfield University, UK, Advisor: Philip A. Rubini (1997)
- [12] Valverde-Salvador, C.A., “Modelo matemático de câmaras de combustão bipropelentes”, Dissertação de Mestrado, Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais, Orientador: Fernando de Souza Costa (2004)
- [13] GAO, “Aviation and Climate Change”, United States Government Accountability Office, Congressional Committees, USA, 1-100 (2009)
- [14] Kraiko, A.N., Makarov, V.E., “One-Dimensional Mathematical Model Of The Combustion Chamber Of A Hydrogen/Air Hypersonic Ramjet”, *Fluid Dynamics*, **32**(1), Plenum Publishing Corporation, 1-8 (1997)
- [15] Reynolds, J.P., Jeris, J.S., Theodore, L., “*Handbook of Chemical and Environmental Engineering Calculations*”, John Wiley and Sons Inc. Publication, New York, USA, 1-959 (2002)
- [16] Volterra, V., *Theory of Functionals and of Integral and Integro-Differential Equations*, Dover, New York, USA (1959)
- [17] McBride, B.J., Gordon, S., Reno, M.A., “Coefficients for Calculating Thermodynamic and Transport Properties of Individual Species”, NASA Technical Memorandum 4513, National Aeronautics and Space Administration, USA, 1-94 (1993)
- [18] Lefebvre, A.H., *Gas Turbine Combustion*, Second Edition, Taylor & Francis Group LLC, New York, NY, USA, 1-400 (1999)
- [19] Edwards, T., “Kerosene Fuels for Aerospace Propulsions – Composition and Properties”, 38th AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference & Exhibit, Indianapolis, Indiana, 1-11 (2002)
- [20] Clark, L., “Emissions and Operational Aspects of Methanol as an Alternative Fuel in a Stationary Gas Turbine”, U. S. Department of Energy and Air Products and Chemicals Inc., Allentown, Pa, USA, 1-124 (2000)
- [21] Suntanaa, A.S., Vogta, K.A., Turnblomb, C.E., Upadhyef, R., “Bio-methanol potential in Indonesia: Forest biomass as a source of bio-energy that reduces carbon emissions”, *Applied Energy*, **86**, S215–S221 (2009)
- [22] Parchen, R.R., “Decay of swirl in turbulent pipe flows”, PhD Thesis, Eindhoven University of Technology, Eindhoven, the Netherlands, 1-147 (1993)
- [23] Pinto, C.M.E., “Um Modelo para Análise Termodinâmica de Sistemas de Potência Incluindo o Resfriamento da Turbina a Gás”, Dissertação de Mestrado, Universidade estadual de Campinas, Campinas, SP, Brasil, 1-220 (2002)
- [24] Little, J.E., Nemets, S.A., Tornabene, R.T., “Fuel-Flexible Gas Turbine Combustor Flametube Facility”, TM—2004-212715, NASA Center for Aerospace Information, 7121 Standard Drive Hanover, MD 21076, USA, 1-18 (2004)

- [25] Lazaroïu, G., "Modeling and simulating combustion and generation of NO_x", *Fuel Processing Technology*, **88**, 771–777 (2007)
- [26] Burmberger, S., Sattelmayer, T., "Optimization of the Aerodynamic Flame Stabilization for Fuel Flexible Gas Turbine Premix Burners", *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, ASME, **133**, 101501-10, USA, 1-10 (2011)
- [27] Rahm, S., Goldmeier, J., Molière, M., Eranki, A., "Addressing Gas Turbine Fuel Flexibility", *Proceedings of POWER-GEN Middle East*, Manama, Bahrain, 1-14 (2009)
- [28] Kouroussis, D., Karimi, S., "Alternative Fuels in Transportation", *Bulletin of Science Technology & Society*, SAGE, Canada, 1-11 (2006)
- [29] Sharma, N.Y., Som, K., "Influence of fuel volatility on combustion and emission characteristics in a gas turbine combustor at different inlet pressures and swirl conditions", *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part A: Journal of Power and Energy*, England, United Kingdom, 1-13 (2002)
- [30] Datta, A., Som, S.K., "Energy and exergy balance in a gas turbine combustor", *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part A: Journal of Power and Energy*, England, United Kingdom, 1-11 (1999)

SIMPLIFIED METHODOLOGY TO ASSESS THE USE OF ALTERNATIVE FUELS AT FUEL FLEXIBLE GAS TURBINE COMBUSTION CHAMBER DESIGN STAGE USING THERMOKINETIC EQUILIBRIUM AND NEARLY-GLOBAL MECHANISMS

Abstract – Modern combustion turbines have several applications: power stations, naval, aeronautical and oil industry. Aeronautical applications seek reduction of pollutant emissions using mixtures of conventional Jet fuels with biofuels and synthetic fuels. Due to the restrictions of natural gas and other oil fuels supply for the generation of electricity, the use of alternative fuels in stationary gas turbines is being seriously considered. Generally, all liquid and gaseous fuels from biomass, syngas, biogas, refinery gas and other unconventional sources are considered as alternative fuels. In the last years, with the objective of making the industrial and aeronautical process in harmony with the current environmental laws around the world, much research on the use of these alternative fuels in gas turbines is in progress. Gas turbines are thermal machines with the great advantage of being capable of successfully burning a large variety of fuels in a continuous combustion process. Gas turbine combustion chambers with this ability are referred as "Fuel Flexible Gas Turbine Combustor". This paper aims at describing a methodology for sizing fuel flexible gas turbine combustors and, additionally, analyzing the reacting flow in these designed combustion chambers. The design of the fuel flexible gas turbine combustors is based on the thermokinetic equilibrium, nearly-global mechanisms, zero and one-dimensional approaches simultaneously with numerical methods as Newton-Raphson, LU factorization and inverse Lagrange polynomials. A computational tool has been developed for the combustor sizing. The zero and one-dimensional models are based on the methodology developed by Lefebvre, Melconian e Modak. The thermokinetic equilibrium, flammability limit and nearly-global mechanisms models are based on the methodology developed by Gordon and McBride. The study of the combustion efficiency for the studied fuels and its influence on the production of pollutant emissions under several operating conditions is presented. Useful information is generated at the design stage of a fuel flexible gas turbine combustion chamber, which may be used to alter the pollutant emissions at very early stage of the design.

Keywords – Numerical methods, Reacting flows, Combustors, Gas turbines, Alternative fuels.