

UNESP
Faculdade de Engenharia de Guaratinguetá

Guaratinguetá
2001



1110000473



*“Modelagem de um Incinerador de
Resíduos Aquosos Utilizando
Cinética Química Detalhada”*

RODRIGO PASSOS CUNHA

156



UNESP
UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA
CAMPUS DE GUARATINGUETÁ

MODELAGEM DE UM INCINERADOR
DE RESÍDUOS AQUOSOS UTILIZANDO
CINÉTICA QUÍMICA DETALHADA

RODRIGO PASSOS CUNHA

Dissertação apresentada à Faculdade
de Engenharia de Guaratinguetá da
Universidade Estadual Paulista, para
a obtenção do título de Mestre em
Engenharia Mecânica (Área de
Concentração: Transmissão e
Conversão de Energia).

BANCA EXAMINADORA

Cunha, Rodrigo Passos
C972m
Modelagem de um incinerador de resíduos aquosos utilizando
cinética química detalhada / Rodrigo Passos Cunha - Guaratinguetá

Orientador: Prof. Dr. Paulo Magalhães Filho

Co-orientador: Prof. Dr. Armando de Azevedo Caldeira Pires

Bibliografia: 179-84
Dissertação (mestrado) - Universidade Estadual Paulista,
Faculdade de Engenharia de Guaratinguetá, 2001
Orientador: Prof. Dr. Paulo Magalhães Filho
Co-orientador: Prof. Dr. Armando de Azevedo Caldeira Pires

1. Combustão. Engenharia. I. Título

CDU 662.9

Guaratinguetá
2001

473

FACULDADE DE ENGENHARIA
DE GUARATINGUETÁ

BIBLIOTECA

473

MODELAGEM DE UM INCINERADOR
DE RESÍDUOS AQUOSOS UTILIZANDO
CINÉTICA QUÍMICA DETALHADA

RODRIGO PASSOS CUNHA

Dissertação apresentada à Faculdade
de Engenharia de Guaratinguetá da
Universidade Estadual Paulista para
a obtenção do título de Mestre em
Engenharia Mecânica (Área de
Concentração: Transmissão e
Conversão de Energia).

Cunha, Rodrigo Passos

C972m Modelagem de um incinerador de resíduos aquosos utilizando
cinética química detalhada / Rodrigo Passos Cunha. – Guaratinguetá
: [s.n.], 2001
88f. : il.

Bibliografia: f.79-84

Dissertação (mestrado) – Universidade Estadual Paulista,
Faculdade de Engenharia de Guaratinguetá, 2001

Orientador: Prof. Dr. Paulo Magalhães Filho

Co-orientador: Prof. Dr. Armando de Azevedo Caldeira Pires

1. Combustão, Engenharia I. Título

CDU 662.9

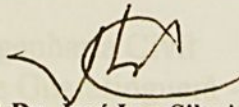
“MODELAGEM DE UM INCINERADOR DE RESÍDUOS AQUOSOS UTILIZANDO
CINÉTICA QUÍMICA DETALHADA”

RODRIGO PASSOS CUNHA

ESTA DISSERTAÇÃO FOI JULGADA ADEQUADA PARA A OBTENÇÃO DO TÍTULO DE
“MESTRE EM ENGENHARIA MECÂNICA”

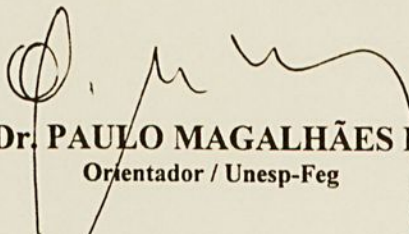
ESPECIALIDADE: ENGENHARIA MECÂNICA
ÁREA DE CONCENTRAÇÃO: TRANSMISSÃO E CONVERSÃO DE ENERGIA

APROVADA EM SUA FORMA FINAL PELO PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO

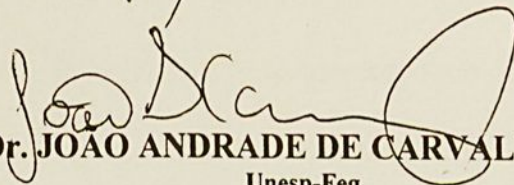


Prof. Dr. José Luz Silveira
Coordenador

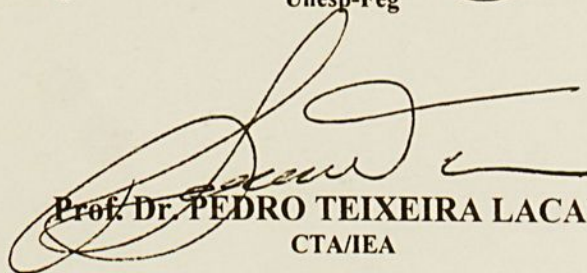
BANCA EXAMINADORA:



Prof. Dr. PAULO MAGALHÃES FILHO
Orientador / Unesp-Feg



Prof. Dr. JOAO ANDRADE DE CARVALHO JÚNIOR
Unesp-Feg



Prof. Dr. PEDRO TEIXEIRA LACAVAL
CTA/IEA

Agosto de 2001

DADOS CURRICULARES

RODRIGO PASSOS CUNHA

NASCIMENTO 15.10.1975 – TAUBATÉ/ SP

FILIAÇÃO Sylvio Franco Cunha
Vilma Passos Cunha

1993/1997 Curso de Graduação em Engenharia Civil
Faculdade de Engenharia de Guaratinguê - UNESP

1998 Curso de Pós-Graduação, nível latu senso, em
Especialização em Engenharia em Saúde Pública e
Ambiental
Faculdade de Saúde Pública - USP

Aos meus pais, pelo amor e pela oportunidade de ter chegado aqui.

AGRADECIMENTOS

DEDICATÓRIA

Ao meu Orientador, Prof. Dr. Paulo Magalhães Filho, pela valiosa orientação e incentivo.

Ao meu Co-orientador, Prof. Dr. Armando de Azevedo Caldeira Pinx, pelo apoio técnico e humano.

Ao Prof. Dr. Paulo Teófilo Lacava, pela assistência durante o trabalho e pela paciência.

Ao Prof. Dr. João Andrade de Carvalho Junior pelas dicas e sugestões.

A todos os colegas, tanto da FEG como do INPE, pelo companheirismo.

Aos meus pais, pelo amor e pela oportunidade de ter chegado aqui.

AGRADECIMENTOS

Ao meu Orientador, Prof. Dr. Paulo Magalhães Filho, pela valiosa orientação e incentivo.

Ao meu Co-orientador, Prof. Dr. Armando de Azevedo Caldeira Pires, pelo apoio técnico e incentivo.

Ao Prof. Dr. Pedro Teixeira Lacava, pela assistência durante o trabalho e pela confiança.

Ao Prof. Dr. João Andrade de Carvalho Júnior pelas idéias enriquecedoras.

A todos os colegas, tanto da FEG como do INPE, pelo companheirismo.

SUMÁRIO

LISTA DE FIGURAS

LISTA DE TABELAS

LISTA DE SÍMBOLOS

Resumo

Abstract

CAPÍTULOS

1. INTRODUÇÃO

1.1 A problemática dos resíduos líquidos perigosos.....	1
1.2 A incineração de resíduos perigosos: uma forma de tratamento.....	2
1.2.1 Definições.....	2
1.2.2 Tecnologia de incineração.....	2
1.2.3 Incineradores de injeção líquida.....	3
1.2.4 A problemática das emissões atmosféricas.....	5
1.2.5 A formação de NO_x em câmaras de combustão.....	8
1.2.6 Decomposição térmica da amônia.....	9
Este trabalho contou com apoio das seguintes entidades:	
- CAPES – pela bolsa de estudo.....	12
- INPE – pelo apoio técnico.....	14
2.1 O CHEMKIN aplicado a fimexão de NO_x no processo de incineração.....	15
2.2 Subrotina operacional do CHEMKIN.....	27
2.2.1 O mecanismo de reações.....	28
2.3 Os modelos aplicativos utilizados neste trabalho.....	30

SUMÁRIO

LISTA DE FIGURAS	24
LISTA DE TABELAS	24
LISTA DE SÍMBOLOS	24
Resumo	24
<i>Abstract</i>	24
CAPÍTULOS	
1 INTRODUÇÃO	1
1.1 A problemática dos resíduos líquidos perigosos.....	1
1.2 A incineração de resíduos perigosos: uma forma de tratamento.....	2
1.2.1 Definições.....	2
1.2.2 Tecnologia de incineração.....	2
1.2.3 Incineradores de injeção líquida.....	3
1.2.4 A problemática das emissões atmosféricas.....	5
1.2.5 A formação de NO _x em câmaras de combustão.....	6
1.2.6 Decomposição térmica da amônia.....	9
1.3 Objetivo do trabalho	12
2 O PACOTE COMPUTACIONAL CHEMKIN	14
2.1 Aspectos Gerais.....	14
2.2 O CHEMKIN aplicado a formação de NO _x no processo de incineração.....	15
2.3 Estrutura operacional do CHEMKIN.....	17
2.3.1 O mecanismo de reações	18
2.4 Os modelos aplicativos utilizados neste trabalho.....	20

2.4.1	O modelo aplicativo Aurora.....	21
2.4.2	O modelo aplicativo Plug.....	22
3	O DESENVOLVIMENTO DA MODELAGEM	
3.1	Definição dos parâmetros.....	24
3.1.1	Descrição das simulações iniciais.....	24
3.1.2	O mecanismo de reações utilizado.....	24
3.1.3	A zona de estabilização de chama	30
3.1.4	A zona de pós-chama.....	33
3.2	Simulações dos experimentos apresentados em Lacava (2000)	35
3.2.1	Descrição experimental.....	35
3.2.2	Dados medidos nos experimentos.....	40
3.2.3	Simulações para o experimento 1.....	42
3.2.4	Simulações para o experimento 2.....	54
3.2.5	Ajuste para a concentração de NO.....	59
4	SIMULAÇÕES DO EXPERIMENTO COM INJEÇÃO DE ÁGUA PARA UM COMBUSTÍVEL NITROGENADO	
4.1	Simulações considerando-se traços de amônia no combustível	67
4.1.1	Descrição das simulações.....	67
4.1.2	Resultados das simulações.....	68
4.2	Simulações injetando-se amônia na zona de pós-chama.....	71
4.2.1	Descrição das simulações.....	71
4.2.2	Resultados das simulações.....	73
5	CONCLUSÕES E COMENTÁRIOS	
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	79
	ANEXO A.....	85
	ANEXO B.....	87



LISTA DE FIGURAS

Figura 1	- Esquema de uma câmara de combustão de injeção líquida.....	4
Figura 2	- Concentrações de NO (ppm) na saída de uma fornalha para diferentes quantidades de nitrogênio adicionadas ao combustível (óleo combustível).....	8
Figura 3	- Esquema simplificado da decomposição térmica da amônia.....	12
Figura 4	- Esquema do mecanismo de desintegração de uma molécula poliatômica sob as condições do incinerador.....	16
Figura 5	- Esquema mostrando como o <i>software</i> CHEMKIN- Versão III trabalha.....	18
Figura 6	- Esquema de uma simulação resolvida à temperatura fixa.....	22
Figura 7	- Esquema de uma simulação resolvida pela equação da energia.....	22
Figura 8	- Esquema de simulação escolhido para a zona de pós-chama.....	23
Figura 9	- O comprimento axial da zona de chama em uma fornalha vertical.....	30
Figura 10	- Foto do incinerador de injeção líquida instalado no LCP/INPE utilizado e construído por Lacava (2000).....	36
Figura 11	- Efeito aerodinâmico de um estabilizador de chama tipo <i>swirl</i> em um queimador de furo central.....	37

Figura 12 - Foto do queimador com o estabilizador de chama tipo <i>swirl</i> utilizado por Lacava.....	38
Figura 13 - Posição dos termopares ao longo do incinerador de injeção líquida utilizado nos experimentos, e as dimensões do mesmo	39
Figura 14 - Perfis de temperatura para os experimentos 1 e 2	42
Figura 15 - Incinerador apresentado em Lacava (2000), dividido em volumes de controle.....	44
Figura 16 - Esquema dos modelos 1, 2, 3 (experimento 1).....	49
Figura 17 - Comparação entre o perfil de temperatura simulado, e o perfil de temperatura medido por Lacava (2000), para a zona de pós-chama do experimento 1.....	52
Figura 18 - Perfil do tempo de residência ao longo do reator <i>plug flow</i> para o experimento 1	53
Figura 19 - Concentrações dos gases O ₂ , CO ₂ , CO e NO, em base úmida, ao longo do reator <i>plug flow</i> para o experimento 1	54
Figura 20 - Concentrações dos gases O ₂ , CO ₂ , CO e NO, em base úmida, ao longo do reator <i>plug flow</i> para o experimento 2	59
Figura 21 - Variação da concentração de NO, em base úmida, em relação à temperatura, na zona de estabilização de chama, para o experimento 2.....	60
Figura 22 - Variação das concentrações de O ₂ e CO ₂ em relação à temperatura, na zona de estabilização de chama, para o experimento 2.....	63
Figura 23 - Perfis de temperatura simulados para a zona de pós-chama nos casos T _x =1353 (K) e 1795 (K), referentes ao experimento 2	64

Figura 24 - Concentração do gás NO, em base seca, ao longo do reator <i>plug flow</i> , para os casos $T_x=1353$ (K) e 1795 (K), referentes ao experimento 2	65
Figura 25 - Quantidades de nitrogênio presentes nos combustível convertidas a NO, obtidas através das simulações realizadas para os casos nos quais injetou-se amônia.....	69
Figura 26 - Concentrações de NO no final do incinerador com os aumentos propostos para a quantidade de amônia no combustível.....	70
Figura 27 - Concentrações de O_2 no final do incinerador com os aumentos propostos para a quantidade de amônia no combustível.....	70
Figura 28 - Configuração de reatores utilizada para se simular a injeção de amônia na zona de pós-chama.....	72
Figura 29 - Concentrações de NO e NH_3 obtidas para a saída do incinerador, através das simulações realizadas, em função da vazão mássica de amônia injetada a 140 cm do queimador.....	74
Figura 30 - Concentrações dos gases O_2 , CO_2 , CO, NO e NH_3 , em base úmida, ao longo do segundo reator <i>plug flow</i> com $\dot{m}_{NH_3} = 0,65$ (g/s).....	75
Figura 31 - Perfil de temperatura referente a simulação da zona de pós-chama ($T_x= 1863$ (K), experimento 1)	85

LISTA DE TABELAS

Tabela 1	- Aplicabilidade dos principais tipos de incineradores para as várias formas físicas do resíduo.....	3
Tabela 2	- Técnicas de redução de NO_x em combustores.....	11
Tabela 3	- Trabalhos utilizados como referência bibliográfica.....	20
Tabela 4	- Composições real e normalizada do GLP em base mássica.....	26
Tabela 5	- Valor do PCI para todas as espécies envolvidas em cálculo neste trabalho.....	27
Tabela 6	- Características das chamas simuladas com intuito de se avaliar a aplicação da equação 25.....	27
Tabela 7	- Transformação dos combustíveis das chamas simuladas à eteno e hidrogênio aplicando-se a equação 25.....	28
Tabela 8	- Balanço de energia entre os casos real e aproximado para as chamas simuladas, considerando n o número de mols.....	28
Tabela 9	- Concentrações de O_2 , CO_2 , N_2 , CO e NO para os casos real e aproximado (<i>software</i> Aurora), em base úmida, simulando-se um reator de mistura perfeita para ambas as chamas.....	29
Tabela 10	- Composição do ar em base volumétrica.....	29
Tabela 11	- Vazões mássicas dos reagentes medidas nos experimentos apresentados por Lacava (2000), os quais foram simulados neste trabalho.....	40
Tabela 12	- Concentrações dos gases medidos no incinerador utilizado por Lacava (2000), em base seca, na saída do incinerador, sobre o eixo central do mesmo	41

Tabela 13 - Comparação para o experimento 1, entre a análise de gases na saída da câmara com o balanço de massa, para 1,0 (s) de escoamento	41
Tabela 14 - Comparação para o experimento 2, entre a análise de gases na saída da câmara com o balanço de massa, para 1,0 (s) de escoamento	41
Tabela 15 - Tempo de residência correspondente a cada volume de controle apresentado na Figura 15, para o experimento 1.....	45
Tabela 16 - Número de moles das espécies reagentes para o experimento 1, levando-se em conta 1,0 (s) de escoamento	46
Tabela 17 - Transformações previstas no item 3.1.2, das espécies constituintes do GLP não contempladas no mecanismo Konnov versão 0.4, para espécies existentes em tal mecanismo.....	46
Tabela 18 - Frações molares das espécies reagentes consideradas nas simulações (Aurora) do experimento 1.....	47
Tabela 19 - Cálculo do termo \dot{P}_{GLP} para o experimento 1.....	47
Tabela 20 - Taxa de calor perdido para o experimento 1, e as parcelas envolvidas no cálculo (equação 28).....	48
Tabela 21 - A taxa de conversão de combustível para o primeiro reator de cada modelo (experimento 1).....	49
Tabela 22 - Temperaturas de convergência obtidas através do Aurora para cada reator, em cada modelo de simulação, para o experimento 1.	50
Tabela 23 - Frações molares de saída do Aurora, e as frações molares de entrada no Plug para a simulação da zona de pós-chama do experimento 1, através do modelo 1.....	51

Tabela 24 - Comparação entre as concentrações dos gases medidos na saída do incinerador, e as concentrações obtidas para o final do reator <i>plug flow</i> , em base seca, para o experimento 1.....	53
Tabela 25 - Dados de entrada , solicitados pelo Aurora, para a simulação da zona de estabilização de chama do experimento 2	56
Tabela 26 - A taxa de conversão de combustível para o primeiro reator de cada modelo (experimento 2).....	56
Tabela 27 - Dados de entrada , solicitados pelo Plug, para a simulação da zona de pós-chama do experimento 2	57
Tabela 28 - Comparação entre as concentrações dos gases medidos na saída do incinerador, e as concentrações obtidas para o final do reator <i>plug flow</i> , em base seca, para o experimento 2.....	58
Tabela 29 - Comparação entre as temperaturas de convergência obtidas para os casos $\dot{Q}_p = 0$ e $\dot{Q}_p = \dot{q}_{GLP}$, para o experimento 2	61
Tabela 30 - Comparação entre as concentrações dos gases O ₂ , CO ₂ , CO e NO, em base úmida, no final do reator de mistura perfeita, entre os casos simulados a T _x =1353 (K) e 1795 (K), para o experimento 2	63
Tabela 31 - Comparação entre as concentrações dos gases O ₂ , CO ₂ , CO e NO, em base seca, para o final do incinerador, entre os casos simulados a T _x =1353 (K) e 1795 (K), e as medidas tomadas por Lacava (2000) (experimento 2)	64
Tabela 32 - Especificação do combustível nos casos simulados, nos quais supôs-se a adição de amônia(experimento 2)	67
Tabela 33 - Concentrações finais dos gases O ₂ , CO ₂ , CO, NO e NH ₃ , em base seca, para o final do incinerador, referente aos casos simulados com e sem adição de amônia (experimento 2).....	69

Tabela 34 - Concentrações dos gases de combustão, em base seca, obtidas para a saída do incinerador, simulando-se a injeção de amônia a 140 (cm) do queimador	76
Tabela 35 - Tempo de residência parcial e total, obtidos simulando-se a injeção de amônia a 140 (cm) do queimador.....	76
Tabela 36 - Comparação entre as concentrações dos gases O_2 , CO_2 , CO e NO , em base seca, para o final do incinerador, entre o caso simulado a $T_x=1863$ (K), e as medidas tomadas por Lacava (2000) (experimento 1)	86
Tabela 37 - Número de Reynolds para os experimentos 1 e 2 realizados por Lacava (2000).....	88

K_j - taxa constante da j-ésima reação

K_{-j} - taxa constante de reação reversa da j-ésima reação

N_i - fluxo molar da espécie i

E_{a_j} - energia de ativação da j-ésima reação

Z - equação universal dos gases perfeitos

A_j - constante da j-ésima reação

B_j - constante da j-ésima reação

x - comprimento axial da zona de chama

V - Volume do incinerador

P - pressão atmosférica

M - massa molecular média de uma mistura gasosa

M_i - a massa molecular do componente i de uma mistura gasosa

M - vazão mássica total dos reagentes

m_i - vazão mássica da espécie i

t_r - tempo de residência

LISTA DE SÍMBOLOS

ν'_{ij} - coeficiente estequiométrico da i-ésima espécie reagente da j-ésima reação.

ν''_{ij} - coeficiente estequiométrico da i-ésima espécie reagente da j-ésima reação.

S_i - símbolo da i-ésima espécie.

s - Número de swirl

$\dot{\omega}_i$ - taxa de produção final da i-ésima espécie.

K_{fj} - taxa constante da j-ésima reação.

K_{rj} - taxa constante da reação reversa da j-ésima reação.

X_i - fração molar da espécie i.

E_{Aj} - energia de ativação da j-ésima equação.

\bar{R} - constante universal dos gases perfeitos.

A_j - constante da j-ésima reação.

B_j - constante da j-ésima reação.

x - comprimento axial da zona de chama.

V - Volume do incinerador.

P - pressão atmosférica.

M - massa molecular média de uma mistura gasosa.

M_i - a massa molecular do componente i de uma mistura gasosa

\dot{m}_t - vazão mássica total dos reagentes

\dot{m}_i - vazão mássica da espécie i

t_R - tempo de residência

- t_x - tempo de residência médio dos reagentes na zona de estabilização de chama.
- t_{plug} - tempo residência na zona de pós-chama (estimado)
- $t_{plug, simulado}$ - tempo residência na zona de pós-chama (simulado)
- \dot{Q}_p - taxa de perda de calor
- n_j - número de moles de j
- PCI_j - poder calorífico inferior de j
- \dot{p}_{GLP} - diferença energética causada pela aproximação das espécies gasosas constituintes do GLP não contempladas no mecanismo **Konnov versão 0.4**
- \dot{q}_{plug} - vazão volumétrica para a entrada da zona de pós-chama
- T - Temperatura
- T_x - temperatura de convergência obtida pelo *Aurora* na zona de estabilização de chama
- T_r - temperatura de referência (T_r)
- T_i - temperatura representativa do volume de controle i
- T_{eb} - Temperatura de ebulição
- TI - temperatura inicial dos reagentes no incinerador
- TF - temperatura medida em x
- TA - Temperatura de chama adiabática
- $C_{p,j}$ - o calor específico do gás de combustão j como uma função da temperatura
- h_L - calor latente de vaporização do resíduo a 25 °C
- μ_m - viscosidade absoluta de uma mistura gasosa
- μ_i - viscosidade absoluta de cada componente i da mistura reagente da zona de pós-chama

- μ_r - a viscosidade absoluta de cada componente i da mistura reagente da zona de pós-chama, determinada em T_r
- ϑ_m - volume específico da mistura gasosa reagente da zona de pós-chama
- $TCC_{i,x}$ - taxa de conversão de combustível na zona de estabilização de chama
- $[i]$ - concentração da espécie i
- N_{NO} - quantidade de nitrogênio do combustível convertida à NO
- Re - número de Reynolds
- D - Diâmetro

SUBSCRITOS

- res. - referente a resíduo
- comb. - referente a combustível
- GLP - referente ao gás GLP
- NH₃ - referente a amônia
- NO - referente a NO
- N - referente a nitrogênio
- x - referente a zona de estabilização de chama
- mo - referente ao escoamento gasoso a montante do ponto de injeção de amônia na zona de pós-chama
- ju - referente ao escoamento gasoso a jusante do ponto de injeção de amônia na zona de pós-chama
- en - referente a entrada
- sai - referente a saída

PALAVRAS-CHAVE: Incinerador, resíduo espesso, combustível nitrogenado, amônia, NO_x, química química

CUNHA, R. P. *Modelagem de um incinerador de resíduos aquosos utilizando cinética química detalhada*. Guaratinguetá, 2001. 88p. Dissertação (Mestrado em Engenharia Mecânica) – Faculdade de Engenharia, Campus de Guaratinguetá, Universidade Estadual Paulista.

RESUMO

Neste trabalho desenvolveu-se um modelo de simulação para um incinerador vertical de resíduos aquosos de 1000 litros de volume, instalado no Laboratório de Combustão e Propulsão do INPE de Cachoeira Paulista -SP. O modelo elaborado tem como ferramenta principal o pacote computacional CHEMKIN – versão III, e visa reproduzir a concentração dos gases O_2 , CO_2 , CO e NO , gerados no processo de combustão, que seriam emitidos à atmosfera. O desenvolvimento do trabalho foi feito a partir de dois experimentos realizados por Lacava (2000) em tal incinerador.

Ainda neste trabalho, a partir de um dos experimentos citados, no qual Lacava (2000) injetou água no incinerador simulando um resíduo aquoso, fizaram-se simulações através do modelo desenvolvido, nas quais supôs-se que o combustível era nitrogenado (grande fonte de formação de gases NO_x). Para tal, considerou-se traços de amônia no combustível.

A injeção de amônia na zona de pós-chama de combustores é uma técnica utilizada pela indústria para se reduzir a emissão de NO_x . Então, dentre os casos simulados relatados no parágrafo anterior, para o que apresentou maior concentração de NO , novas simulações foram feitas considerando-se a injeção de amônia a 140 (cm) do queimador. Através dessas determinou-se que vazão mássica de amônia injetada reduziria a concentração de NO_x a um valor de emissão razoável, gerando baixa concentração de amônia residual, a qual também é nociva ao meio ambiente.

PALAVRAS-CHAVE: Incinerador, resíduos aquosos, combustível nitrogenado, amônia, NO_x , cinética química.

CUNHA, R. P. *Modeling a incinerator of aqueous waste using detailed chemical kinetics.* Guaratinguetá, 2001. 88p. Dissertação (Mestrado em Engenharia Mecânica) – Faculdade de Engenharia, Campus de Guaratinguetá, Universidade Estadual Paulista.

ABSTRACT

A simulation model was developed for a vertical 1000 litro volume aqueous residue incinerator . The equipment is installed in the combustion and propulsion laboratory of INPE, in Cachoeira Paulista , SP. The model utilizes the computer package CHEMKIN III as main tool , and gives O₂, CO₂, CO and NO_x concentrations in the flue gases generated by the incineration process. The model is checked against experimental data obtained by Lacava (2000) in the incineration.

This work also considers the case of traces of ammonia present in the fuel to simulate fuel NO_x generation in the incineration of the aqueous residue studied by Lacava (2000).

Ammonia injection in the flame post zone is a technique used to reduce NO_x emission. Then, the case of auxiliary fuel with ammonia was studied with injection of this same substance at 140 (cm) from fuel injection. Simulations were carried out to determine the mass flow rates of ammonia in the post flame that would reduce the NO_x concentration to a minimum also keeping the concentration of residual ammonia in a minimum.

KEYWORDS: Incinerator, aqueous waste, nitrogen fuel, ammonia, NO_x, chemical kinetics.

CAPÍTULO 1 - INTRODUÇÃO

1.1. A problemática dos resíduos líquidos perigosos

Os resíduos líquidos considerados perigosos são oriundos da atividade industrial, principalmente dos setores químico, petroquímico e farmacêutico.

Nas indústrias de processo químico, resíduos líquidos e pastosos provém principalmente de operações de separação tais como filtração e destilação. Pastas podem ser formadas em processos de decantação ou em fundos de vasos e reatores. Sistemas de tratamento de efluentes líquidos produzem comumente uma borra pastosa separável por decantação. A operação de lavagem de equipamentos produz geralmente água contaminada com produtos que dificilmente são tratados por processos convencionais (Bizzo, 1995). Santoleri (1986) ainda afirma que usualmente resíduos sólidos são dissolvidos em resíduos líquidos orgânicos, e que geralmente esses resíduos são incinerados. Tais resíduos necessitam de gerenciamento, na medida em que correspondem a uma carga poluente perigosa ao meio ambiente e a saúde pública.

Como os resíduos líquidos perigosos possuem um alto grau de percolação no solo, em preservação ao lençol freático eles não devem ser aterrados, nem mesmo em aterros sanitários destinados a resíduos perigosos. Portanto, a necessidade de se minimizar tal problema, somada às leis de controle ambiental, foram responsáveis pelo desenvolvimento de técnicas que visavam o correto tratamento deste tipo de resíduo, podendo ser citadas, por exemplo, a minimização da produção de resíduos líquidos no local de sua geração, a sua reutilização e a sua incineração.

1.2. A incineração de resíduos perigosos: uma forma de tratamento

1.2.1. Definições

A incineração é um processo de engenharia que emprega decomposição térmica via oxidação em alta temperatura (usualmente 900 °C, ou mais) para destruir a fração orgânica do resíduo e reduzir o seu volume. Tal processo visa destruir 100 % do resíduo. Geralmente, resíduos combustíveis, ou resíduo com conteúdo significativo de orgânicos são considerados os mais apropriados candidatos à incineração. Tecnicamente, contudo, qualquer resíduo que contenha uma fração orgânica perigosa, não importando quão pequena seja essa parcela, é um candidato potencial para a incineração.

A incineração consiste hoje em um processo largamente utilizado na disposição final de resíduos orgânicos ou não, tendo em vista sua alta eficiência de destruição e sua aplicabilidade em uma grande gama de produtos terminais. No entanto, a consciência pública apresenta-se hoje como um severo censor para as questões de meio ambiente. Tal fato exige que o projeto de um incinerador seja o resultado de uma criteriosa atividade de engenharia que garanta máxima eficiência e mínima interferência com os mecanismos ecológicos.

1.2.2. Tecnologia de incineração

Diferentes tecnologias de incineração têm sido desenvolvidas para tratar os vários tipos e formas físicas de resíduos perigosos. Os quatro tipos mais comuns de incineradores são os de injeção líquida (às vezes combinado com incineração de gases e vapores), fornos rotativos, câmara fixa e os de leito fluidizado. O processo de seleção e o projeto de sistemas de incineração de resíduos perigosos podem ser muito complexos. Felizmente, existe uma experiência considerável na manufatura industrial e vários guias úteis de projeto têm sido publicados (Saxena & Jotshi, 1996). A Tabela 1, relaciona a tecnologia empregada com o tipo de resíduo a ser incinerado.

TABELA 1-Aplicabilidade dos principais tipos de incineradores para as várias formas físicas do resíduo (Dempsey & Oppelt, 1993).

Resíduos	Injeção Líquida	Forno Rotativo	Câmara Fixa	Leito Fluidizado
Sólidos				
Granular, homogêneo		X	X	X
Irregular, bruto (pellets, etc.)		X	X	X
Baixo ponto de fusão (alcatrão, etc.)	X	X	X	X
Compostos orgânicos com constituintes de cinza fundíveis		X	X	X
Material não preparado, volumoso, material a granel		X	X	X
Gases				
Vapores orgânicos	X	X	X	X
Líquidos				
Resíduos aquosos com alta carga de orgânicos	X	X	X	X
Líquidos orgânicos	X	X	X	X
Sólidos / Líquidos				
Resíduo contendo compostos aromáticos hidrogenados (mínimo de 1204 °C)	X	X	X	
Lodo aquoso orgânico	X	X		X

A operação de um incinerador depende de três parâmetros básicos. Estes são os chamados três "T's" da combustão: tempo, temperatura, e turbulência. Tais parâmetros se alterados podem afetar a eficiência de combustão e a taxa de destruição de resíduo, resultando na obtenção de padrões indesejáveis (Melo, 1997).

1.2.3. Incineradores de injeção líquida

A incineração de resíduos líquidos perigosos, quando estes são bombeáveis, geralmente é realizada por câmaras de injeção líquida. Essas são usualmente caracterizadas por cilindros verticais ou horizontais revestidos

internamente de refratários, semelhantes a fornalhas, e equipadas com um ou mais queimadores. Os verticais são preferidos quando o resíduo contém alto teor de sais inorgânicos e de cinzas fundíveis, enquanto que os horizontais podem ser usados com resíduos com baixo teor de cinzas. Em ambos os tipos, o atomizador é o principal componente do sistema. Os resíduos líquidos são nebulizados em gotículas e queimados em suspensão. Os injetores de resíduos podem estar direcionados, em relação a chama, na direção axial, radial ou tangencial. A Figura 1 mostra o esquema de um incinerador de injeção líquida.

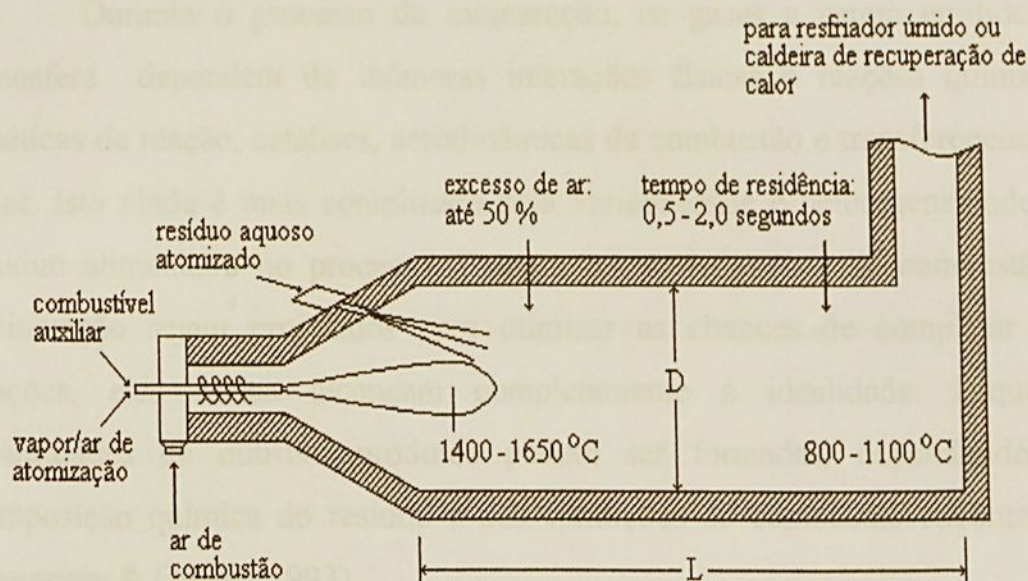


FIGURA 1- Esquema de uma câmara de combustão de injeção líquida (Dempsey & Oppelt, 1993).

A comunidade científica, em trabalhos experimentais, geralmente utiliza incineradores em escala laboratorial. Isto ocorre principalmente por motivos econômicos, já que para um incinerador em escala industrial ser construído é necessário um altíssimo investimento. Estudos em incineradores em escala laboratorial podem ser vistos em Linak et al. (1995), Mao & Barat (1996) e Lacava (2000).

Os resultados obtidos em incineradores em escalas laboratoriais podem ser aplicados em incineradores industriais utilizando leis de escalas.

Um estudo de leis de escala para a emissão de NO_x , segundo o desempenho de queimadores e fornalhas entre 30 (kW) e 12 (MW), é apresentado por Hsieh et al. (1998).

1.2.4. A problemática das emissões atmosféricas

Uma questão fundamental associada com a incineração de resíduos é o seu potencial poluidor, devido as cinzas geradas, e principalmente as emissões atmosféricas de gases tóxicos oriundas do processo de combustão.

Durante o processo de incineração, os gases a serem emitidos à atmosfera dependem de inúmeras interações físicas e reações químicas, cinéticas de reação, catálises, aerodinâmicas de combustão e transferências de calor. Isto ainda é mais complicado pela variabilidade e heterogeneidade do resíduo alimentado no processo. Embora os equipamentos de combustão e incineração sejam projetados para otimizar as chances de completar tais reações, eles nunca alcançam completamente a idealidade. Pequenas quantidades de outros produtos podem ser formadas, dependendo da composição química do resíduo e das condições de combustão encontradas (Dempsey & Oppelt, 1993).

Na realidade, a condição de equilíbrio térmico não acontece integralmente em uma câmara de combustão. A temperatura na câmara varia em tempo e espaço ocorrendo o mesmo para a concentração dos reagentes. Os resultados desse desequilíbrio são emissões de gases de grande toxicidade como produtos de combustão incompleta (PCIs) e principais compostos orgânicos perigosos (PCOPs). Além disso, diversos outros fatores, devido as condições de combustão encontradas e a composição dos reagentes, podem ser gerados gases que agridem a saúde pública e o meio ambiente (HCl , HBr , SO_x , NO_x) e materiais particulados.

Na tentativa de se reduzir a poluição atmosférica, para limites de emissões razoáveis à saúde pública e ao meio ambiente determinados por uma legislação ambiental, tem-se procurado desenvolver equipamentos de controle

de poluição de ar e técnicas que diminuem a emissão atmosférica de gases indesejados.

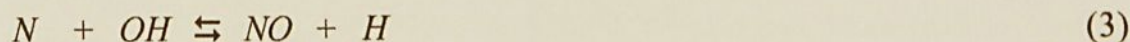
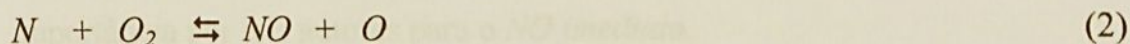
No Brasil os incineradores de resíduos perigosos estão sujeitos as leis previstas na legislação ambiental de cada estado da federação. Há também a “NBR-11.175-Incineração de Resíduos Sólidos Perigosos - Padrões de Desempenho” (ABNT, 1990). Essa norma técnica dispõe sobre padrões de desempenho de incineradores, fixando parâmetros para eficiência de combustão, especificando condições operacionais e de monitoramento e limitando emissões atmosféricas das seguintes substâncias: HCl, HF, CO, SO_x e NO_x.

1.2.5. A formação de NO_x em câmaras de combustão

O termo NO_x designa a soma dos gases monóxido de nitrogênio (NO) e dióxido de nitrogênio (NO₂). Tais gases são os dois componentes de nitrogênio mais emitidos em processos de combustão. Tais gases, quando emitidos à atmosfera danificam a camada de ozônio, contribuem para a chuva ácida são tóxicos às plantas, e principalmente são precursores do *smog* fotoquímico.

O NO₂ se deriva basicamente do NO, e geralmente nos gases de exaustão a sua concentração é desprezivelmente pequena em relação ao NO Chigier (1981). Já este gás, segundo Wood (1994), provém de três tipos de mecanismos: *o NO térmico, o NO imediato, e o NO do combustível.*

O *NO térmico* é resultante da direta oxidação do nitrogênio contido no ar, em altas temperaturas. Miller & Bowman (1989) citam que as três principais reações formadoras do *NO térmico* são as demonstradas através das equações (1), (2) e (3). A equação utilizada para se prognosticar a taxa de formação de *NO térmico*, $\frac{dNO}{dt}$, é denominada equação de *Zeldovich*, e é representada através da equação (4). Tal equação relaciona as concentrações de O₂ e N₂, a temperatura e o tempo de residência.



$$\frac{d(NO)}{dt} = 6,04 \cdot 10^{13} \cdot T^{-0,5} \cdot \exp\left(\frac{-69090}{T}\right) \cdot [O_2]^{0,5} \cdot [N_2] \quad (4)$$

Sendo: T a temperatura, $[O_2]$ a concentração do gás oxigênio e $[N_2]$ a concentração do gás nitrogênio.

As taxas de formação NO_x para hidrocarbonetos combustíveis podem exceder as taxas prognosticadas pela equação de Zeldovich em regiões pertos da chama. Este NO denominado de *NO imediato* por Fenimore (1971) é geralmente formada na vizinhança da chama pela participação de radicais que fazem parte do mecanismo reacional dos hidrocarbonetos.

O *NO do combustível* provém da oxidação do nitrogênio contido no combustível. Em câmaras de combustão, a presença de pequenos traços de nitrogênio no combustível auxiliar injetado, o que ocorre em alguns combustíveis fósseis como carvão mineral e gás natural, aumenta consideravelmente a concentração de NO, como mostra a Figura 2. Da mesma forma que no processo de incineração, resíduos orgânicos nitrogenados quando decompostos termicamente também são fontes de NO_x , pois exercem a função de combustível (Mao & Barat, 1996).

Das reações que governam os mecanismos *NO imediato* e o *NO do combustível*, um importante aspecto é a oxidação do ácido cianídrico (HCN). Segundo Miller & Bowman (1989) em condições estequiométricas e de temperatura favoráveis ao mecanismo *NO imediato*, radicais que participam do mecanismo reacional de hidrocarbonetos reagindo com o nitrogênio do ar convertem-se a ácido cianídrico, e estes darão origem ao radical NH que oxidado formará NO. As reações mostradas através das equações (5), (6) e

(7), que mostram a conversão $\text{CH}_2 \rightarrow \text{CH} \rightarrow \text{HCN}$ são citadas como de grande importância por tais autores para o *NO imediato*.

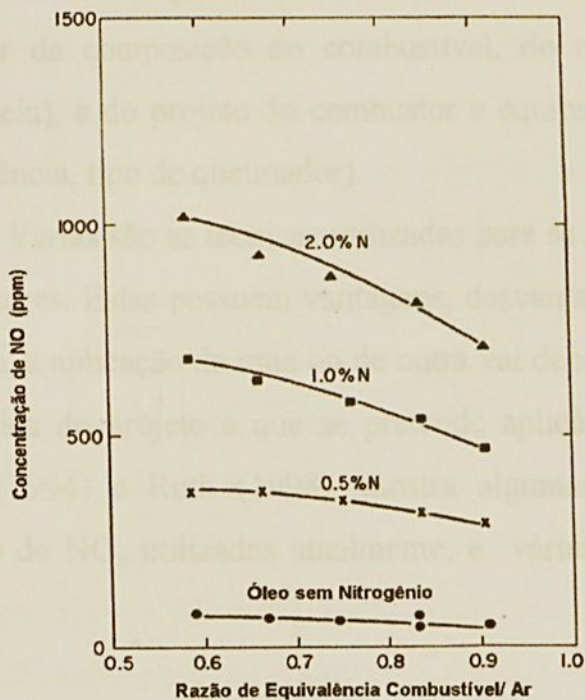
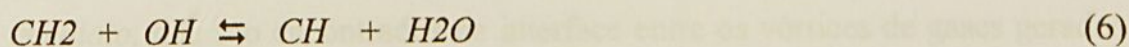


FIGURA 2- Concentrações de NO (ppm) na saída de uma fornalha para diferentes quantidades de nitrogênio adicionadas ao combustível (óleo combustível) Bowman (1975).

Em chamas difusivas turbulentas, que são características de incineradores e outros combustores industriais, ocorrem flutuações de temperatura devido a variações da razão de mistura combustível/ar e ao movimento da chama. Thompson et al.* (1975) citado por Chigier (1981),

*Thompson et al. (1975) é citado por Chigier (1981). Referência:

- Thompson D., Vince, I.M., Chigier, N.A. Effect of temperature fluctuation on NO formation. *Secund European Symposium on Combustion*, p.303-308, 1975.

examinou o efeito de pequenas flutuações de temperatura na formação de NO em chamas difusivas turbulentas concluindo que variações de 100 (K) podem aumentar a quantidade de NO em 150 %. Além disso, nesse tipo de chama, podem-se encontrar facilmente condições favoráveis à formação de NO imediato, que são encontrados na interface entre os vórtices de gases gerados pela turbulência e a sua vizinhança.

Portanto a quantidade de NO emitida no processo de combustão vai depender da composição do combustível, do modo de operação (grau de turbulência), e do projeto do combustor e equipamento de combustão (tempo de residência, tipo de queimador).

Várias são as técnicas utilizadas para se reduzir a emissão de NO_x em combustores. Estas possuem vantagens, desvantagens e diferentes eficiências. Portanto, a aplicação de uma ou de outra vai depender de uma análise técnica-econômica do projeto a que se pretende aplicá-la. A Tabela 2, baseada em Wood (1994) e Ruth (1998), mostra algumas das principais técnicas de redução de NO_x utilizadas atualmente, e várias características de cada uma delas.

1.2.6. Decomposição térmica da amônia

Pfefferle & Churchill (1986) confirmaram a hipótese de DeSoete[#] (1973,1975) e Haynes[#](1977) de que se a amônia for injetada na região de chama, seu comportamento é semelhante ao da maioria dos compostos nitrogenados contidos nos combustíveis, que são convertidos para HCN e CN

[#] DeSoete (1973,1975) e Haynes (1977) são citados por Pfefferle e Churchill (1986). Referências:

- DeSoete, G.G., An Overall Mechanism of Nitric Oxide Formation from Amônia and Amines Added to Pre-mixed Hydrocarbon Flames, *Combustion Institute European Symposium*, Academic Press, p. 439, 1973.

- DeSoete, G.G., Overall Reaction Rates of NO and N₂ Formation from Fuel Nitrogen, *Fifteenth Symposium (Int.) on Combustion*, The Combustion Institute, p. 1093, 1975.

- Haynes, B.S., The Oxidation of Hydrogen Cyanide in Fuel-Rich Flames, *Combustion and Flame*, vol 28, p. 113, 1977.

na frente de chama, sendo em seguida convertidos para espécies NH_i antes da oxidação, explicando porque a taxa de conversão de amônia (NH_3) para NO é aproximadamente a mesma das outras espécies nitrogenadas como dimetilamina e piperidina.

Lacava (2000) também afirma que a amônia quando injetada na região de chama, onde a temperatura é mais alta, favorece a formação de NO. Entretanto, Tal autor também relata, que tal gás também é utilizado como redutor de NO em combustores, já que se injetado na zona de pós-chama, onde as temperaturas são mais baixas, há uma predominância de redução do NO para N_2 . Na Tabela 2, pode-se ver algumas características das técnicas de redução de emissão de NO_x através da amônia.

A injeção de amônia visando a redução de NO em um combustor, envolve além de um alto custo de manutenção e investimento, uma outra questão importante que é a amônia residual. Cho (1994) afirma que o excesso de amônia quando emitido à atmosfera é ambientalmente nocivo. Tal autor cita que a concentração da amônia residual nos gases a serem emitidos deve ser de no máximo 10 (ppm). Então, para uma determinada vazão mássica de amônia injetada em um determinado ponto a jusante da região de chama no combustor, é importante se conhecer quais as concentrações de NO e amônia residual geradas nos gases que serão emitidos à atmosfera.

Miller & Bowman (1989) discutem os mecanismos de decomposição térmica da amônia e, conseqüentemente, a geração térmica de NO e N_2 a partir de tal gás. Segundo tais autores, os radicais NH_i ($i= 1$ e 2) dependendo das condições estequiométricas e de temperatura favorecerão a formação de NO ou N_2 . A Figura 3 mostra um esquema sumarizado da decomposição térmica de NH_3 apresentado por Bian et al. (1986).

As equações de (8) a (15) citadas por Miller & Bowman (1989), mostram a formação de NO a partir da injeção de amônia na zona de estabilização de chama. Por outro lado, no mesmo artigo é citado que a conversão $NO \rightarrow N_2$ sucede-se através da equação (16), ou do conjunto de

equações compreendido entre a (17) e a (19), que representa o mecanismo $\text{NH}_2 \rightarrow \text{NH} \rightarrow \text{N}_2$, ou ainda pelas reações mostradas pelas equações (20) e (21), as quais representam a conversão $\text{NH} \rightarrow \text{N}_2\text{O} \rightarrow \text{N}_2$.

TABELA 2- Técnicas de redução de NO_x em combustores.

Técnica	Descrição	Aplicabilidade	Desvantagens	Eficiência
Baixo excesso de ar	Reduz a disponibilidade de oxigênio	Todos combustíveis	Alta emissão de CO; afeta a estabilidade da chama	1-15%
Ar estagiado	O ar requerido para a combustão é adicionado em estágios	Todos combustíveis	Comprimento de chama; queda de pressão do queimador	30-60%
Rebuning	Combustível é adicionado acima da zona principal de combustão	Todos os combustíveis	Alto custo	15-85%
Injeção de água	Injeta-se água na chama	Gases e combustíveis pouco nitrogenados	Afeta a estabilidade da chama; perda de eficiência	40-70%
Redução por seleção catalítica (SCR)	Catalisador localizado no fluxo de combustível gasoso (a jusante) que promove a reação de NH_3 com NO_x	Combustíveis gasosos, e baixo combustíveis líquidos e sólidos com baixa quantidade de enxofre	Custo muito alto; requer espaço; NH_3 residual; geração de resíduos perigosos	70-90%
Redução por seleção não catalítica (SNCR)	Injeção de NH_3 dentro da fornalha para reagir com NO_x para formar nitrogênio e água	Todos os combustíveis	Custo alto; NH_3 residual	25-50%

modelo é reproduzir a formação dos gases O_2 , CO_2 , CO e NO , gerados no processo de combustão, provenientes da decomposição térmica dos reagentes injetados no incinerador.

Tal modelo consta de uma ferramenta principal, um pacote computacional comercial aplicado a problemas de cinética química, denominado CHEMKIN - versão III. Fez-se uso da licença de utilização dessa versão do CHEMKIN pertencente ao Laboratório de Combustão e Propulsão do INPE em Cachoeira Paulista - SP.

O desenvolvimento do modelo foi feito através das simulações de dois experimentos realizados no incinerador do INPE, e apresentados por Lacava (2000), de forma que os resultados obtidos através das simulações foram comparados com as medidas tomadas nos experimentos.

É intuito ainda deste trabalho, simular casos, a partir de um dos experimentos apresentados por Lacava (2000), supondo-se um combustível nitrogenado. Para tal pretende-se considerar diferentes traços de amônia (NH_3) no combustível utilizado pelo autor.

Além disso, deseja-se, para o caso que apresentar maior formação de NO dentre os relatados no parágrafo anterior, simular a injeção de amônia em um determinado ponto na zona de pós-chama, e a partir dos resultados, determinar-se qual a vazão mássica de amônia deve ser injetada, de modo que esta minimize a emissão de NO , gerando uma quantidade de amônia residual aceitável.

CAPÍTULO 2 - O PACOTE COMPUTACIONAL CHEMKIN

2.1 Aspectos gerais

O CHEMKIN é uma coletânea de programas computacionais e subrotinas, desenvolvido para resolver complexos problemas de cinética química de gases. Exemplos de áreas onde o software tem sido aplicado com sucesso inclui combustão, catálise, deposição química de vapor, e em problemas de plasma. (Kee et al., 1996).

Para se estudar um determinado problema através do CHEMKIN é fundamental que, primeiramente, tenha-se um mecanismo de reações que possa representar quimicamente o fenômeno a ser estudado, de preferência já validado por outros experimentos. Além disso, tal fenômeno deve ser cabível às limitações de algum dos modelos de simulações de reações de fluxo existentes no CHEMKIN, que acoplado ao mecanismo de reações possa representar o fenômeno físico-químico desejado.

Segundo a Reaction Design (2001a), a empresa que comercializa o pacote computacional, no que se refere à combustão, o CHEMKIN tem sido aplicado principalmente na solução dos seguintes problemas:

- redução nas emissões de NO_x e outros poluentes;
- prognóstico do desempenho de compressão e ignição de motores;
- otimização da quantidade de fluxo, e outros parâmetros no projeto de queimadores;
- determinação da temperatura de auto-ignição em misturas gasosas; e
- determinação da temperatura e da velocidade de chama em estudos de flamibilidade.

2.2 O CHEMKIN aplicado à formação de NO_x no processo de incineração

Em um incinerador há uma competição entre as reações que convertem os reagentes em pequenas espécies e as reações que geram produtos constituídos de moléculas grandes, os quais são representados pela fuligem, por exemplo. A complexidade existente no estudo da cinética química de um processo de incineração é enorme. Exner (1982) afirma que somente através de processos elementares é que se pode chegar a um modelo, que seja transferível para todos os sistemas e condições. Um processo de combustão retratado por reações elementares requer um número enorme de reações, sendo que o mesmo pode ser simplificado se as reações principais para o próprio forem conhecidas. A Figura 4 mostra através de um esquema a desintegração de uma molécula poliatômica sob as condições de um incinerador.

Como o pacote computacional CHEMKIN trabalha aplicando um mecanismo de reações elementares em modelos, a sua aplicação em incineração é viável

Existem, hoje, mecanismos cinéticos completos formados por reações elementares que retratam a formação de NO_x durante a combustão de pequenos hidrocarbonetos (Gardiner et al., 2000; Konnov, 1998). Tais mecanismos acoplados ao CHEMKIN têm possibilitado estudos sobre a formação de NO_x em chamas (Xu et al., 1998), fornalhas (Ehrhardt et al., 1998) e incineradores.

Muitas investigações utilizando o CHEMKIN têm sido realizadas sobre a geração de NO_x na incineração de resíduos. A técnica de injeção de ar estagiado, aplicada na redução de formação de gases NO_x foi estudada através do CHEMKIN e relatada por Mao & Barat (1996). Simulações de incineradores com a injeção de resíduos líquidos nitrogenados através do pacote computacional CHEMKIN foram divulgadas por Mao et al. (1994),

onde um incinerador vertical em escala laboratorial de chama pré-misturada foi simulado, e por Linak & Wendt (1996), que simularam um incinerador horizontal de chama com rotação, com intuito de estudar as interações entre NO e Cl, quando resíduos nitrogenados e clorados são incinerados.

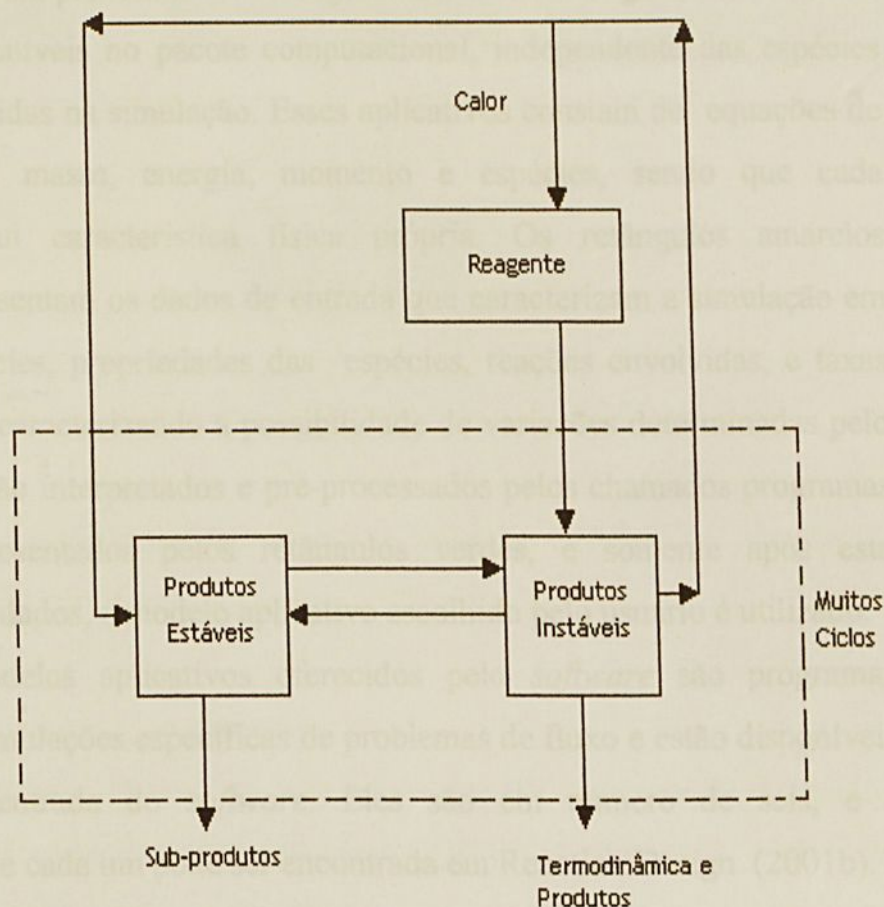


FIGURA 4- Esquema do mecanismo de desintegração de uma molécula poliatômica sob as condições do incinerador (Exner,1982).

Então com base nesses trabalhos, procurou-se desenvolver um modelo para um incinerador vertical de resíduos aquosos de chama com rotação, com intuito de simular um combustível nitrogenado.

2.3. Estrutura operacional do CHEMKIN

No CHEMKIN, cada programa computacional ou subrotina exerce uma determinada função, desde os dados de entrada até o resultado final.

A Figura 5 esquematiza a forma que o pacote computacional trabalha na simulação de um problema. Os retângulos azuis são referentes aos modelos aplicativos disponíveis no pacote computacional, independente das espécies químicas envolvidas na simulação. Esses aplicativos constam de equações de conservação de massa, energia, momento e espécies, sendo que cada aplicativo possui característica física própria. Os retângulos amarelos superiores representam os dados de entrada que caracterizam a simulação em relação as espécies, propriedades das espécies, reações envolvidas, e taxas dessas reações, caracterizando a possibilidade de variações determinadas pelo usuário. Estes são interpretados e pré-processados pelos chamados programas utilitários, representados pelos retângulos verdes, e somente após esta compilação dos dados, o modelo aplicativo escolhido pelo usuário é utilizado.

Os modelos aplicativos oferecidos pelo *software* são programas destinados a simulações específicas de problemas de fluxo e estão disponíveis no menu de entrada do *software*. Eles são em número de seis, e a aplicabilidade de cada um pode ser encontrada em Reaction Design (2001b).

Os arquivos de entrada de vetores termodinâmicos e de transporte contêm dados específicos às espécies que compõem o mecanismo de reações. No caso dos mecanismos cinéticos formados por reações elementares que retratam a combustão de pequenos hidrocarbonetos (Gardiner et al., 2000; e Konnov, 1998), mecanismos já citados neste trabalho, eles estão disponíveis de acordo com a sintaxe correta que o *software* exige. Os dados exigidos e a sintaxe referente ao arquivo de vetores termodinâmicos são encontrados em *Manual Thermodynamic database* (2000), e a referente ao arquivo de dados de transporte esta em *Manual transport* (2000).

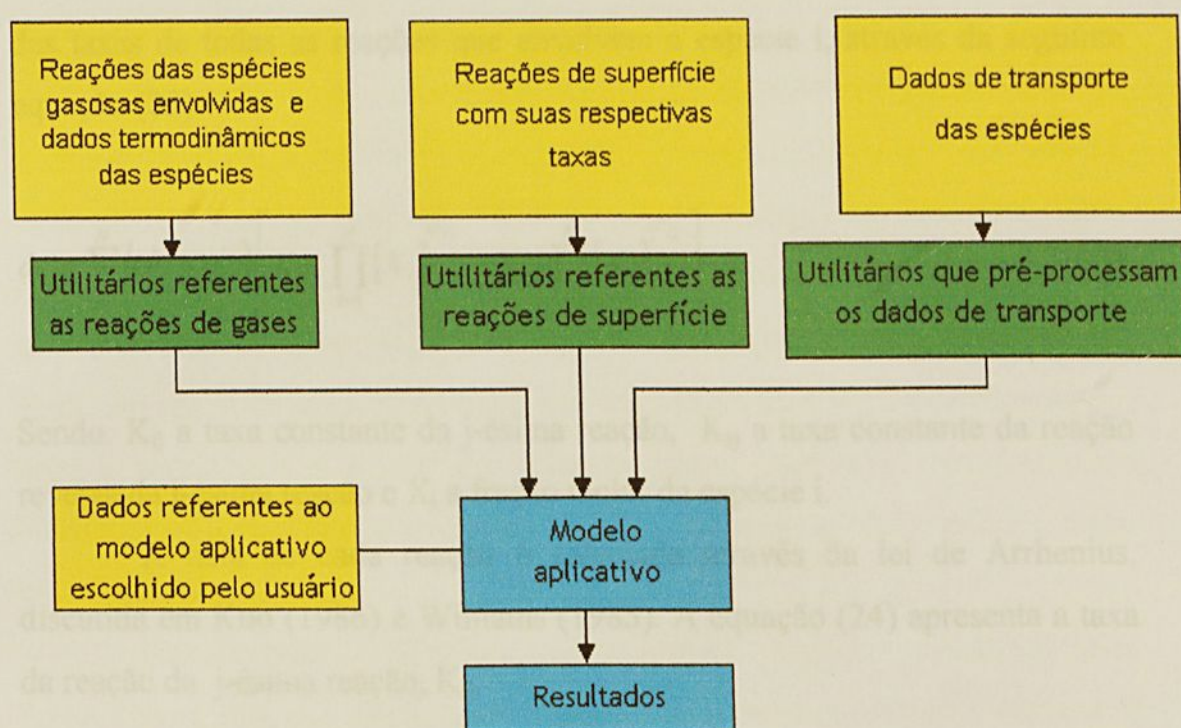
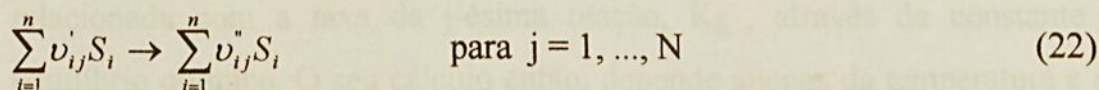


FIGURA 5- Esquema mostrando como o software CHEMKIN- Versão III trabalha (Reaction Design , 2001c).

2.3.1. O mecanismo de reações

O mecanismo de reações deve ser escrito por um grupo N de reações elementares, segundo a sintaxe exigida pelo CHEMKIN (Kee et al., 1996), sob a forma demonstrada pela equação (22).



Sendo: n o número de espécies, S_i o símbolo da i -ésima espécie, ν'_{ij} o coeficiente estequiométrico da i -ésima espécie reagente da j -ésima reação e ν''_{ij} o coeficiente estequiométrico da i -ésima espécie entre os produtos da j -ésima reação.

A taxa de produção final da i -ésima espécie, $\dot{\omega}_i$, é calculada através das taxas de todas as reações que envolvem a espécie i , através da seguinte equação (23).

$$\dot{\omega}_i = \sum_{j=1}^N (v_{ij}'' - v_{ij}') \left[K_{fj} \prod_{i=1}^N [X_i]^{v_{ij}'} - K_{rj} \prod_{i=1}^N [X_i]^{v_{ij}''} \right] \quad (23)$$

Sendo: K_{fj} a taxa constante da j -ésima reação, K_{rj} a taxa constante da reação reversa da j -ésima reação e X_i a fração molar da espécie i .

A taxa de cada reação é calculada através da lei de Arrhenius, discutida em Kuo (1986) e Williams (1985). A equação (24) apresenta a taxa da reação da j -ésima reação, K_{fj} .

$$K_{fj} = A_j T^{B_j} \cdot \exp\left(-\frac{E_{A_j}}{\bar{R} \cdot T}\right) \quad (24)$$

Sendo: T a temperatura, E_{A_j} a energia de ativação da j -ésima equação, \bar{R} a constante universal dos gases perfeitos e, A_j e B_j constantes da j -ésima reação. No mecanismo de reações E_{A_j} , A_j e B_j devem ser fornecidos para cada reação na sintaxe correta.

A taxa constante da reação reversa da j -ésima reação, K_{rj} , é relacionada com a taxa da j -ésima reação, K_{fj} , através da constante de equilíbrio químico. O seu cálculo então, depende apenas da temperatura e das propriedades termodinâmicas das espécies, sendo efetuado através de transformações da função de Gibbs (Kee et al., 1996).

2.4. Os modelos aplicativos utilizados neste trabalho

O modelo de simulação formulado parte da premissa que o tempo de residência dos reagentes em uma câmara de combustão, pode ser dividido em duas partes: uma parte em um reator de mistura perfeita em série com outra parte em um reator *plug flow*. A zona de estabilização de chama onde, devido à intensa turbulência, os reagentes estão bastante misturados, foi modelada como um reator de mistura perfeita. Em contrapartida, a região de pós-chama, onde a turbulência é menor e a mistura gasosa regente é proveniente do mecanismo físico-químico ocorrido na região de chama, foi conferida a um reator *plug flow*.

Na literatura científica encontrou-se, vários trabalhos onde combustores foram modelados utilizando essa configuração. A Tabela 3 mostra trabalhos sobre tal configuração de reatores, e quais deles utilizaram o pacote computacional CHEMKIN.

TABELA 3- Trabalhos utilizados como referência bibliográfica.

Referência	Chama	Tipo de combustor	Chemkin
Mao et al. (1994)	Pré misturada	Incinerador de injeção líquida (laboratorial)	Sim
Beér (1996)	Chama difusiva com rotação	-----	Sim
Heap et al. (1972)	Chama difusiva com rotação	Fornalha	Não
Linak & Wendt (1996)	Chama difusiva com rotação	Incinerador de injeção líquida (laboratorial)	Sim
Beér & Lee (1965)	Chama difusiva com rotação	Fornalha	Não

Portanto, dentre os modelos aplicativos disponíveis no *software* foram utilizados aqueles que se enquadram no presente caso: o *Aurora*, que simula reatores de mistura perfeita, e o *Plug*, que simula reatores *plug flow*.

2.4.1. O modelo aplicativo *Aurora*

O modelo aplicativo *Aurora* permite a simulação de sistemas dinâmicos ou constantes em reatores de mistura perfeita. Para sistemas dinâmicos as variáveis devem ser especificadas em função do tempo. Em sistemas constantes o *Aurora* pode computar uma série de condições, variando um ou mais parâmetros, como perdas de calor ou pressão atmosférica entre as simulações. Reatores em série também podem ser simulados por esse modelo aplicativo.

Os reagentes são considerados perfeitamente misturados em todos os pontos do reator. Em outras palavras, isto quer dizer que o reator é limitado pela cinética química, ou seja, o processo de mistura dos reagentes não tem interferência na concentração final dos gases. No que diz respeito à especificação dos parâmetros, o fluxo de reagentes que entra no reator pode ser caracterizado pelo tempo de residência dos reagentes no reator, ou pelo seu próprio volume.

Nas simulações realizadas neste trabalho para a zona de estabilização de chama, utilizou-se como parâmetro de entrada o tempo de residência. Além do tempo de residência, foram utilizados em todos os casos simulados os seguintes dados: frações molares dos reagentes para a quantidade de massa injetada em 1,0 (s); pressão atmosférica na câmara e vazão mássica total dos reagentes. Nos casos em que a solução da equação da energia foi solicitada, a temperatura inicial, e a taxa de perda de calor também foram fornecidas. Nos casos simulados a uma temperatura fixa, forneceu-se a temperatura para a qual a solução do problema era desejada.

A utilização de uma ou outra opção é discutida no capítulo 3 deste trabalho. A Figura 6 mostra um esquema de simulação à temperatura fixa, e a Figura 7 mostra um esquema de simulação onde a temperatura é determinada pela equação da energia.

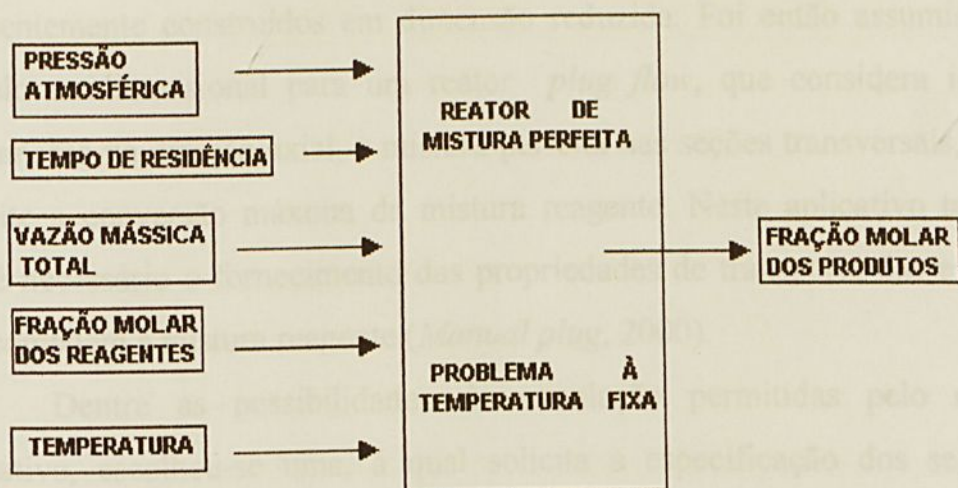


FIGURA 6- Esquema de uma simulação resolvida à temperatura fixa.

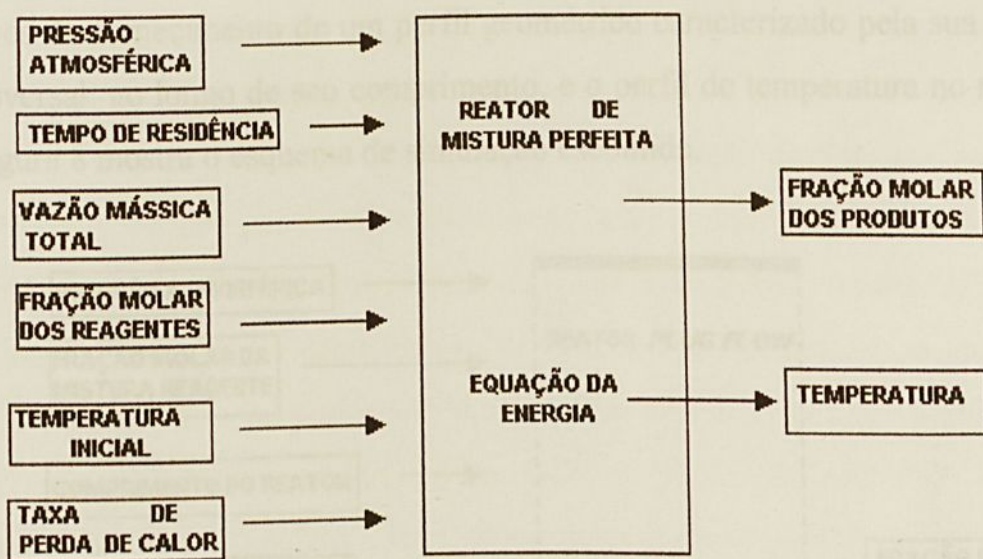


FIGURA 7- Esquema de uma simulação resolvida pela equação da energia.

2.4.2. O modelo aplicativo Plug

Tal programa foi utilizado para representar o escoamento de uma mistura de gás ideal reagindo quimicamente no interior de um duto cilíndrico. Geralmente equações genéricas para um escoamento reagindo quimicamente envolvem fenômenos de transporte, além de cinética e termodinâmica. Modelos rigorosos para reatores são necessariamente multidimensionais, entretanto, por razões práticas e matemáticas, modelos de reatores são

freqüentemente construídos em dimensão reduzida. Foi então assumido um modelo unidimensional para um reator *plug flow*, que considera ideal o escoamento na direção axial, e mistura perfeita nas seções transversais, o que permite a conversão máxima da mistura reagente. Neste aplicativo também não é necessário o fornecimento das propriedades de transporte das espécies que compõem a mistura reagente (*Manual plug*, 2000).

Dentre as possibilidades de simulação permitidas pelo modelo aplicativo, escolheu-se uma, a qual solicita a especificação dos seguintes parâmetros: o comprimento do reator, a pressão atmosférica local, a fração molar das espécies que compõem a mistura reagente, a viscosidade absoluta de entrada, a velocidade de entrada da mistura reagente, a geometria do reator através do fornecimento de um perfil geométrico caracterizado pela sua seção transversal ao longo de seu comprimento, e o perfil de temperatura no reator. A Figura 8 mostra o esquema de simulação escolhida.

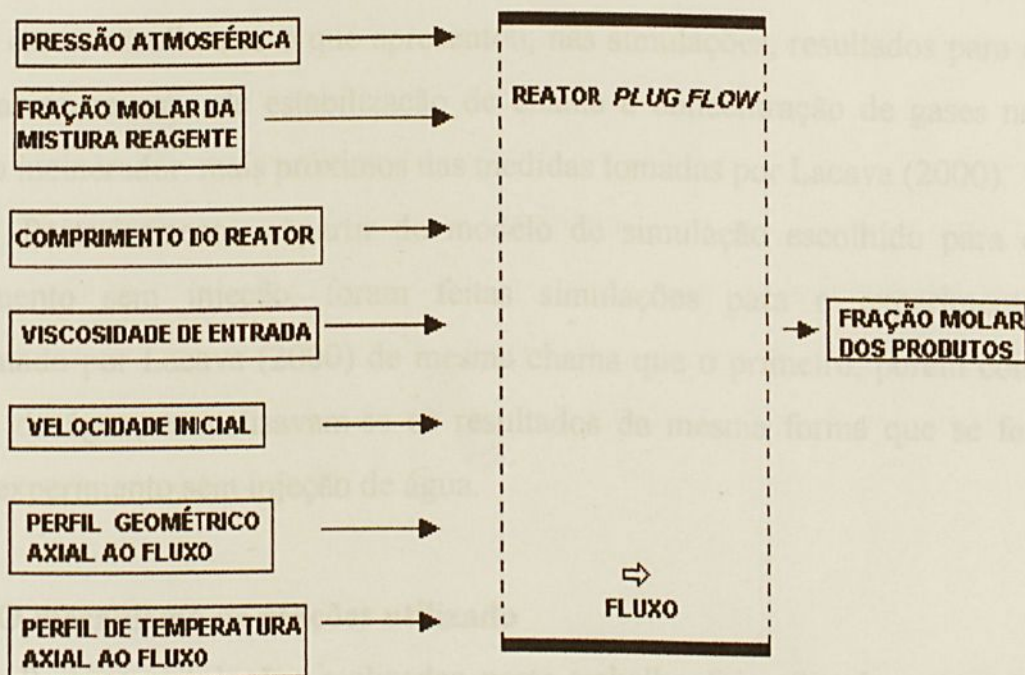


FIGURA 8- Esquema de simulação escolhido para a zona de pós-chama.

CAPÍTULO 3 - O DESENVOLVIMENTO DA MODELAGEM

3.1. Definição dos parâmetros

3.1.1. Descrição das simulações iniciais

Em todas os procedimentos apresentados neste capítulo buscou-se a coerência dos dados experimentais medidos por Lacava (2000), criando-se elementos para a construção de um modelo cinético para simular a incineração de resíduo aquoso nitrogenado.

Inicialmente, simulou-se através do CHEMKIN o experimento realizado por Lacava (2000), o qual utilizou uma chama difusiva de GLP (Gás Liquefeito de Petróleo) e ar, com rotação, sem a injeção de qualquer resíduo. Foram selecionados para tal experimento alguns modelos de simulação. Dentre esses, escolheu-se o que apresentou, nas simulações, resultados para a temperatura na zona de estabilização de chama e concentração de gases no final do incinerador mais próximos das medidas tomadas por Lacava (2000).

Posteriormente, a partir do modelo de simulação escolhido para o experimento sem injeção, foram feitas simulações para o experimento apresentado por Lacava (2000) de mesma chama que o primeiro, porém com injeção de água, e analisavam-se os resultados da mesma forma que se fez para o experimento sem injeção de água.

3.1.2. O mecanismo de reações utilizado

Para as simulações realizadas neste trabalho foi utilizada a “versão 0.4” do mecanismo de reações desenvolvido por Konnov (1998).

O mecanismo de reações *Konnov versão 0.4* possui 1027 reações e 121 espécies, e foi modelado para prognosticar problemas de combustão envolvendo hidrocarbonetos contendo até três carbonos, sendo validado pelo

autor em diversas condições de escoamento. O mesmo também foi construído para se realizar investigações sobre a formação de NO_x em chamas.

No *Konnov versão 0.4* são encontradas as reações referentes a formação de *NO térmico* (equações (1), (2) e (3)), assim como as reações representadas pelas equações (5), (6) e (7), que são extremamente importantes no mecanismo de formação do *NO imediato*. Além disso, todas as equações citadas no item 1.2.6., referentes à decomposição térmica da amônia, são contempladas no mesmo (equações entre a (8) e a (21)).

O GLP, combustível utilizado nos experimentos apresentados em Lacava (2000), é uma mistura de hidrocarbonetos que variam de um a cinco carbonos em sua cadeia carbônica, sendo que os principais formadores do GLP são cadeias carbônicas de 3 e 4 carbonos. A Tabela 4 mostra as composições do GLP real e normalizada, na qual as espécies não identificadas são desprezadas. Portanto, procurou-se escolher um mecanismo de combustão que envolvesse o maior número de espécies possíveis formadoras do GLP, e que fosse validado, pois não existe na literatura um mecanismo específico de reações para a decomposição térmica do GLP.

As espécies constituintes do GLP existentes no mecanismo de reações adotado são: metano, propino, propeno, propano, 1-buteno, cis-2-buteno. As espécies isobutano, n-butano, isopentano e n-pentano foram aproximadas para uma mistura gasosa de eteno mais hidrogênio, sugerida por Turns (1998), representada na equação (25). As espécies eteno e hidrogênio fazem parte do mecanismo de reações adotado.



A espécie isobuteno não é contemplada no mecanismo adotado, e foi considerada como cis-2-buteno, não somente por apresentarem a mesma fórmula molecular, mas principalmente por possuírem valores de poder

calorífico inferior (PCI) não distantes entre si. O PCI do isobuteno é 604,056 (kcal/mol) e o PCI do cis-2-buteno é 606,037 (kcal/mol). Ambas espécies estão em baixíssimas concentrações na mistura gasosa que corresponde ao GLP, portanto tal consideração não acarretará alterações significativas no resultado final. A Tabela 5 mostra o valor do PCI de todas as espécies envolvidas em cálculo neste trabalho (Perry & Chilton, 1980), e o PCI do GLP (IBP,1986).

TABELA 4- Composições real e normalizada do GLP em base mássica (Ferreira,1997).

Espécie gasosa	Composição real (% massa)	Composição normalizada (% de massa)	Massa molecular (g/gmol)
Metano	0,25	0,25	16,04
Propino	4,06	4,09	40,06
Propeno	26,65	26,82	42,08
Propano	23,29	23,44	44,10
1-buteno	0,01	0,01	56,11
Isobuteno	2,57	2,59	56,11
Cis-2-buteno	8,82	8,88	56,11
Isobutano	14,03	14,12	58,12
n-butano	9,33	9,39	58,12
Isopentano	10,10	10,17	72,15
n-pentano	0,24	0,24	72,15
Não identificados	0,65	-	-
Mistura			49,02

É importante ressaltar que a equação (25) leva em conta somente o princípio da conservação da massa. Entretanto, nas simulações envolvendo o GLP, foram considerados os princípios da conservação da massa e o da conservação da energia, este último, feito através de um balanço energético das espécies aproximadas pela equação (25). A diferença foi considerada, no software *Aurora*, como a taxa de calor perdido, em (cal/s).

Testou-se também o efeito da aproximação realizada pela equação (25) no software *Aurora* do pacote computacional CHEMKIN, utilizado para

simular reatores de mistura perfeita, considerando-se duas chamas: uma de metano e ar e outra de propano e ar. As características das chamas estão dispostas na Tabela 6. A Tabela 7 apresenta a aproximação dos combustíveis como sendo eteno e hidrogênio. A Tabela 8 apresenta o balanço energético entre o caso real e caso aproximado. O mecanismo utilizado foi o *Konnov versão 0.4*, a pressão atmosférica foi considerada 1,0 (atm), e o tempo de residência foi considerado 5×10^{-3} (s).

TABELA 5- Valor do PCI para todas as espécies envolvidas em cálculo neste trabalho.

Espécie Gasosa	PCI (Kcal/ mol)	Fonte
Metano	191,759	Perry&Chilton (1980)
Propano	488,527	
1-buteno	607,679	
Isobuteno	604,056	
Cis-2-buteno	606,037	
Isobutano	633,744	
n-butano	635,384	
Isopentano	780,120	
n-pentano	782,040	
Eteno	316,195	
Hidrogênio	57,798	
GLP	540,445	IBP (1986)

TABELA 6- Características das chamas simuladas com intuito de se avaliar a aplicação da equação 25.

Chama	Vazão de combustível (g/s)	Vazão de ar (g/s)	Excesso de ar (%)
Metano e ar	2	40	16,89
Propano e ar	2	40	28,53

TABELA 7- Transformação dos combustíveis das chamas simuladas à eteno e hidrogênio aplicando-se a equação 25.

Chama	Caso Real	Caso aproximado
	Vazão de combustível (mol/s)	Vazão de combustível (mol/s)
Metano e ar	0,1247 CH ₄	0,0624 C ₂ H ₄ + 0,1247 H ₂
Propano e ar	0,0454 C ₃ H ₈	0,0680 C ₂ H ₄ + 0,0454 H ₂

TABELA 8- Balanço de energia entre os casos real e aproximado para as chamas simuladas, considerando n o número de mols.

Chama	Caso Real	Caso aproximado	Diferença (kcal)
	n.PCI (kcal)	n. PCI (kcal)	
Metano e ar	23,91	26,92	3,01 (12,59%)
Propano e ar	22,18	24,15	1,97 (8,16%)

A Tabela 9 compara as concentrações finais de O₂, CO₂, CO e NO, em base úmida, e as temperaturas obtidas entre o caso real e o caso aproximado pela equação (25), para ambas as chamas.

Praticamente não houve diferença entre as concentrações de O₂ e CO₂ entre os casos real e aproximado para a chama de metano e ar, porém a concentração de NO apresentou discrepância de 19,92% e a concentração de CO apresentou discrepância de 14,30%. Tal valor, deve-se a diferença de temperatura obtida para a convergência, a qual foi de 1,32%, já que o NO é extremamente sensível à temperatura e a concentração de CO é extremamente pequena. As discrepâncias apresentadas para a chama de metano e ar, são pouco relevantes se tal procedimento for aplicado na simulação de uma chama de GLP, pois o metano representa, em massa, 0,25% da constituição deste.

Para a chama de propano e ar com relação às concentrações de O₂, N₂, CO e CO₂ não houve diferença entre os casos real e aproximado. O NO apresentou diferença de 2,76%, considerada como um valor que viabiliza a

utilização do caso aproximado, pois o propano representa 23,29%, em massa, da constituição do GLP.

O fato da hipótese de transformação para eteno e hidrogênio funcionar melhor para o propano que para o metano deve-se, talvez, ao fato do metano não ser um hidrocarboneto tão forte como o propano. Turns (1998) mostra que realmente em um processo de combustão boa parte do C_3H_8 se quebra em C_2H_4 e H_2 .

Em ambos experimentos realizados por Lacava (2000), simulados neste trabalho, o oxidante provem do ar injetado na câmara de combustão. O ar é composto basicamente por nitrogênio e oxigênio, e ambas são espécies existentes no mecanismo. A composição do ar, em base volumétrica, considerada nas simulações realizadas, está demonstrada na Tabela 10.

TABELA 9- Concentrações de O_2 , CO_2 , N_2 , CO e NO para os casos real e aproximado (*software Aurora*), em base úmida, simulando-se um reator de mistura perfeita para ambas as chamas.

Chama de metano e ar						
Casos	T (K)	[O_2] (%)	[CO_2] (%)	[N_2] (%)	[CO] (%)	[NO] (ppm)
Real	1968	3,20	7,25	71,74	0,91	95,56
Aproximado	1942	3,29	7,10	71,70	1,04	114,60
Discrepância (%)	1,32	(-) 2,81	2,07	0,06	(-) 14,29	(-) 19,92

Chama de propano e ar						
Casos	T (K)	[O_2] (%)	[CO_2] (%)	[N_2] (%)	[CO] (%)	[NO] (ppm)
Real	1900	4,67	8,23	73,44	0,90	81,97
Aproximado	1901	4,65	8,22	73,41	0,90	84,23
Discrepância (%)	0	0,43	0,12	0,04	0	(-) 2,76

TABELA 10- Composição do ar em base volumétrica (Perry & Chilton, 1980).

Espécie	Composição real (% de volume)	Composição adotada (% de volume)
N_2	$78,084 \pm 0,004$	79
O_2	$20,946 \pm 0,002$	21
CO_2	$0,033 \pm 0,001$	0
Ar	$0,934 \pm 0,001$	0

3.1.3. A zona de estabilização de chama

3.1.3.1. O comprimento axial de chama

Para todas as simulações realizadas neste trabalho, a fim de definir o tamanho da zona de estabilização de chama, e conseqüentemente da zona de pós-chama, arbitrou-se uma variável x . Assim, tal variável corresponde à distância entre a base do incinerador vertical até uma altura x , arbitrada de acordo com o perfil de temperatura medido por Lacava (2000) para cada ensaio simulado. A Figura 9 mostra o comprimento axial da zona de chama em uma câmara de combustão vertical, e conseqüentemente o comprimento axial da zona de pós-chama.

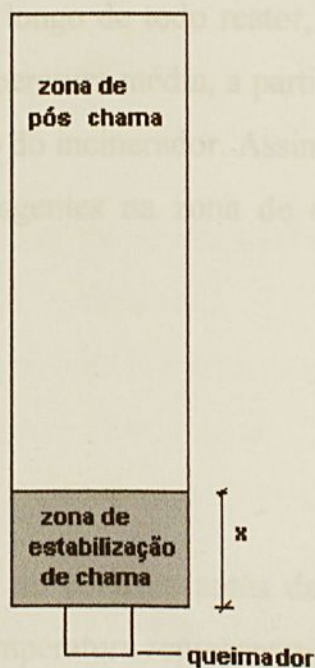


FIGURA 9- O comprimento axial da zona de chama em uma fornalha vertical.

3.1.3.2. O tempo de residência médio dos reagentes

O tempo de residência médio dos reagentes na zona de estabilização de chama foi calculado a partir da equação indicada por Carvalho & Gotaç

(1993) para o tempo de residência dos gases em um incinerador de resíduos aquosos apresentada pela equação (26).

$$t_R = \frac{V \cdot P \cdot M}{\bar{R} \cdot T \cdot \dot{m}_t} \quad (26)$$

Sendo: V o volume do incinerador, P a pressão atmosférica, M a massa molecular média da mistura gasosa de combustão levando-se em conta a reação de combustão teórica, T a temperatura, e \dot{m}_t a vazão mássica total dos reagentes.

Como tal equação envolve temperatura, dividiu-se o incinerador em n volumes de controle. Adotou-se tal procedimento, devido ao fato de não se ter temperatura uniforme ao longo de todo reator, e determinou-se para cada volume de controle uma temperatura média, a partir das temperaturas medidas por Lacava (2000) no centro do incinerador. Assim, pode-se calcular o tempo de residência médio dos reagentes na zona de estabilização de chama, t_x , através da equação (27).

$$t_x = \sum_1^k \frac{V_i \cdot P \cdot M}{\bar{R} \cdot T_i \cdot \dot{m}_t} \quad (27)$$

Sendo: K, o último volume de controle antes da zona de pós-chama, V_i o volume de controle i e T_i a temperatura representativa do volume de controle i.

Aplicando-se a equação (27) entre os volumes de controle K+1 e n calculou-se o tempo de residência na zona de pós-chama, t_{plug} . A soma entre t_x e t_{plug} corresponde ao tempo de residência total dos gases nos incinerador.

3.1.3.3. A taxa de calor perdido

A taxa de calor perdido na zona de estabilização de chama foi calculada segundo sugestão apresentada em Lacava et al. (1999) e Carvalho & Gotaç (1993), levando-se em conta a diferença energética causada pela aproximação das espécies gasosas constituintes do GLP a eteno e hidrogênio e a aproximação de isobuteno a cis-2-buteno, \dot{p}_{GLP} , não contempladas no mecanismo *Konnov versão 0.4*. Com base nessas referências, a taxa de perda de calor \dot{Q}_p , em (cal/s), para as simulações do experimento sem injeção de água, foi calculada, através da equação (28), considerando como gases de combustão as espécies CO_2 , O_2 , H_2O e N_2 . A eficiência do incinerador foi considerada 100 %.

$$\dot{Q}_p = \left(n_{comb} \cdot PCI_{comb} - \sum_{j=1}^n n_j \cdot \int_{TI}^{TF} C_{p,j} \cdot dT \right) - \dot{p}_{GLP} \quad (28)$$

Sendo: n_{comb} o número de moles de combustível injetado em 1 (s); PCI_{comb} o poder calorífico inferior do combustível; TI a temperatura inicial dos reagentes; TF a temperatura medida em x; n_j o número de moles do gás de combustão j, determinado através do balanço de massa dos reagentes injetados em 1,0 (s) de escoamento; $C_{p,j}$ o calor específico do gás de combustão j como uma função da temperatura. As equações para determinação dos $C_{p,j}$ foram adotadas segundo as sugeridas por Perry & Chilton (1980).

Para o experimento apresentado em Lacava (2000), em que há injeção de água simulando um resíduo, a taxa de perda de calor, \dot{Q}_p , foi calculada através da equação (29).

$$\dot{Q}_p = n_{comb} \cdot PCI_{comb} - \left(\sum_{j=1}^n n_j \cdot \int_{TI}^{TF} C_{p,j} \cdot dT + n_{res} \cdot h_L \right) - \dot{p}_{GLP} \quad (29)$$

Sendo: o primeiro termo do segundo membro semelhante ao segundo membro da equação (28), levando-se em conta o calor absorvido pela água injetada; e o segundo termo do segundo membro representa a quantidade de calor absorvida pela vaporização da água, onde n_{res} corresponde ao número de moles de resíduo injetada, e h_L o calor latente de vaporização do resíduo a 25 °C (Perry & Chilton, 1980).

3.1.4. A zona de pós-chama

A zona de pós-chama, simulada através de um único reator *plug flow* pelo aplicativo **Plug**, permite poucas variações de simulação. Os gases que formam a mistura reagente do reator são os produtos de saída do reator de mistura perfeita, ou seja, os gases de combustão que provém da zona de estabilização de chama. A geometria do reator é invariável, assim como, a vazão volumétrica dos gases de combustão na entrada, bem como a viscosidade absoluta e a pressão atmosférica. Portanto, as variações se deram através dos perfis axiais de temperatura, de acordo com as medidas disponíveis em cada experimento de Lacava (2000).

3.1.4.1. A interface entre o reator de mistura perfeita e o reator *plug flow*

Os gases que formam a mistura reagente no reator *plug flow* foram considerados como CO_2 , H_2O , O_2 , H_2 , CO , N_2 e NO . Isto porque a soma das concentrações destes gases, em qualquer uma das simulações realizadas para a zona de estabilização de chama, representaram mais de 99% da soma de toda a mistura gasosa resultante. O NO apesar de apresentar baixíssimas concentrações em relação aos demais componentes, é de interesse deste trabalho na saída da câmara de combustão.

A viscosidade absoluta da mistura gasosa reagente no reator *plug flow*, μ_m , formada pelos gases descritos no parágrafo anterior, foi calculada pela equação (30). Perry & Chilton (1980), afirmam que tal equação pode ser

usada com segurança para se calcular a viscosidade de uma mistura gasosa sob baixa pressão.

$$\mu_m = \frac{\sum X_i \cdot \mu_i \cdot (M_i)^{\frac{1}{2}}}{\sum X_i \cdot (M_i)^{\frac{1}{2}}} \quad (30)$$

Sendo: X_i a fração molar de cada componente i da mistura; M_i é a massa molecular de cada componente i da mistura; e μ_i é a viscosidade absoluta de cada componente i da mistura na temperatura de saída da zona de estabilização de chama.

Perry & Chilton (1980) indicam que a viscosidade de cada componente, μ_i , seja determinada por um diagrama apresentado na mesma obra que relaciona viscosidade com temperatura à pressão de 1,0 (atm). Porém, tal diagrama não abrange as altas temperaturas que os gases de combustão deixam a zona de estabilização de chama. Logo, utilizou-se a equação (31), de extrapolação, sugerida na mesma publicação, utilizando-se uma temperatura de referência (T_r), 373 K, escolhida aleatoriamente dentre as existentes em tal diagrama.

$$\mu_i = \left(\frac{T_x}{T_r} \right)^{3/2} \frac{(T_r + 1.47 \cdot T_{eb})}{(T_x + 1.47 \cdot T_{eb})} \cdot \mu_r \quad (31)$$

Sendo: μ_r é a viscosidade absoluta de cada componente i determinada em $T_r = 373$ (K), T_x é a temperatura da mistura e T_{eb} é a temperatura de ebulição de cada componente i . As grandezas μ_r e T_{eb} foram adotadas segundo Perry & Chilton (1980).

A vazão volumétrica de entrada da mistura no reator *plug flow*, Q_x , foi calculada considerando-se a mistura gasosa que sai do reator de mistura perfeita como um gás perfeito, assim como o *Aurora*. Então na temperatura,

T_x , que é a temperatura no final da zona de estabilização de chama e de entrada da zona de pós-chama, o volume específico da mistura gasosa, \mathcal{V}_m , foi calculado pela equação (32).

$$\mathcal{V}_m = \frac{\bar{R}.T_x}{M.P} \quad (32)$$

Sendo: \bar{R} a constante universal dos gases, T_x a temperatura na saída do reator de mistura perfeita, ou entrada do reator *plug flow*, M a massa molecular média da mistura gasosa considerada como reagente no reator *plug flow*, e P a pressão atmosférica.

Logo, multiplicando-se o volume específico na saída do reator de mistura perfeita, pela vazão mássica dos reagentes, \dot{m}_t , que é a mesma de entrada pela equação da continuidade, obteve-se a vazão volumétrica para a entrada da zona de pós-chama, \dot{q}_{plug} , mostrado pela equação (33).

$$\dot{q}_{plug} = \dot{m}_t \cdot \mathcal{V}_m \quad (33)$$

3.2. Simulações dos experimentos apresentados em Lacava (2000)

3.2.1. Descrição experimental

O incinerador de injeção líquida instalado no LCP/INPE, onde foram realizados os dois ensaios apresentados por Lacava (2000) estudados neste trabalho, tem volume de $1,0 \text{ (m}^3\text{)}$. Tal incinerador é constituído por uma única câmara de combustão, onde o resíduo é nebulizado e degradado termicamente em suspensão. O mesmo foi construído de forma modular com chapas de aço carbono revestidas internamente com uma parede $0,15 \text{ (m)}$ de espessura de

cimento 50% refratário e 50% isolante térmico. A Figura 10 mostra a foto do incinerador utilizado nos dois ensaios estudados nesta dissertação.

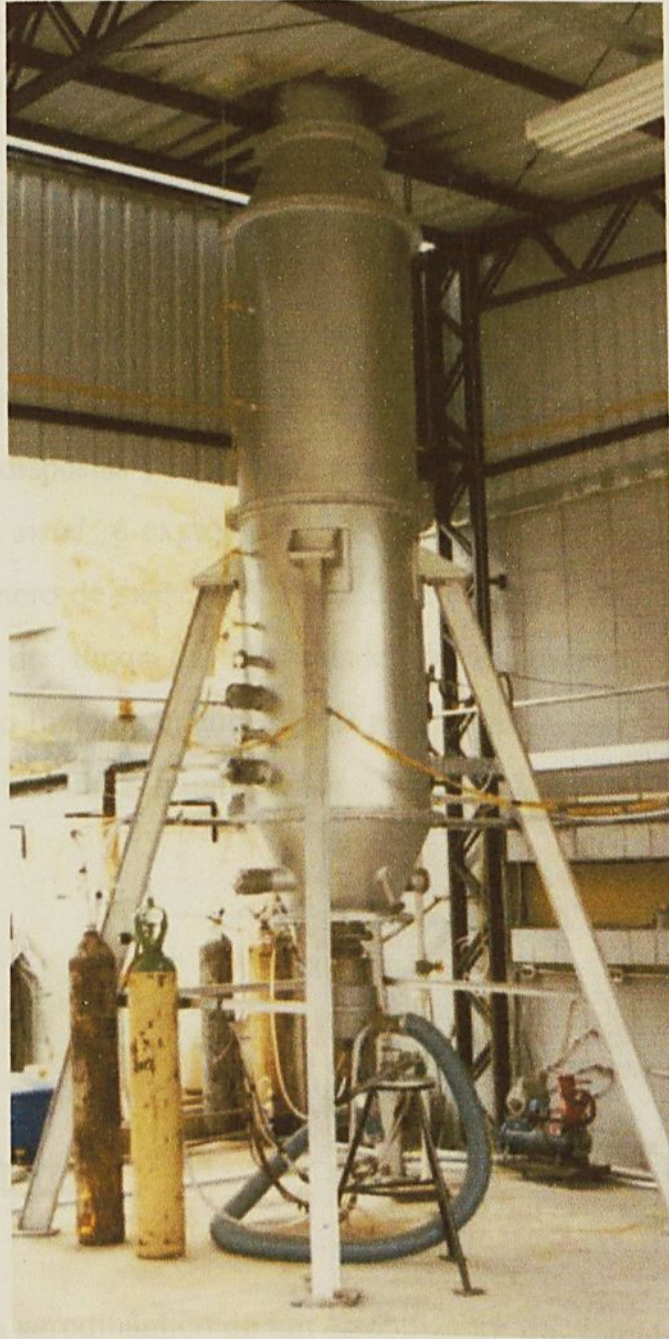


FIGURA 10- Foto do incinerador de injeção líquida instalado no LCP/INPE utilizado e construído por Lacava (2000).

No módulo cônico inferior foi acoplado um queimador constituído de um estabilizador de chama que gera rotação, denominado *swirl*, segundo a literatura inglesa. Tal estabilizador, além da função de “ancorar” a chama junto ao bico queimador gera uma zona de recirculação dos gases gerados na combustão a sua jusante. Esta zona de recirculação diminui o comprimento da chama e aumenta a eficiência de combustão, já que garante melhor mistura entre os reagentes, e conseqüentemente influencia na emissão de poluentes (Lilley, 1976). A Figura 11 mostra um esquema das linhas de fluxo geradas por um queimador constituído de um *swirl*.

Os queimadores com *swirl* constam de um orifício central por onde é injetado um jato turbulento de combustível, e de um anel que circunda o bico central onde estão dispostas pás inclinadas por onde passa o fluxo de ar. A intensidade de um *swirl* é expressa através de uma grandeza adimensional denominada de número de *swirl*, s . Tal grandeza corresponde à razão entre a componente axial do fluxo da quantidade de movimento angular e a componente axial do fluxo da quantidade de movimento linear. Lacava (2000) nos experimentos 1 e 2, utilizou um *swirl* de $s = 0,291$.

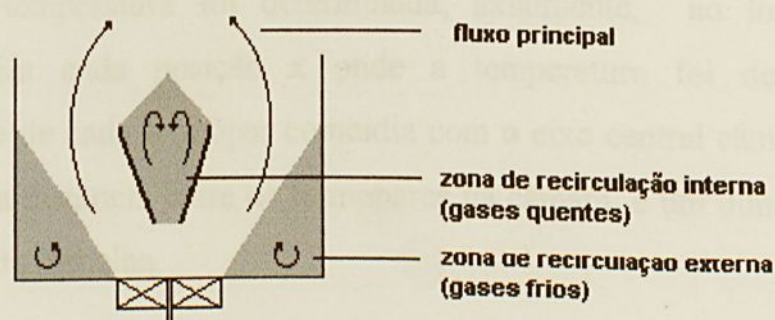


FIGURA 11- Efeito aerodinâmico de um estabilizador de chama tipo *swirl* em um queimador de furo central (Béer & Lee, 1965).

A Figura 12 mostra o queimador utilizado nos experimentos simulados neste trabalho, realizados por Lacava (2000). Em tal queimador, o bico central por onde foi injetado o GLP, possui um diâmetro de 4 (mm).

Em um queimador com *swirl*, quanto maior for o ângulo de inclinação das pás maior será a intensidade do vórtice gerado a jusante do queimador, o que resultará na zona de recirculação dos gases quentes.



FIGURA 12- Foto do queimador com o estabilizador de chama tipo *swirl* utilizado por Lacava (2000).

A temperatura foi determinada, axialmente, ao longo de toda fornalha. Em cada posição x onde a temperatura foi determinada, a extremidade de cada termopar coincidia com o eixo central câmara. A Figura 13, mostra a distância entre os termopares na câmara, e um dimensionamento sem escala da fornalha.

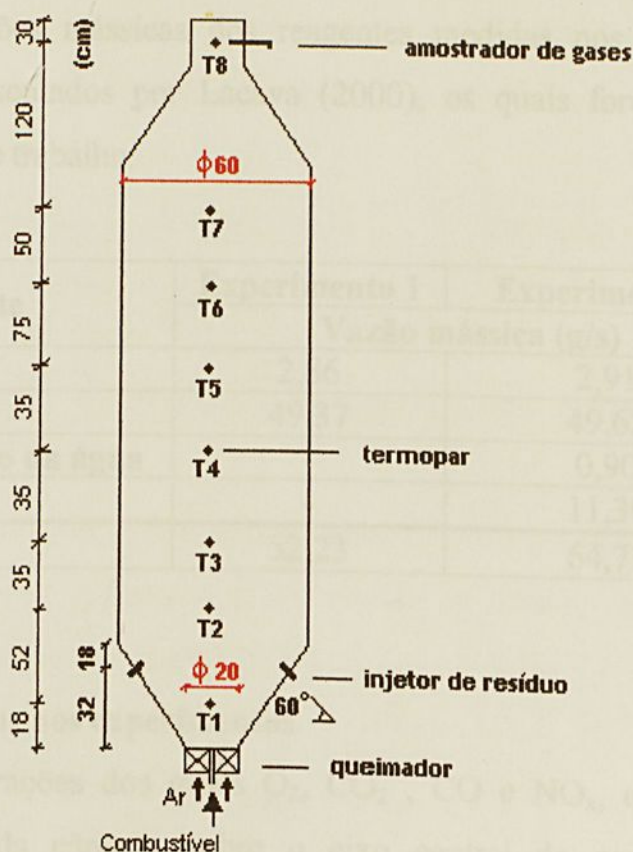


FIGURA 13- Posição dos termopares ao longo do incinerador de injeção líquida utilizado nos experimentos, e as dimensões do mesmo (Lacava, 2000).

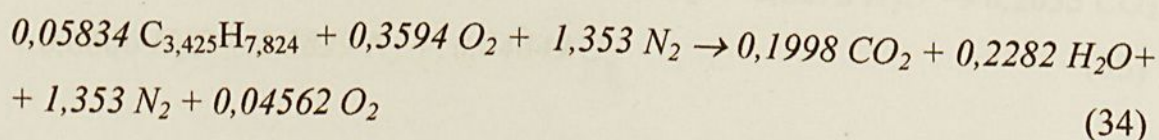
As concentrações dos gases medidas para os ensaios estudados neste trabalho, foram feitas apenas para a saída do incinerador, através de uma sonda a 30 (cm) abaixo da saída da câmara e sobre o eixo central da câmara de combustão. As medidas foram tomadas para O_2 , CO_2 , CO e NO , em base seca. Maiores detalhes sobre a montagem experimental podem ser obtidos em Lacava (2000). As vazões mássicas dos reagentes medidas nos experimentos apresentados por Lacava (2000), os quais foram simulados neste trabalho, estão demonstrados na Tabela 11. Denominou-se experimento 1, o caso sem injeção de água, e experimento 2 o caso com injeção de água.

TABELA 11- Vazões mássicas dos reagentes medidas nos experimentos apresentados por Lacava (2000), os quais foram simulados neste trabalho.

Reagente	Experimento 1	Experimento 2
	Vazão mássica (g/s)	
GLP	2,86	2,91
Ar de combustão	49,37	49,62
Ar de nebulização da água	-	0,90
Água	-	11,30
Total	52,23	64,73

3.2.2. Dados medidos nos experimentos

As concentrações dos gases O_2 , CO_2 , CO e NO_x , em base seca, medidas na saída da câmara, sobre o eixo central do mesmo para os experimentos 1 e 2 apresentados por Lacava (2000), estão apresentados na Tabela 12. O autor mostra na mesma obra que para o experimento 1 a concentração dos gases medidos para O_2 , CO_2 e CO coincidem com as concentrações, obtidas a partir do balanço de massa dos reagentes injetados, em base seca (Tabela 13). Tal balanço de massa está demonstrado através da equação (34).



Sendo: $C_{3,425}H_{7,824}$ a fórmula molecular média do GLP, construída a partir da composição normalizada real do GLP apresentada na Tabela 4.

TABELA 12- Concentrações dos gases medidos no incinerador utilizado por Lacava (2000), em base seca, na saída do incinerador, sobre o eixo central do mesmo .

Concentrações	Experimento 1	Experimento 2
[CO ₂] (%)	12,57 ± 0,11 (%)	12,33 ± 0,04 (%)
[O ₂] (%)	2,85 ± 0,14 (%)	2,93 ± 0,05 (%)
[CO] (%)	<0,02	<0,02
[NO _x] (ppm)	204,02 ± 6,38 (ppm)	65,43 ± 3,29 (ppm)

TABELA 13- Comparação para o experimento 1, entre a análise de gases na saída da câmara com o balanço de massa, para 1,0 (s) de escoamento (Lacava, 2000).

Especificação	[O ₂] (%)	[CO ₂] (%)	[CO] (%)
Balanço de massa	2,82	12,53	0
Medidas	2,85 ± 0,05	12,57 ± 0,11	< 0,02

Comparando-se para o experimento 2 as concentrações dos gases medidos para O₂, CO₂ e CO, com as concentrações obtidas a partir do balanço de massa dos reagentes injetados, em base seca, também se obteve concordância entre tais valores (Tabela 14). O balanço de massa que representa o experimento 2 está demonstrado através da equação (35).

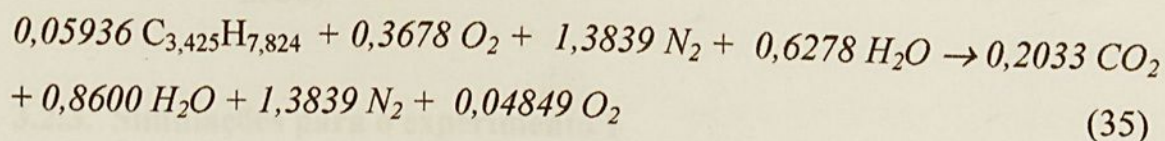


TABELA 14- Comparação para o experimento 2, entre a análise de gases na saída da câmara com o balanço de massa, para 1,0(s) de escoamento (Lacava, 2000).

Especificação	[O ₂] (%)	[CO ₂] (%)	[CO] (%)
Balanço de massa	2,96	12,43	0
Medidas	2,93 ± 0,05	12,33 ± 0,11	< 0,02

Os perfis de temperatura traçados para cada experimento, a partir das medidas de temperatura tomadas nos termopares indicados na Figura 13, estão demonstrados na Figura 14.

Para o experimento 2, em que há injeção de água, observou-se através do perfil de temperatura que houve uma queda uniforme em relação ao experimento 1 ao longo de todo o incinerador. Tal fato deve-se ao calor absorvido para a vaporização da água injetada. Mesmo na região abaixo do ponto de injeção de água observa-se tal queda de temperatura, devido a recirculação dos gases quentes formados no processo de combustão.

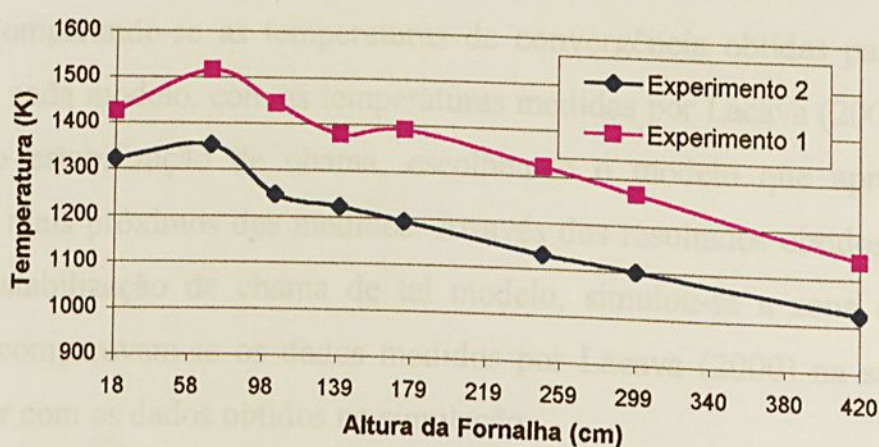


FIGURA 14- Perfis de temperatura para os experimentos 1 e 2 (Lavava, 2000).

3.2.3. Simulações para o experimento 1

O *Aurora* calcula as concentrações dos gases formados no processo de combustão através de uma só temperatura de convergência, e no caso real tem-se um problema tri-dimensional, onde a temperatura varia decrescentemente do centro do reator para a parede do mesmo. Então, estudou-se a possibilidade de simular a zona de estabilização de chama, conectando-se reatores em série, onde se teria uma temperatura de convergência para cada reator. Foram propostos três modelos de simulação

para a zona de estabilização de chama do experimento 1. Tais modelos foram testados pelo *Aurora*, de modo que a equação da energia fora solicitada para a resolução de tais modelos. São eles:

- modelo 1: zona de estabilização de chama representada um reator de mistura perfeita;
- modelo 2: zona de estabilização de chama representada por dois reatores de mistura perfeita de mesmo tempo de residência, conectados em série;
- modelo 3: zona de estabilização de chama representada por três reatores de mistura perfeita de mesmo tempo de residência, conectados em série.

Comparando-se as temperaturas de convergência obtidas para cada reator, em cada modelo, com as temperaturas medidas por Lacava (2000) para a zona de estabilização de chama, escolheu-se o modelo que apresentou resultados mais próximos dos medidos. Através dos resultados obtidos para a zona de estabilização de chama de tal modelo, simulou-se a zona de pós-chama, e comparavam-se os dados medidos por Lacava (2000) na saída do incinerador com os dados obtidos na simulação.

3.2.3.1. Determinação de dados para a zona de estabilização de chama

Para o experimento 1 o comprimento axial de chama, x , foi arbitrado observando-se o perfil de temperatura ao longo do incinerador, apresentado na Figura 14. Observa-se, em tal perfil, que para o experimento 1, entre $x=0$ e 70 (cm), mesmo com as perdas de calor, a temperatura aumenta ao longo do incinerador, ou seja a taxa de calor liberado no sistema é maior que a taxa de calor absorvido. Como grande parte do combustível é convertido em energia térmica na zona de estabilização de chama, o que significa alta taxa de calor liberado, arbitrou-se para ambos os experimentos o comprimento axial da zona de estabilização de chama como $x = 70$ (cm).

Determinando-se tal comprimento axial, foi possível se determinar t_x . Dividiu-se, então, o incinerador em oito volumes de controle. Os dois

primeiros volumes de controle, a partir da base do incinerador, correspondem à zona de estabilização de chama, e os seis restantes a zona de pós-chama. A Figura 15 mostra um esquema do incinerador dividido em volumes de controle. A Tabela 15 mostra o tempo de residência calculado para cada volume de controle especificado na Figura 15. Então como fora relatado pela equação (27) a soma entre os t_R calculados para os volumes 1 e 2 correspondem a t_x , ou seja $t_x = 0,57$ (s) para o experimento 1.

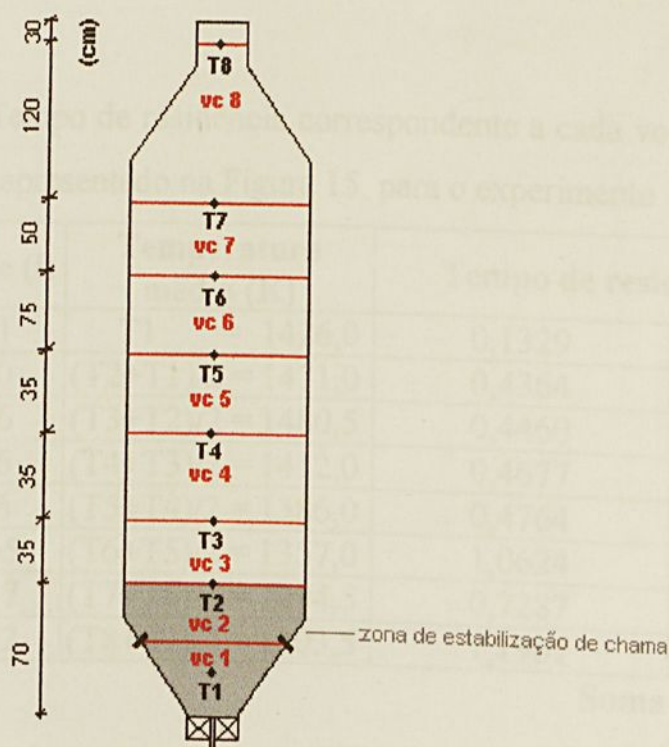


FIGURA 15- Incinerador apresentado em Lacava (2000), dividido em volumes de controle.

A partir das vazões mássicas de GLP e ar apresentadas na Tabela 11, e das composições de ambos (Tabelas 4 e 10), calculou-se o número de moles de entrada para cada espécie reagente, levando-se em conta 1,0 (s) de escoamento. Tais resultados são apresentados na Tabela 16. Possuindo-se o número de moles de cada espécie reagente, fez-se as aproximações previstas

no item 3.1.2 para as espécies constituintes do GLP não contempladas no mecanismo *Konnov versão 0.4*, ou seja, considerou-se a espécie isobuteno como cis-2-buteno, e transformou-se as espécies isobutano, n-butano, isopentano e n-pentano a eteno e hidrogênio através da equação (25). Assim se obteve as frações molares das espécies consideradas reagentes nas simulações que envolveram o experimento 1. A Tabela 17 mostra as aproximações de espécies realizadas, e a Tabela 18 as frações molares das espécies reagentes consideradas nas simulações do experimento 1.

TABELA 15- Tempo de residência correspondente a cada volume de controle apresentado na Figura 15, para o experimento 1.

VC	Volume (l)	Temperatura média (K)	Tempo de residência (s)	
1	28,41	T1 = 1426,0	0,1329	$t_x = 0,57$
2	96,20	(T2+T1)/2 = 1471,0	0,4364	
3	98,96	(T3+T2)/2 = 1480,5	0,4460	$t_{\text{plug}} = 4,38$
4	98,96	(T4+T3)/2 = 1412,0	0,4677	
5	98,96	(T5+T4)/2 = 1386,0	0,4764	
6	216,05	(T6+T5)/2 = 1357,0	1,0624	
7	141,37	(T7+T6)/2 = 1294,5	0,7287	
8	215,72	(T8+T7)/2 = 1203,5	1,1961	
Soma			4,95	

Nas simulações a temperatura de entrada dos reagentes no incinerador foi considerada $T_I = 298$ (K). A vazão mássica total dos reagentes $\dot{m}_i = 52,23$ (g/s), como mostra as Tabelas 16 e 18. A pressão atmosférica no incinerador foi considerada de $P = 1,0$ (atm). Tal valor é recomendado por Carvalho & Gotaç (1993) para um incinerador de resíduos aquosos.

A taxa de calor perdido foi calculada através da equação (28). Para os cálculos de \dot{p}_{GLP} , o número de moles das espécies reais e aproximadas estão na Tabela 19 e o PCI de cada espécie na Tabela 5. A Tabela 20 mostra o valor

das parcelas, e o valor final para o termo \dot{p}_{GLP} , pertencente ao segundo membro da equação (28), relativo ao experimento 1.

TABELA 16 - Número de moles das espécies reagentes para o experimento 1, levando-se em conta 1,0 (s) de escoamento .

Espécies Reagentes	n espécie	Peso molecular(g/mol)	Massa (g/s)
Oxigênio	0,35948	32,00	11,5032
Nitrogênio	1,35239	28,00	37,8668
Metano	0,00045	16,04	0,0072
Propino	0,00292	40,06	0,1170
Propeno	0,01823	42,08	0,7671
Propano	0,01520	44,10	0,6704
1-buteno	0,00001	56,11	0,00028
Isobuteno	0,00132	56,11	0,0740
Cis-2-buteno	0,00453	56,11	0,2540
Isobutano	0,00695	58,12	0,4038
n-butano	0,00462	58,12	0,2686
Isopentano	0,00403	72,15	0,2909
n-pentano	0,00010	72,15	0,0067
Soma			52,23

TABELA 17- Transformações previstas no item 3.1.2, das espécies constituintes do GLP não contempladas no mecanismo Konnov versão 0.4, para espécies existentes em tal mecanismo.

Isobuteno → cis-2-buteno		
Espécie	n espécie real	n espécies aproximadas
Isobuteno	0,00132 C ₄ H ₁₀ (isobuteno)	0,00132 C ₄ H ₁₀ (cis-2-buteno)

Aproximações pela equação (25)		
Espécies	n espécie real	n espécies aproximadas
Isobutano	0,00695 C ₄ H ₁₀	0,01390 C ₂ H ₄ + 0,00695 H ₂
n-butano	0,00462 C ₄ H ₁₀	0,00924 C ₂ H ₄ + 0,00462 H ₂
Isopentano	0,00403 C ₅ H ₁₂	0,01008 C ₂ H ₄ + 0,00403 H ₂
n-pentano	0,00010 C ₅ H ₁₂	0,00024 C ₂ H ₄ + 0,00010 H ₂
Soma		0,03345 C₂H₄ + 0,01570 H₂

TABELA 18- Frações molares das espécies reagentes consideradas nas simulações (*Aurora*) do experimento 1.

Espécies Reagentes	Peso molecular (g/mol)	n espécie (mol)	Massa (g/s)	Fração molar
Oxigênio	32,00	0,3595	11,5032	0,19930
Nitrogênio	28,00	1,3524	37,8668	0,74980
Metano	16,04	0,00045	0,0072	0,00025
Propino	40,06	0,00292	0,1170	0,00162
Propeno	42,08	0,01823	0,7671	0,01011
Propano	44,10	0,01520	0,6704	0,00843
1-buteno	56,11	0,000005	0,00028	0,00000
cis-2-buteno	56,11	0,00585	0,3280	0,00324
Eteno	28,03	0,03345	0,9377	0,01855
Hidrogênio	2,02	0,01570	0,0317	0,00870
Soma			52,23	

TABELA 19 - Cálculo do termo \dot{p}_{GLP} para o experimento 1.

Aproximação de isobuteno a cis-2-buteno		
Espécie	n isobuteno x PCI espécie	Diferença (Kcal)
Cis-2-buteno	0,79997	0,0026
Isobuteno	0,79735	

Aproximação das espécies relatadas no item 3.1.2 pela equação (25)			
Espécie	n espécie real x PCI espécie real	(n eteno x PCI eteno) + (n hidrogênio x PCI hidrogênio)	Diferença (Kcal)
Isobutano	4,4045	4,7968	0,3923
n-butano	2,9355	3,1887	0,2532
Isopentano	3,1439	3,4186	0,2747
n-pentano	0,0782	0,0848	0,0066
Soma			0,9294

TABELA 20- Taxa de calor perdido para o experimento 1, e as parcelas envolvidas no cálculo (equação 28).

Parcelas	Valor (cal/s)
$n_{comb} \cdot PCI_{comb}$	31530,50
$\sum_{j=1}^n n_j \cdot \int_{TI}^{TF} C_{p,j} \cdot dT$	18345,91
\dot{P}_{GLP}	929,43
\dot{Q}_p	12255,16

3.2.3.2. Resultados para as simulações da zona de estabilização de chama

A partir dos dados calculados no item anterior, simularam-se os modelos 1, 2 e 3 (Figura 16), referentes à zona de estabilização de chama do experimento 1. Para os modelos 2 e 3, que envolvem reatores em série, especificou-se o tempo de residência para cada reator e forneceram-se os dados de entrada somente para o primeiro reator (estendendo-se a pressão atmosférica e a taxa de calor perdido para os demais), já que a conexão entre os reatores é feita automaticamente pelo *Aurora*.

Definindo-se então a taxa de conversão do combustível, $TCC_{i,x}$, definida pela equação (36), analisaram-se os resultados para os três modelos. A Tabela 21 mostra a taxa de conversão de cada espécie combustível para o primeiro reator de cada modelo e a Tabela 22 as temperaturas de convergência para cada reator, em cada modelo.

$$TCC_{i,x} = \left[1 - \left(\frac{X_{i,comb.sai}}{X_{i,comb.en}} \right) \right] \cdot 100\% \quad (36)$$

Sendo: $X_{i,comb.en}$ a fração molar da espécie combustível i injetada e $X_{i,comb.sai}$ a fração molar de saída da espécie combustível i na zona de estabilização de chama.

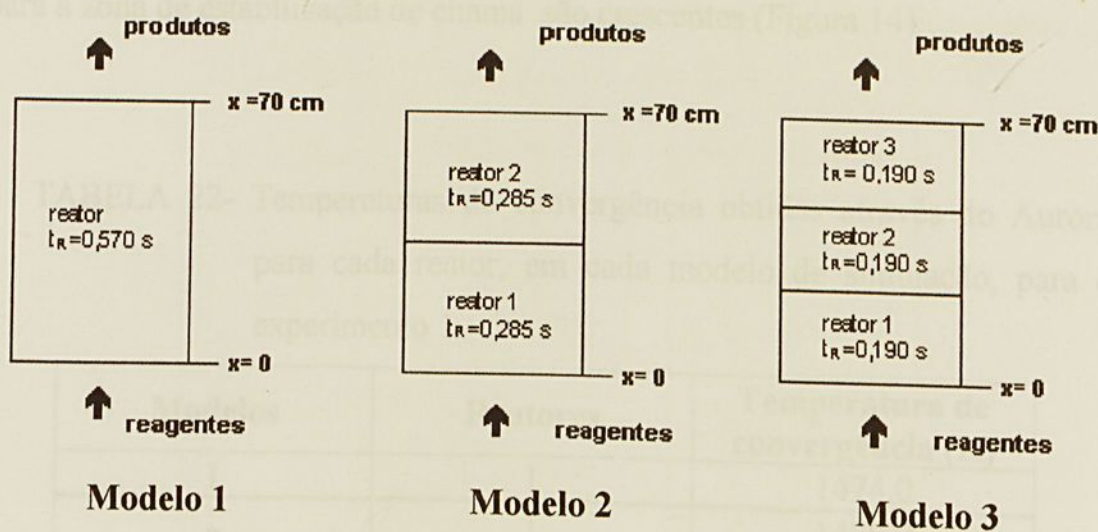


FIGURA 16- Esquema dos modelos 1, 2, 3 (experimento 1).

TABELA 21- A taxa de conversão de combustível para o primeiro reator de cada modelo (experimento 1).

Combustíveis	Modelo 1 ($TCC_{i,x}(\%)$)	Modelo 2, reator 1 ($TCC_{i,x}(\%)$)	Modelo 3, reator 1 ($TCC_{i,x}(\%)$)
CH_4	99,91	99,88	99,85
C_3H_4	100,00	100,00	100,00
C_3H_6	100,00	99,99	99,99
C_3H_8	100,00	100,00	100,00
$C_2C_4H_8$	100,00	100,00	100,00
C_2H_4	99,99	99,98	99,98
H_2	98,39	97,55	96,89

Os resultados obtidos através das simulações para os três modelos simulados mostraram que o modelo 1 é o único modelo viável para a zona de estabilização de chama, em simulações através do *Aurora* quando a opção da equação de energia for solicitada para ser resolvida. A Tabela 21, mostra que tanto para o modelo 2, como para o modelo 3, que constam de mais de um reator para simular a zona de estabilização de chama, todo combustível foi convertido no primeiro reator 1. Logo as temperaturas de convergência obtidas para cada reator, nas simulações dos modelos 2 e 3 decrescem a partir de tal

reator (Tabela 22), e as medidas de temperatura tomadas por Lacava (2000) para a zona de estabilização de chama são crescentes (Figura 14).

TABELA 22- Temperaturas de convergência obtidas através do Aurora para cada reator, em cada modelo de simulação, para o experimento 1.

Modelos	Reatores	Temperatura de convergência (K)
1	1	1474,0
2	1	1470,0
	2	578,5
3	1	1468,0
	2	577,1
	3	269,4

Além disso, comparando-se a temperatura de convergência obtida pelo *Aurora* para reator que representa o modelo 1 ($T_x=1474$ (K)), ou seja, para o final da zona de estabilização de chama, com a temperatura medida por Lacava (2000) para a mesma posição ($x = 70\text{cm}$), $TF = 1516$ (K), verificou-se baixa discrepância ((-) $2,77\%$) entre tais valores.

3.2.3.3. Interface entre a região de estabilização de chama e a zona de pós-chama

A partir então dos resultados obtidos para o modelo 1 (temperatura e concentração dos gases) simulou-se a zona de pós-chama. Corrigindo-se então as frações molares de saída para a zona de estabilização de chama, em função do N_2 , que é um gás inerte em combustão, obtiveram-se as frações molares de entrada para a zona de pós-chama. A Tabela 23, mostra as frações molares de saída obtidas pelo *Aurora*, e as frações molares de entrada no *Plug* para a simulação da zona de pós-chama.

TABELA 23- Frações molares de saída do Aurora, e as frações molares de entrada no Plug para a simulação da zona de pós-chama do experimento 1, através do modelo 1.

Espécies	X _{saída do reator de mistura perfeita}	X _{entrada no reator plug flow}
O ₂	0,025100	0,025100
N ₂	0,740300	0,740788
CO ₂	0,108900	0,108900
CO	0,000465	0,000465
NO	0,000006769	0,000006769
H ₂ O	0,124600	0,124600
H ₂	0,000140	0,000140
Soma	0,9995	1,0000

A temperatura de convergência obtida pelo *Aurora* (1474 K) foi considerada a temperatura de entrada dos gases no reator *plug flow*. A partir de tal temperatura, e considerando-se as frações molares de entrada no reator *plug flow*, calculou-se $\mu_m = 4,81$ (P), através das equações (30) e (31), e $\dot{q}_{plug} = 220893,2$ (cm³/s), através das equações (32) e (33). A Figura 17 compara o perfil de temperatura ao longo do reator usado na simulação, com o perfil medido por Lacava (2000) no centro do incinerador, para a mesma região. Para se compor o perfil de temperatura simulado, substitui-se no perfil medido por Lacava (2000), TF por T_x. Em tal simulação, forneceu-se ainda ao *Plug*, o comprimento do reator *plug flow* (L_{plug} = 350 (cm)), e o perfil da seção transversal do incinerador ao longo da zona de pós-chama (entre 70 e 420 (cm)).

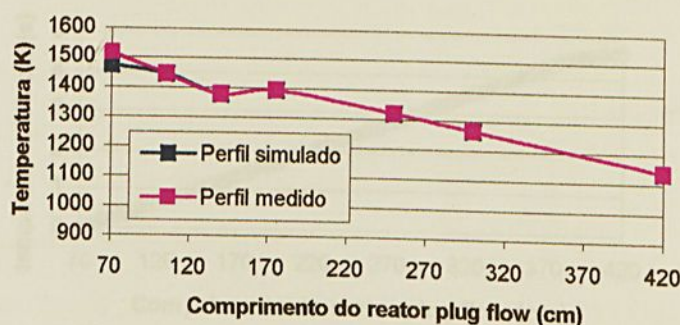


FIGURA 17- Comparação entre o perfil de temperatura simulado, e o perfil de temperatura medido por Lacava (2000), para a zona de pós-chama do experimento 1.

3.2.3.4. Resultados para a simulação da zona de pós-chama

Simulando-se a zona de pós-chama para o experimento 1, observou-se que o tempo de residência comportou-se linearmente ao longo do reator *plug flow* (Figura 18). Além disso, comparando-se tal tempo de residência, obtido através da simulação ($t_{\text{plug simulado}} = 4,63$ (s)), com o calculado no item 3.2.3.1 e mostrado na Tabela 15, ($t_{\text{plug}} = 4,38$ (s)), observou-se baixa discrepância (5,71%).

As concentrações dos gases O_2 , CO_2 , CO e NO obtidas para o final do reator *plug flow* pouco se alteraram em relação aos valores de entrada no mesmo. Tal resultado já era esperado, devido às altas $TCC_{i,x}$ obtidas para as espécies combustíveis na zona de estabilização de chama. Para O_2 , CO_2 e NO a discrepância entre os valores de entrada e saída, respectivamente, foram: (-) 1,18%, 4,49%, (-) 0,59%. A concentração de CO que já era baixa na entrada do reator (0,047%) caiu para 0.

A Figura 19 mostra o comportamento das concentrações dos gases O_2 , CO_2 , CO e NO ao longo do reator *plug flow*. As espécies O_2 , CO_2 , CO sofreram um salto inicial, relatado pelas porcentagens descritas no parágrafo anterior, caracterizando a oxidação do CO à CO_2 , e depois permaneceram constantes. A concentração de NO caiu lentamente, 0,038 (ppm), ao longo do reator.

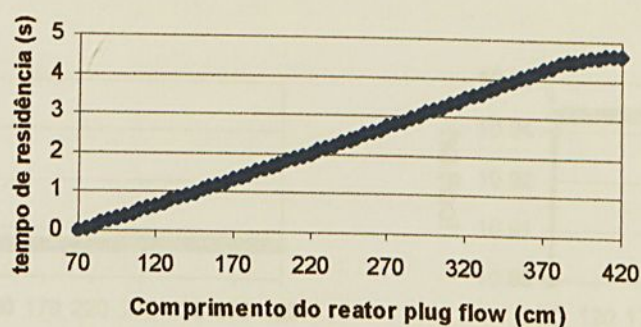


FIGURA 18- Perfil do tempo de residência ao longo do reator plug flow para o experimento 1 .

A Tabela 24 compara, em base seca, as concentrações dos gases O_2 , CO_2 , CO e $NO^{\#}$ obtidas para o final da zona de pós-chama através da simulação, com as concentrações de tais gases medidos por Lacava (2000) na saída do incinerador. Para os gases O_2 , CO_2 e CO os valores coincidem com as medidas, portanto, os valores obtidos através da simulação concordam com o balanço de massa, já que as concentrações gasosas, em base seca, medidas por Lacava (2000) concordam com tal balanço. Para o NO , porém, obteve-se através da simulação grande discrepância em relação ao valor medido.

TABELA 24- Comparação entre as concentrações dos gases medidos na saída do incinerador, e as concentrações obtidas para o final do reator *plug flow*, em base seca, para o experimento 1.

Espécies	Medidas	Simulação	Discrepância (%)
CO_2 (%)	$12,57 \pm 0,11$	12,50	0
O_2 (%)	$2,85 \pm 0,14$	2,84	0
CO (%)	<0,02	0	0
NO (ppm)	$204,02 \pm 6,38$	7,69	(-) 96,23

[#] A concentração de NO_2 obtida nesta simulação (assim como nas demais apresentadas neste trabalho) é desprezível. Por isso a concentração de NO_x medida por Lacava (2000) foi comparada com a concentração de NO

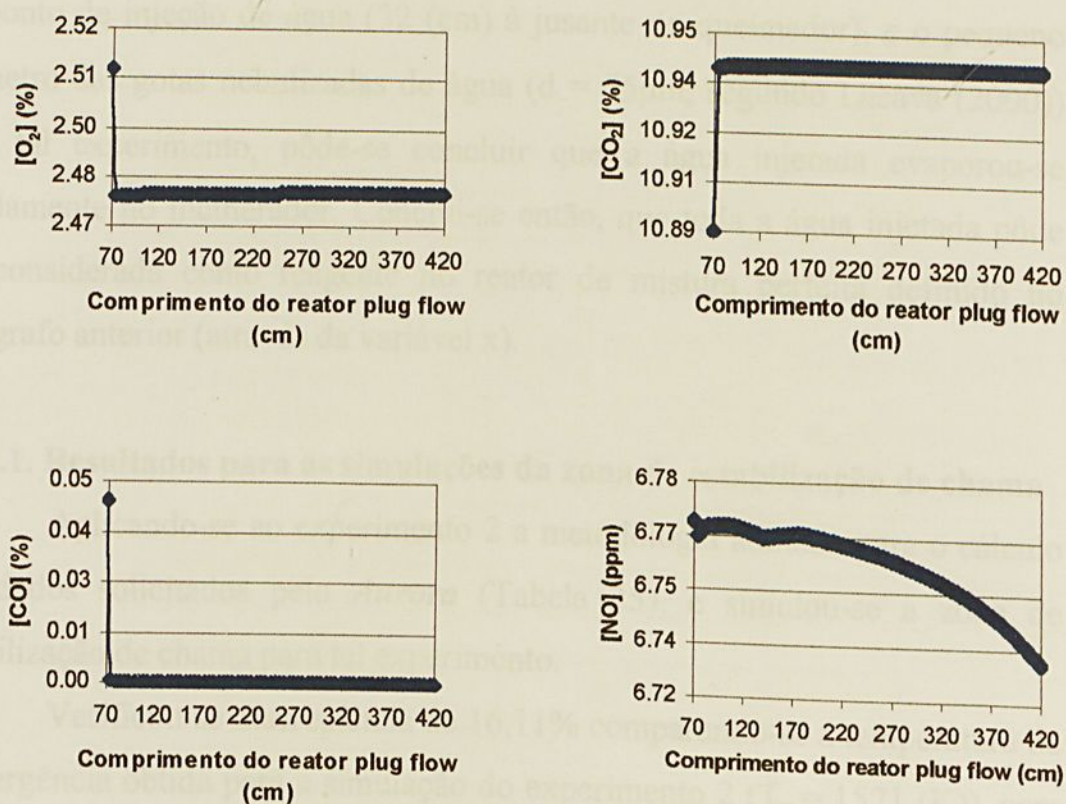


FIGURA 19- Concentrações dos gases O_2 , CO_2 , CO e NO , em base úmida, ao longo do reator *plug flow* para o experimento 1 .

3.2.4. Simulações para o experimento 2

Para o experimento 2, aplicou-se a metodologia adotada (modelo 1, experimento 1), e compararam-se os resultados com as medidas tomadas por Lacava (2000), e com os resultados obtidos para o experimento 1.

A diferença entre os experimentos 1 e o experimento 2 realizados por Lacava (2000) é que para o segundo há injeção de água, como já foi relatado. Considerando-se o perfil de temperatura ao longo do incinerador para o experimento 2, apresentado na Figura 14, observa-se que este se comporta da mesma forma que o mesmo perfil para o experimento 1. Logo, para tal experimento foi adotado o mesmo comprimento axial da zona de estabilização de chama considerado para o experimento 1: $x = 70$ (cm).

Além disso, levando-se em conta as altas temperaturas do incinerador no ponto de injeção de água (32 (cm) à jusante do queimador), e o pequeno diâmetro das gotas nebulizadas de água ($d = 55\mu\text{m}$, segundo Lacava (2000)) para tal experimento, pôde-se concluir que a água injetada evaporou-se rapidamente no incinerador. Conclui-se então, que toda a água injetada pôde ser considerada como reagente no reator de mistura perfeita definido no parágrafo anterior (através da variável x).

3.2.4.1. Resultados para as simulações da zona de estabilização de chama

Aplicando-se ao experimento 2 a metodologia adotada para o cálculo dos dados solicitados pelo *Aurora* (Tabela 25), e simulou-se a zona de estabilização de chama para tal experimento.

Verificou-se discrepância de 16,11% comparando-se a temperatura de convergência obtida para a simulação do experimento 2 ($T_x = 1571$ (K)), com a temperatura medida por Lacava (2000) para a mesma posição ($x = 70\text{cm}$), $T_F = 1353$ (K). Tal discrepância, obtida para o experimento 2, comparada com a discrepância apresentada entre as mesmas temperaturas para o experimento 1 ((-)2,77%), mostra que a utilização da equação (28), utilizada para se calcular a taxa de calor perdido para o caso sem injeção de água, apresentou melhor resultado que a equação (29), utilizada com o mesmo objetivo para este experimento.

Em contrapartida, levando-se em conta que as razões combustível/ar para os dois experimentos são praticamente as mesmas, a temperatura de convergência obtida para o experimento 1 deveria ser menor que a obtida para o experimento 2, no qual há injeção de água.

Os resultados desta simulação mostraram também que todas as espécies combustíveis foram convertidas na zona de estabilização de chama, assim como foi observado na simulação de tal zona para o experimento 1. A Tabela 26 mostra as $TCC_{i,x}$ das espécies i combustíveis regentes para o experimento 2.

TABELA 25- Dados de entrada , solicitados pelo Aurora, para a simulação da zona de estabilização de chama do experimento 2 .

Especificação	Dado	Valor
Tempo de residência	t_x	0,46 (s)
	t_{plug}	3,67(s)
	Soma	4,13 (s)
Taxa de calor perdido	$n_{comb} \cdot PCI_{comb}$	32.082,75 (cal/s)
	$\sum_{j=1}^n n_j \cdot \int_{TI}^{TF} C_{p,j} \cdot dT$	22.215,25 (cal/s)
	$n_{res} \cdot h_L$	6.050,08 (cal/s)
	\dot{P}_{GLP}	945,00 (cal/s)
	\dot{Q}_p	2.872,4 (cal/s)
Temperatura inicial	TI	298 (K)
Pressão atmosférica	P	1 (atm)
Vazão mássica total	\dot{m}_t	64,73 (g/s)
Fração molar dos reagentes	Oxigênio	0,14879
	Nitrogênio	0,55978
	Metano	0,00018
	Propino	0,00120
	Propeno	0,00750
	Propano	0,00626
	cis-2-buteno	0,00241
	Eteno	0,01377
	Hidrogênio	0,00646
	Água	0,25365

TABELA 26- A taxa de conversão de combustível para o primeiro reator de cada modelo (experimento 2).

Combustíveis	TCC _{i,x} (%)
CH ₄	99,84
C ₃ H ₄	100,00
C ₃ H ₆	100,00
C ₃ H ₈	100,00
C ₂ C ₄ H ₈	100,00
C ₂ H ₄	99,99

Procedendo-se de maneira idêntica que do experimento 1, a partir dos resultados obtidos na simulação da zona de estabilização de chama do experimento 2, simulou-se a zona de pós-chama para tal experimento através dos dados apresentados na Tabela 27.

TABELA 27- Dados de entrada , solicitados pelo Plug, para a simulação da zona de pós-chama de chama do experimento 2 .

Especificação	Dado	Valor																								
Comprimento do reator	L_{plug}	350 (cm)																								
Viscosidade	μ_m	4,82 (P)																								
Pressão atmosférica	P	1 (atm)																								
Vazão volumétrica	\dot{q}_{plug}	321.818,3 (cm ³ /s)																								
Perfil- seção transversal	Idem a simulação do experimento 1																									
Perfil de temperatura	<table border="1"> <caption>Dados do Perfil de Temperatura</caption> <thead> <tr> <th>Comprimento do reator (cm)</th> <th>Temperatura (K) - Perfil simulado</th> <th>Temperatura (K) - Perfil medido</th> </tr> </thead> <tbody> <tr><td>70</td><td>1550</td><td>1350</td></tr> <tr><td>120</td><td>1250</td><td>1220</td></tr> <tr><td>170</td><td>1200</td><td>1180</td></tr> <tr><td>220</td><td>1150</td><td>1140</td></tr> <tr><td>270</td><td>1100</td><td>1100</td></tr> <tr><td>320</td><td>1050</td><td>1060</td></tr> <tr><td>420</td><td>1000</td><td>1000</td></tr> </tbody> </table>		Comprimento do reator (cm)	Temperatura (K) - Perfil simulado	Temperatura (K) - Perfil medido	70	1550	1350	120	1250	1220	170	1200	1180	220	1150	1140	270	1100	1100	320	1050	1060	420	1000	1000
Comprimento do reator (cm)	Temperatura (K) - Perfil simulado	Temperatura (K) - Perfil medido																								
70	1550	1350																								
120	1250	1220																								
170	1200	1180																								
220	1150	1140																								
270	1100	1100																								
320	1050	1060																								
420	1000	1000																								
Fração molar dos reagentes	O ₂	0,019560																								
	N ₂	0,555215																								
	CO ₂	0,081070																								
	CO	0,000353																								
	H ₂ O	0,343400																								
	NO	0,000006975																								
	H ₂	0,000395																								

Os resultados mostraram-se similares aos obtidos na simulação do experimento 1. As concentrações finais de O₂, CO₂ e CO, em base seca, coincidiram com as concentrações de tais gases medidas por Lacava (2000), concordando com o balanço de massa apresentado pela Tabela 14. A concentração de NO obtida mostrou grande discrepância com a medida

tomada por Lacava (2000), assim como no experimento 1, porém apresentou valor maior que em tal experimento. Tal incoerência se deve a diferença entre as temperaturas de convergência obtidas para cada experimento, relatada anteriormente, já que a concentração de NO é extremamente sensível a temperatura.

A Tabela 28 compara, em base seca, as concentrações dos gases O₂, CO₂, CO e NO obtidas para o final da zona de pós-chama através da simulação do experimento 2, com as concentrações de tais gases medidos por Lacava (2000) na saída do incinerador.

TABELA 28- Comparação entre as concentrações dos gases medidos na saída do incinerador, e as concentrações obtidas para o final do reator *plug flow*, em base seca, para o experimento 2.

Concentrações	Medidas	Simulação	Discrepância (%)
[CO ₂] (%)	12,33 ± 0,04 (%)	12,42	0,40
[O ₂] (%)	2,93 ± 0,05 (%)	2,93	0
[CO] (%)	0	0	0
[NO] (ppm)	65,43 ± 3,29 (ppm)	10,48	(-) 83,98

O comportamento das concentrações dos gases ao longo do reator *plug flow* foi o mesmo observado para o experimento 1, ou seja, observou-se uma oxidação inicial do CO à CO₂, com a concentração do CO caindo a 0 (zero), de modo que após tal oxidação os gases O₂, CO₂ e CO permaneceram constantes, e a concentração de NO caiu, 0,100 (ppm), lentamente. A Figura 20 mostra o comportamento das concentrações dos gases O₂, CO₂, CO e NO ao longo do reator *plug flow*.

O tempo de residência obtido pelo *Plug* para a zona de pós-chama ($t_{\text{plug simulado}} = 3,86$ s), também apresentou o mesmo comportamento linear apresentado pelo experimento 1 ao longo do reator *plug flow*, e baixa discrepância ((-) 5,18) em relação ao calculado ($t_{\text{plug}} = 3,67$ s).

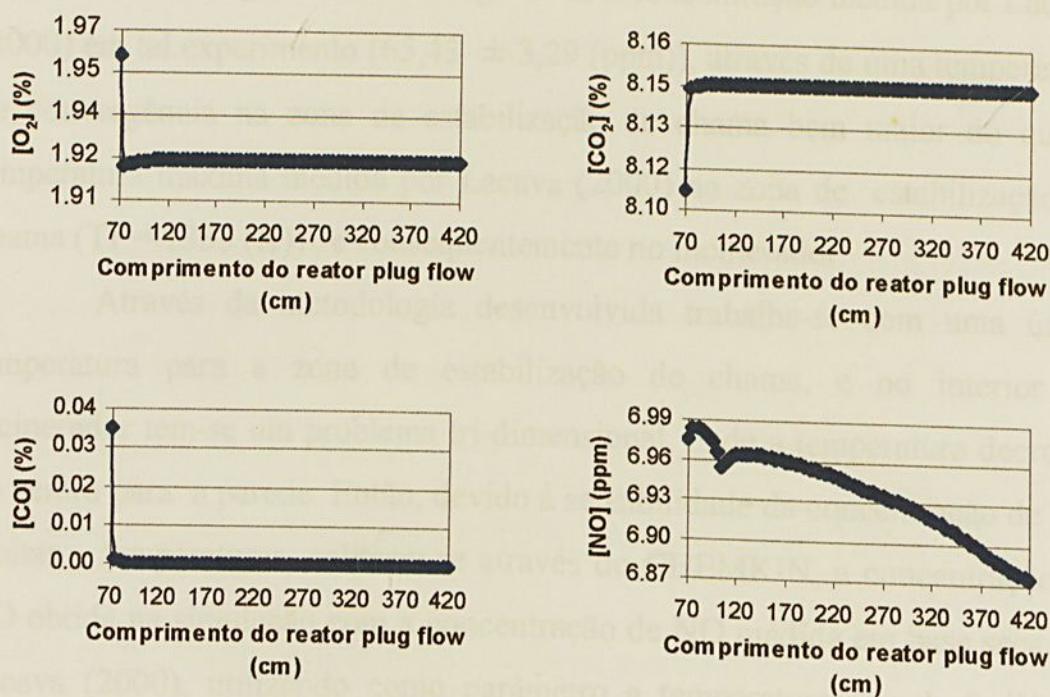


FIGURA 20- Concentrações dos gases O_2 , CO_2 , CO e NO , em base úmida, ao longo do reator *plug flow* para o experimento 2.

3.2.5. Ajuste para a concentração de NO

Devido a incoerência constatada entre a concentração de NO , medida por Lacava (2000), e simulada no CHEMKIN, através da metodologia adotada para os experimentos 1 e 2, e sabendo-se que a altas temperaturas tal gás atinge grandes concentrações, investigou-se a formação de NO , na zona de estabilização de chama para o experimento 2.

Fez-se então para tal experimento simulações à temperatura fixa, ou seja, já se fornecendo ao *Aurora* a temperatura de convergência para qual as concentrações dos gases são calculadas. Variou-se tal parâmetro, na faixa entre 900 e 2100 (K), em intervalos de 100 (K) de uma simulação à outra, e mantiveram-se os demais parâmetros calculados. Na Figura 21, onde se apresentou a variação da concentração de NO em função da temperatura, observa-se que a partir de 1700 (K) a concentração de NO aumenta

acintosamente. Logo, somente atingir-se-ia a concentração medida por Lacava (2000) em tal experimento ($65,43 \pm 3,29$ (ppm)), através de uma temperatura de convergência na zona de estabilização de chama bem maior do que a temperatura máxima medida por Lacava (2000) na zona de estabilização de chama ($TF = 1353$ (K)), e conseqüentemente no incinerador.

Através da metodologia desenvolvida trabalha-se com uma única temperatura para a zona de estabilização de chama, e no interior do incinerador tem-se um problema tri-dimensional, onde a temperatura decresce do centro para a parede. Então, devido à sensibilidade da concentração de NO à altas temperaturas, calibrou-se através do CHEMKIN, a concentração de NO obtida na simulação com a concentração de NO medida em base seca por Lacava (2000), utilizando como parâmetro a temperatura. Linak & Wendt (1996) simulando um incinerador horizontal através do CHEMKIN através da mesma configuração de reatores aplicada neste trabalho, com uma chama de metano e ar com rotação, utilizaram o mesmo procedimento para se estudar a incineração de resíduos nitrogenados.

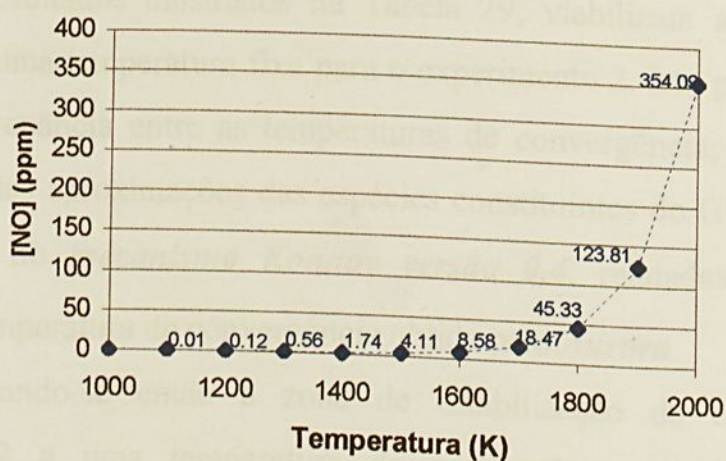


FIGURA 21- Variação da concentração de NO, em base úmida, em relação à temperatura, na zona de estabilização de chama, para o experimento 2.

Para se atingir a concentração de NO desejada, recorreu-se às simulações realizadas a uma temperatura fixa no *Aurora*. Como através desse artifício não é possível se considerar a diferença energética \dot{p}_{GLP} , já que para tal opção de simulação o *software* não solicita a taxa de calor perdido, então fizeram-se duas simulações com o intuito de se analisar a viabilidade de tal utilização. Supôs-se que não houve perda de calor para o experimento 2, logo ter-se-ia $\dot{Q}_p = \dot{p}_{GLP}$. Então, solicitando-se a resolução pela equação da energia, simulou-se dois casos: um com $\dot{Q}_p = \dot{p}_{GLP}$, e outro com $\dot{Q}_p = 0$, e comparou-se as temperaturas de convergência obtidas nas simulações (Tabela 29).

TABELA 29- Comparação entre as temperaturas de convergência obtidas para os casos $\dot{Q}_p = 0$ e $\dot{Q}_p = \dot{p}_{GLP}$, para o experimentos 2.

T_x (K)		Discrepância (%)
$\dot{Q}_p = \dot{p}_{GLP}$	$\dot{Q}_p = 0$	
1720	1757	(-)2,15%

Os resultados mostrados na Tabela 29, viabilizam a utilização de simulações a uma temperatura fixa para o experimento 2. Isto porque, obteve-se baixa discrepância entre as temperaturas de convergência, T_x , ou seja, a contribuição das aproximações das espécies constituintes do GLP à espécies contempladas no *mecanismo Konnov versão 0,4*, relatadas por \dot{p}_{GLP} , é pequena na temperatura de convergência obtida pelo *Aurora*.

Simulando-se então a zona de estabilização de chama para o experimento 2 a uma temperatura de convergência $T_x = 1795$ (K), e conectando-se os gases gerados em tal zona em um reator *plug flow*, através da metodologia adotada, obteve-se a concentração de NO medida por Lacava (2000), em base seca, na saída do incinerador. Apesar de tal temperatura ser muito maior que a que a máxima medida por Lacava (2000), ela é menor que a temperatura de chama adiabática calculada para o experimento 2, levando-se

em conta o combustível e o ar de combustão injetado, $T_A = 2272$ (K), calculada através da equação (37). Considerando-se o vapor d'água gerado devido a água injetada e o ar de nebulização do resíduo obteve-se $T_A = 1755$ (K), que é pouco menor que a temperatura de convergência adotada.

$$n_{comb} \cdot PCI_{comb} = \sum_{j=i}^n n_j \cdot \int_{T_I}^{T_A} C_{p,j} \cdot dT \quad (37)$$

Sendo: T_A a temperatura de chama adiabática.

Além disso, tal calibração não alterou as concentrações de O_2 e CO_2 . Observando-se a Figura 22 que mostra os mesmos resultados para as concentrações de O_2 e CO_2 , que a Figura 21 mostra para o NO , concluiu-se que a partir de 1200 (K) todo combustível já foi convertido na zona de estabilização de chama, ou seja, a partir desta temperatura as concentrações de tais gases não mais se alteram. Logo, simulando-se a zona de estabilização de chama para o experimento 2 a uma temperatura de convergência de $T_x = 1353$ (K) (temperatura máxima medida por Lacava (2000)), ou a $T_x = 1571$ (K) (temperatura de convergência obtida simulando-se o experimento 2 pela equação da energia), ou a $T_x = 1795$ (K) (temperatura de calibragem para a concentração de NO) as concentrações de O_2 e CO_2 obtidas são praticamente as mesmas.

Comparando-se os resultados de duas simulações realizadas à temperaturas de convergência para a zona de estabilização de chama diferentes: $T_x = 1353$ (K) e 1795 (K), observa-se que a única diferença significativa obtida na concentração dos gases para o final do reator de mistura perfeita é a concentração de NO . A Tabela 30 compara as concentrações dos gases na saída do reator de mistura perfeita.

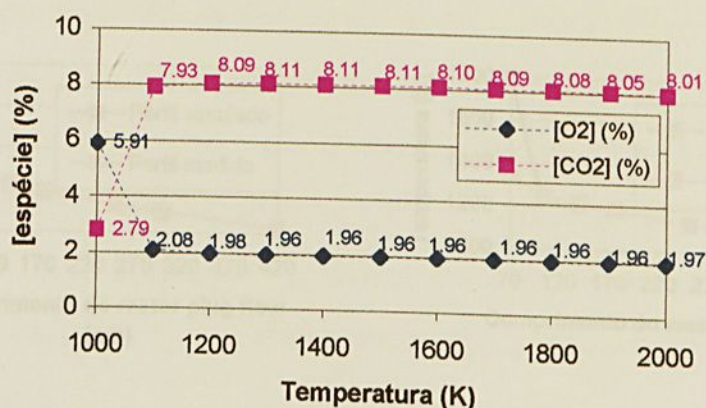


FIGURA 22- Variação das concentrações de O_2 e CO_2 em relação à temperatura, na zona de estabilização de chama, para o experimento 2.

TABELA 30- Comparação entre as concentrações dos gases O_2 , CO_2 , CO e NO , em base úmida, no final do reator de mistura perfeita, entre os casos simulados a $T_x=1353$ (K) e 1795 (K), para o experimento 2.

Espécies	Temperatura de convergência, T_x (K)	
	1353	1795
CO_2 (%)	8,11	8,08
O_2 (%)	1,96	1,96
CO (%)	0,03	0,06
NO (ppm)	1,06	43,21

Fazendo-se as simulações da zona de pós-chama, em ambos casos ($T_x=1353$ (K) e 1795 (K)), as variáveis \dot{q}_{plug} e μ_m , e o perfil de temperatura variam, já que estes dependem de T_x . A Figura 23 compara os perfis de temperatura considerados para tais casos nas simulações da zona de pós-chama. Nela observa-se que o perfil de temperatura do caso simulado a $T_x=1795$ (K), difere, entre os pontos 70 (cm) e 105 (cm) do incinerador, do perfil de temperatura real medido por Lacava (2000) e considerado na simulação realizada a $T_x=1353$ (K).

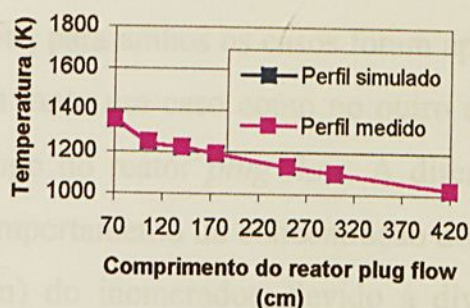
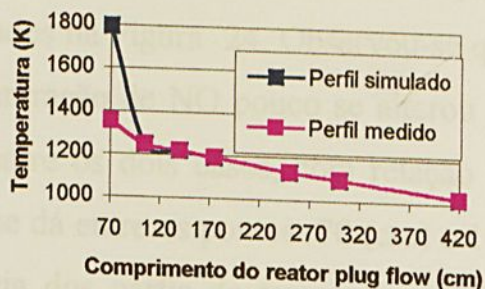

 $T_x = 1353 \text{ (K)}$

 $T_x = 1795 \text{ (K)}$

FIGURA 23- Perfis de temperatura simulados para a zona de pós-chama nos casos $T_x=1353 \text{ (K)}$ e 1795 (K) , referentes ao experimento 2.

Os resultados, obtidos para ambos os casos, no final da zona de pós-chama, ou na saída do incinerador, apresentados na Tabela 31, demonstram que através da utilização de $T_x = 1795 \text{ (K)}$ na simulação do experimento 2 obtém-se resultados, que pouco divergem dos resultados obtidos para o mesmo experimento utilizando $T_x = 1353 \text{ (K)}$, com exceção da concentração de NO. A Tabela 31 ainda demonstra a coincidência entre as concentrações dos gases medidos por Lacava (2000), com as concentrações obtidas simulando-se o experimento 2 através de $T_x = 1795 \text{ (K)}$.

TABELA 31- Comparação entre as concentrações dos gases O_2 , CO_2 , CO e NO , em base seca, para o final do incinerador, entre os casos simulados a $T_x=1353 \text{ (K)}$ e 1795 (K) , e as medidas tomadas por Lacava (2000) (experimento 2).

Espécies	Temperatura de convergência, $T_x \text{ (K)}$		Medidas
	1353	1795	
$CO_2 \text{ (}\%)$	12,41	12,40	$12,33 \pm 0,04$
$O_2 \text{ (}\%)$	2,93	2,89	$2,93 \pm 0,05$
$CO \text{ (}\%)$	0	0	0
$NO \text{ (ppm)}$	1,59	65,69	$65,43 \pm 3,29$

O comportamento da concentração de NO ao longo do reator *plug flow*, para ambos os casos foram apresentados na Figura 24. Observou-se que em tanto um caso como no outro a concentração de NO pouco se alterou ao longo do reator *plug flow*. A diferença entre os dois casos, com relação ao comportamento da concentração de NO, se dá entre os pontos 70 (cm) e 105 (cm) do incinerador, devido á divergência dos perfis de temperatura entre esses pontos .

O tempo de residência obtido pelo *Plug* para a zona de pós-chama considerando-se $T_x = 1353$ (K) ($t_{\text{plug simulado}} = 3,88$ (s)), praticamente coincidiu com o tempo de residência obtido para a simulação realizada com $T_x = 1795$ (K) ($t_{\text{plug simulado}} = 3,84$ (s)). Da mesma forma que ambos apresentaram-se bastante próximos do tempo de residência obtido para a simulação realizada através da equação da energia $T_x = 1571$ (K) ($t_{\text{plug simulado}} = 3,86$ (s)). Tal fato é mais um motivo que viabiliza a utilização de $T_x = 1795$ (K), para se simular o experimento 2.

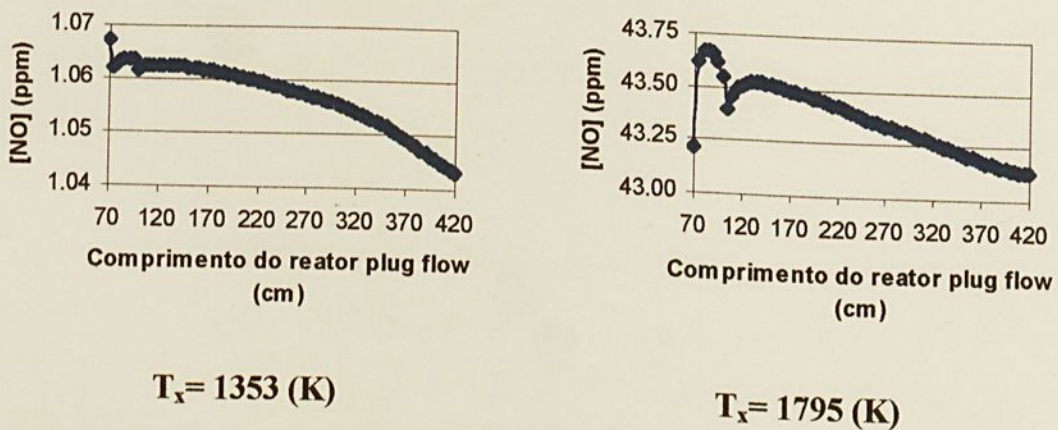


FIGURA 24- Concentração do gás NO, em base seca, ao longo do reator *plug flow*, para os casos $T_x = 1353$ (K) e 1795 (K), referentes ao experimento 2 .

Portanto, como o NO é muito sensível a picos de temperatura na chama, os efeitos de micro-mistura entre os reagentes na chama não foram

considerados, e as simulações foram realizadas com uma única temperatura de convergência para a zona de estabilização de chama. A consideração de tal temperatura de convergência ($T_x=1795$ (K)) é correta.

4.1. Simulação da Estabilização da Chama em um Queimador

4.1.1. Descrição do Queimador

A parte do queimador que está sendo simulada é mostrada na Figura 4.1.1. A injeção de gás ocorre através de um orifício de 1 mm de diâmetro, localizado a uma distância de 10 mm da base do queimador. O gás injetado é metano. Como mostrado então para a simulação, a taxa de alimentação de gás é (0,1) com adição de nitrogênio a taxas de 0%, 1,0%, 1,5% e 2,0% no regime de escoamento laminar (0,1) definido por Lacerda (2000), conforme a seguinte equação:

A Tabela 4.1.1 mostra os valores de velocidade de alimentação de gás e de nitrogênio, a velocidade de alimentação de gás e de nitrogênio, em massa, no escoamento.

Tabela 4.1.1. Valores de velocidade de alimentação de gás e de nitrogênio, em massa, no escoamento laminar (0,1) definido por Lacerda (2000).

Velocidade de alimentação de gás (m/s)	Velocidade de alimentação de nitrogênio (m/s)	% N ₂ no combustível (base mássica)
0,1	0,0	0,00
0,1	0,001	0,01
0,1	0,002	0,02
0,1	0,003	0,03

As simulações foram realizadas com as condições de contorno mostradas na Figura 4.1.1. O gás injetado é metano e a temperatura de entrada é de 300 K. A temperatura de saída é de 1795 K. A velocidade de alimentação de gás é de 0,1 m/s e a velocidade de alimentação de nitrogênio é de 0,0 m/s.

CAPÍTULO 4 - SIMULAÇÕES DO EXPERIMENTO COM INJEÇÃO DE ÁGUA PARA UM COMBUSTÍVEL NITROGENADO

4.1. Simulações considerando-se traços de amônia no combustível

4.1.1. Descrição das simulações

A partir do experimento 2 realizado por Lacava (2000), onde houve injeção de água simulando um resíduo aquoso, simulou-se quatro novos casos, nos quais supôs-se a presença de um combustível nitrogenado. Considerou-se então para o experimento 2, que no combustível injetado (GLP) fora adicionado traços de amônia nas seguintes quantidades: 0,5%, 1,0%, 1,5% e 2,0%, em relação à vazão mássica de combustível (GLP) injetada por Lacava (2000), e simulou-se cada caso.

A Tabela 32 mostra para cada caso simulado a quantidade de amônia considerada, e conseqüentemente a porcentagem de nitrogênio, em massa, no combustível.

TABELA 32- Especificação do combustível nos casos simulados, nos quais supôs-se a adição de amônia (experimento 2) .

Casos	Vazão mássica de GLP (g/s)	Adição de NH ₃ (%)	Vazão mássica de NH ₃ (g/s)	Vazão mássica total de combustível (g/s)	% N no combustível (base mássica)
1	2,91	0,5	0,01455	2,92	0,40
2	2,91	1,0	0,02910	2,94	0,81
3	2,91	1,5	0,04365	2,95	1,21
4	2,91	2,0	0,05820	2,97	1,61

As adições de amônia, nas quantidades citadas, não alteraram o tempo de residência na zona de estabilização de chama, que entre outras variáveis

depende da vazão mássica total e da massa molecular média dos gases (equação (27)), já que tais variáveis alteraram-se muito pouco em relação ao experimento original (sem injeção de amônia). Além disso, comparando-se a TA (equação (34)) para caso de máxima adição de amônia (2,0% da massa de combustível injetada no experimento), com a TA calculada para o experimento, levando-se em conta o vapor de água e o ar de nebulização do resíduo, obteve-se discrepância de ((-) 0,17%).

Portanto, simulou-se a zona de estabilização de chama para os casos onde se injetou amônia com a mesma temperatura de convergência e o mesmo tempo de residência para qual o experimento 2 fora ajustado ($T_x=1795$ (K)). Da mesma forma que para tais casos, a zona de pós-chama foi simulada sob o perfil de temperatura referente a tal temperatura de convergência (Figura 23, $T_x=1795$ (K)).

4.1.2. Resultados das simulações

Simulando-se então os quatro casos propostos no item 4.1.1, observou-se que quanto maior a proporção de amônia no combustível maior a formação de NO na zona de estabilização de chama. Aplicando-se a equação (22) aos casos simulados, substituindo-se na mesma o combustível pela amônia, os resultados mostraram para todos eles que mais de 99,98% da amônia injetada fora destruída na zona de estabilização de chama. A Tabela 33 mostra as concentrações finais dos gases obtidas através das simulações para os casos onde se injetou amônia, assim como para o caso original experimentado por Lacava (2000).

Por outro lado, a taxa de geração de NO decaiu à medida que se aumentou a quantidade de amônia na chama. Aplicando-se a equação (38), que define a quantidade de nitrogênio do combustível convertida à NO, N_{NO} , aos quatro casos simulados, os resultados concordaram com a afirmação de Lighty & Verant (1998). Estes a partir de resultados obtidos em um incinerador tipo forno rotativo, afirmaram que tal quantidade decai com o

aumento da quantidade de nitrogênio no combustível, como mostra a Figura 25. A Figura 26 mostra a evolução da concentração de NO, em função da quantidade de nitrogênio no combustível.

TABELA 33- Concentrações finais dos gases O_2 , CO_2 , CO , NO e NH_3 , em base seca, para o final do incinerador, referente aos casos simulados com e sem adição de amônia (experimento 2).

Espécies	Casos				
	s/ NH_3	0,5 % (NH_3)	1,0% (NH_3)	1,5% (NH_3)	2,0% (NH_3)
CO_2 (%)	12,40	12,40	12,40	12,40	12,41
O_2 (%)	2,89	2,84	2,79	2,75	2,70
CO (%)	0	0	0	0	0
NO (ppm)	65,69	374,77	579,85	751,22	894,18
NH_3 (ppm)	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00

$$N_{NO} = \left[\left(\frac{X_{NO.sai}}{X_{N.en}} \right) \right] \cdot 100\% \quad (38)$$

Sendo: $X_{NO.sai}$ a fração molar da espécie NO na saída do incinerador e $X_{N.en}$ a fração molar de nitrogênio presente no combustível injetado na fornalha.

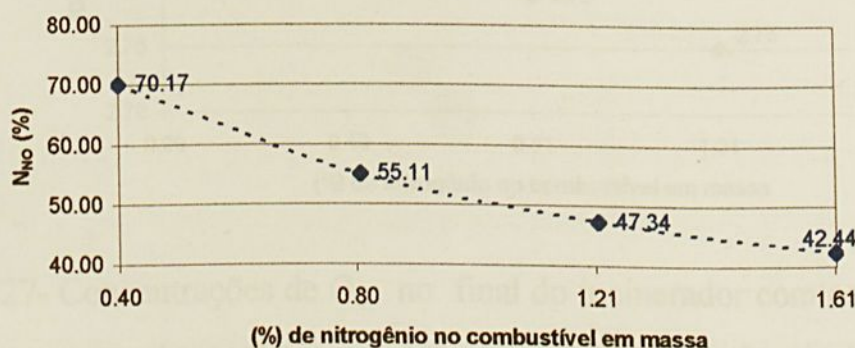


FIGURA 25- Quantidades de nitrogênio presentes nos combustível convertidas a NO , obtidas através das simulações realizadas para os casos nos quais injetou-se amônia.

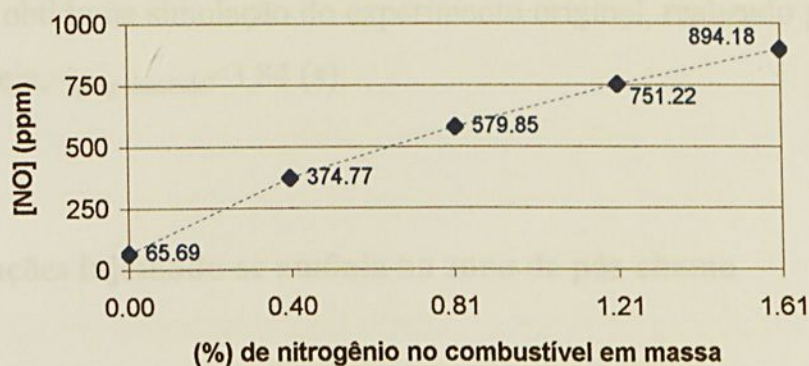


FIGURA 26- Concentrações de NO no final do incinerador com os aumentos propostos para a quantidade de amônia no combustível.

A concentração de O_2 no final do incinerador, decaiu com o aumento da quantidade de amônia no combustível, como previsto pelo mecanismo de reações referente a decomposição térmica da amônia. Entretanto, a taxa de consumo de O_2 manteve-se praticamente constante com tal aumento. A Figura 27 mostra para a concentração de O_2 os mesmos resultados que a Figura 25 apresenta para a concentração de NO.

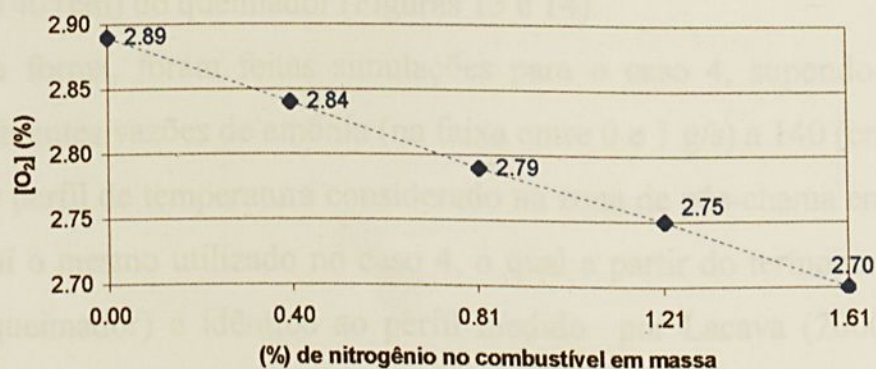


FIGURA 27- Concentrações de O_2 no final do incinerador com os aumentos propostos para a quantidade de amônia no combustível.

O tempo de residência obtido para a zona de pós-chama (t_{plug} simulado) nos casos de injeção de amônia manteve-se o mesmo em todos os casos:

idêntico ao obtido na simulação do experimento original, realizado por Lacava (2000), ou seja, $t_{\text{plug simulado}} = 3,84$ (s).

4.2. Simulações injetando-se amônia na zona de pós-chama

4.2.1. Descrição das simulações

O caso 4 simulado anteriormente, no qual se adicionou maior traço de amônia no combustível (2%), foi o que apresentou maior formação de NO. A partir então deste caso, fez-se simulações considerando-se a injeção de amônia na zona de pós-chama.

Para se escolher em que ponto do incinerador se injetaria a amônia, levou-se em consideração Turns (1996), que relata que a conversão $\text{NO} \rightarrow \text{N}_2$ pela amônia é mais eficiente na faixa de temperatura entre 1200 (°C) e 1250 (°C). Como a medida de temperatura tomada por Lacava (2000) através do termopar 4 (1223 (K)) no experimento 2 está compreendida em tal faixa de temperatura, considerou-se o ponto de injeção de amônia na mesma altura de tal termopar: 140 (cm) do queimador (Figuras 13 e 14).

Desta forma, foram feitas simulações para o caso 4, supondo-se a injeção de diferentes vazões de amônia (na faixa entre 0 e 1 g/s) a 140 (cm) do queimador. O perfil de temperatura considerado na zona de pós-chama em tais simulações foi o mesmo utilizado no caso 4, o qual a partir do termopar 3 (a 105 cm do queimador) é idêntico ao perfil medido por Lacava (2000) no experimento 2. As flutuações de temperatura, causadas pela injeção de amônia foram negligenciadas.

Aliás, nas simulações realizadas a única alteração em relação à metodologia utilizada para se simular o caso 4, foi que a zona de pós-chama foi dividida em dois reatores *plug flow*: um entre o final da zona de estabilização de chama e o ponto de injeção de amônia em série com outro

deste ponto até o final do incinerador. A Figura 28 mostra a configuração de reatores utilizada.

Na interface entre os dois reatores *plug flow*, para se calcular as frações molares de entrada para o segundo reator (a jusante da injeção de amônia), considerou-se a diluição das espécies químicas, nos gases de combustão, provenientes do primeiro reator *plug flow*, que ocorreu devido a injeção de amônia. Assim, as frações molares de entrada no segundo reator *plug flow* das espécies *i* (exceto a amônia), foram obtidas através da equação (39), e a fração molar da amônia foi obtida pela equação (40).

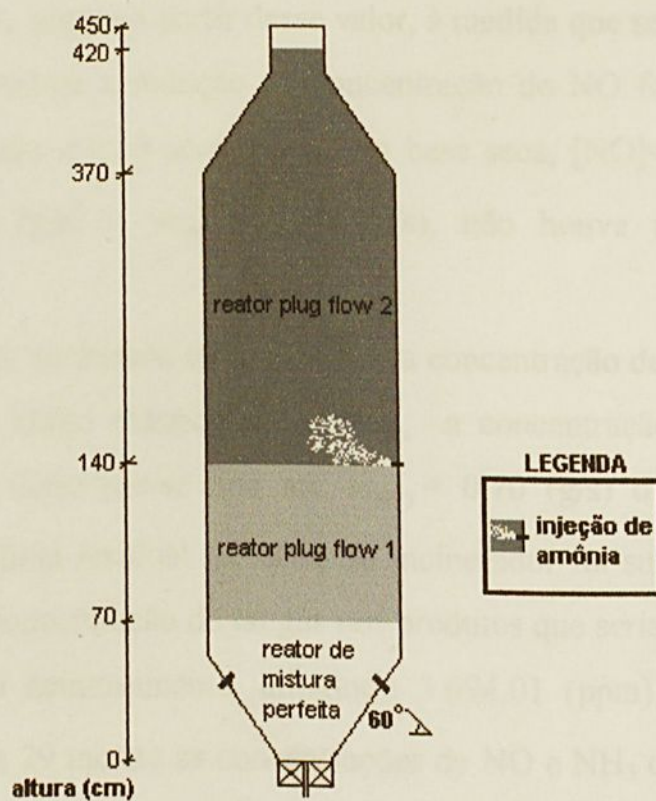


FIGURA 28- Configuração de reatores utilizada para se simular a injeção de amônia na zona de pós-chama.

$$X_{i,ju} = \frac{\dot{q}_{plug,mo}}{\dot{q}_{plug,mo} + \dot{q}_{NH_3}} \cdot X_{i,mo} \quad (39)$$

Sendo: $\dot{q}_{plug,mo}$ a vazão volumétrica a montante da injeção de amônia, \dot{q}_{NH_3} a vazão volumétrica de amônia injetada, $X_{i,mo}$ a fração molar da espécie i no final do primeiro reator *plug flow*.

$$X_{NH_3} = \left(1 - \sum X_{i,ju}\right) \quad (40)$$

4.2.2. Resultados das simulações

As simulações mostraram que para uma vazão mássica de amônia de $\dot{m}_{NH_3} = 0,03$ (g/s) a concentração de NO, na saída do incinerador caiu 90,50% em relação ao caso 4, porém a partir desse valor, à medida que se aumentou a vazão mássica de amônia a redução da concentração de NO foi suave, até $\dot{m}_{NH_3} = 0,90$ (g/s), para o qual se atingiu, em base seca, $[NO] = 1,00$ (ppm). Entre $\dot{m}_{NH_3} = 0,90$ (g/s) e $\dot{m}_{NH_3} = 1,00$ (g/s), não houve alteração na concentração de NO.

Por outro lado, ao mesmo tempo em que a concentração de NO reduziu com o aumento da vazão mássica de amônia, a concentração de amônia residual aumentou. Observou-se que até $\dot{m}_{NH_3} = 0,70$ (g/s) o aumento da concentração de amônia residual na saída do incinerador foi suave, porém a partir deste valor a concentração de tal gás nos produtos que seriam emitidos à atmosfera aumentou acintosamente, atingindo 3.694,01 (ppm) para $\dot{m}_{NH_3} = 1,00$ (g/s). A Figura 29 mostra as concentrações de NO e NH₃ obtidas para a saída do incinerador, através das simulações realizadas, em função da vazão mássica de amônia injetada.

Levando-se em conta Cho (1994), considerou-se o limite de 10 (ppm) como aceitável. Então, para a concentração de amônia residual na saída do incinerador, conclui-se observando-se a Figura 29 que para $\dot{m}_{NH_3} = 0,65$ (g/s) atingir-se-ia uma redução de NO quase total (98,40(%)), e emitir-se-ia uma concentração de amônia residual aceitável.

Observando-se as evoluções das concentrações dos gases ao longo do segundo reator *plug flow* para $\dot{m}_{NH_3} = 0,65$ (g/s), mostradas na Figura 30, observou-se que a concentração de NO cai acentuadamente com a injeção de amônia, e as concentrações das duas espécies se igualam a 240 (cm) do queimador.

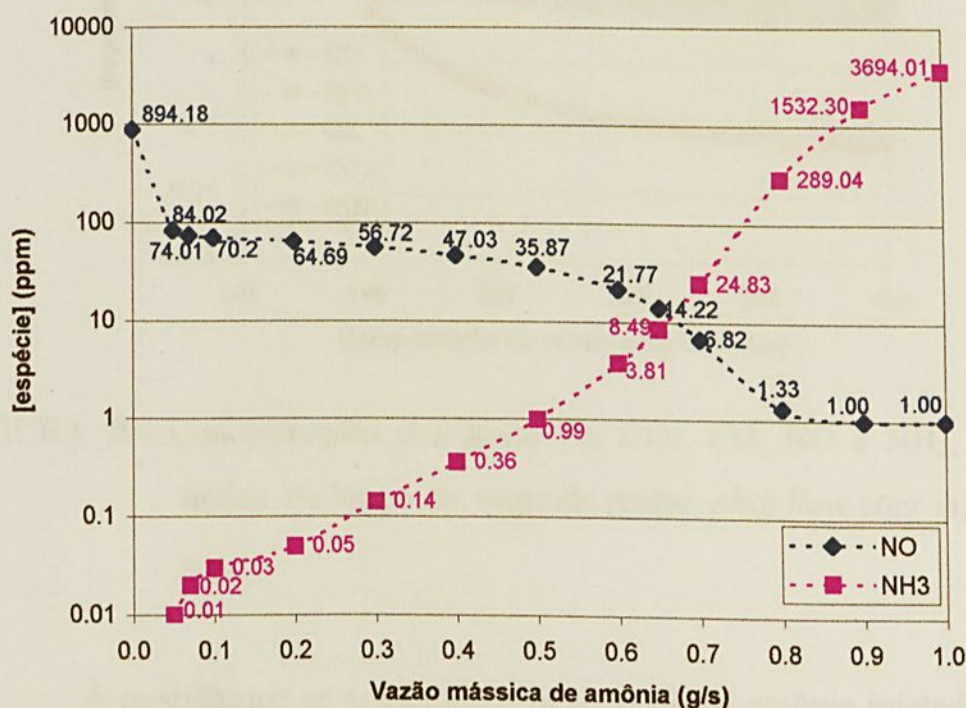


FIGURA 29- Concentrações de NO e NH₃ obtidas para a saída do incinerador, através das simulações realizadas, em função da vazão mássica de amônia injetada a 140 (cm) do queimador.

A Tabela 34 mostra as concentrações finais dos gases O₂, CO₂, CO, NO e NH₃, em base seca, na saída do incinerador, para cada simulação realizada. Observa-se nesta, além do relatado para as concentrações de NO e NH₃, que a concentração O₂ diminuiu à medida que se aumentou a quantidade de amônia injetada. Para $\dot{m}_{NH_3} = 0,65$ (g/s), a Figura 30 mostra que a concentração de O₂ diminui mais bruscamente de 140 (cm), quando a amônia foi injetada até 185 (cm) do queimador.

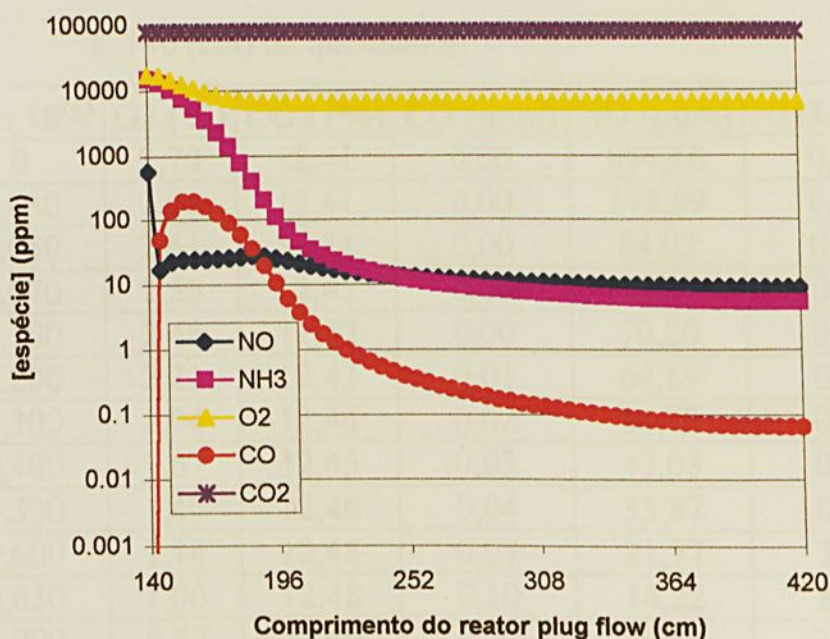


FIGURA 30- Concentrações dos gases O_2 , CO_2 , CO , NO e NH_3 , em base úmida, ao longo do segundo reator *plug flow* com $\dot{m}_{NH_3} = 0,65$ (g/s).

À medida que se aumentou a quantidade de amônia injetada, devido ao aumento da vazão volumétrica total, o tempo de residência no segundo reator *plug flow* aumentou sensivelmente. A Tabela 35 mostra o tempo de residência para cada reator, e o tempo e residência total obtido nas simulações.

TABELA 34- Concentrações dos gases de combustão, em base seca, obtidas para a saída do incinerador, simulando-se a injeção de amônia a 140 (cm) do queimador.

\dot{m}_{NH_3} (g/s)	O ₂ (%)	CO ₂ (%)	CO (ppm)	NO (ppm)	NH ₃ (ppm)
0	2,70	12,41	0,00	894,18	0,00
0,030	2,66	12,41	0,00	172,89	0,00
0,050	2,61	12,41	0,00	84,02	0,01
0,070	2,56	12,41	0,00	74,01	0,02
0,100	2,48	12,42	0,00	70,20	0,03
0,200	2,21	12,43	0,01	64,69	0,05
0,300	1,94	12,44	0,02	56,72	0,14
0,400	1,67	12,45	0,03	47,03	0,36
0,500	1,40	12,46	0,04	35,87	0,99
0,600	1,14	12,48	0,07	21,77	3,81
0,650	1,00	12,48	0,10	14,22	8,49
0,700	0,87	12,49	0,20	6,82	24,83
0,800	0,62	12,49	2,28	1,33	289,04
0,900	0,45	12,48	16,73	1,00	1.532,30
1,000	0,35	12,46	53,17	1,00	3.694,01

TABELA 35- Tempo de residência parcial e total, obtidos simulando-se a injeção de amônia a 140 (cm) do queimador.

\dot{m}_{NH_3} (g/s)	t_x (s)	$t_{plug,simulado}$ (s) 1º reator	$t_{plug,simulado}$ (s) 2º reator	Total (s)
0	0,46	3,84		4,30
0,030	0,46	0,71	3,12	4,29
0,050	0,46	0,71	3,11	4,28
0,070	0,46	0,71	3,11	4,28
0,100	0,46	0,71	3,11	4,28
0,200	0,46	0,71	3,10	4,27
0,300	0,46	0,71	3,09	4,26
0,400	0,46	0,71	3,08	4,25
0,500	0,46	0,71	3,07	4,24
0,600	0,46	0,71	3,07	4,24
0,650	0,46	0,71	3,06	4,23
0,700	0,46	0,71	3,06	4,23
0,800	0,46	0,71	3,05	4,22
0,900	0,46	0,71	3,04	4,21
1,000	0,46	0,71	3,03	4,20

CAPÍTULO 5 - CONCLUSÕES E COMENTÁRIOS

No trabalho desenvolvido a premissa de que um incinerador de resíduos aquosos pode ser simulado através de um mecanismo de reações elementares de decomposição térmica, associado a uma configuração de reatores que consta de um reator de mistura perfeita em série com um reator *plug flow*, mostrou-se viável.

A partir da metodologia de simulação proposta, na qual utilizou-se como ferramenta o pacote computacional CHEMKIN, aplicada aos dois experimentos realizados por Lacava (2000), constatou-se que:

- Adotando-se no *Aurora*, para se simular a zona de estabilização de chama, a opção de resolução que permite que uma temperatura de convergência seja fixada, foi possível se ajustar a simulação à concentração de NO medida na saída do incinerador, atingido-se ótima concordância para as concentrações dos gases O₂, CO₂ e CO medidas na mesma posição.
- Os tempos de residência obtidos através das simulações da zona de apagamento de chama, mostraram boa concordância com os valores estimados para ambos experimentos.
- As concentrações dos gases de combustão provenientes da zona de estabilização de chama, onde a conversão energética do combustível foi total, pouco se alteraram na zona de apagamento de chama.

Utilizando-se a metodologia de simulação desenvolvida, para se simular o experimento com adição de água realizado por Lacava (2000) supondo-se um combustível nitrogenado, pode-se concluir através das simulações realizadas para a faixa de nitrogênio adicionada ao combustível (0,4% a 1,61%), e para as vazões de combustível, ar e resíduo correspondentes a tal experimento, que:

- A concentração de NO aumentou consideravelmente com a presença de nitrogênio no combustível, de modo que quanto maior a quantidade de nitrogênio no combustível, maior a concentração de NO emitida à atmosfera.

- A taxa de geração de NO diminuiu com o aumento da quantidade de nitrogênio presente no combustível, ou seja, a quantidade de nitrogênio convertida a NO, diminuiu com tal aumento.

- Para se converter o nitrogênio do combustível à NO houve consumo de oxigênio, de forma que a taxa de oxigênio no combustível consumido manteve-se praticamente constante com o aumento de nitrogênio no combustível.

Para o caso no qual supôs maior quantidade de nitrogênio no combustível (1,61%), e conseqüentemente obteve-se maior concentração de NO na saída do incinerador, simulou-se a injeção de diferentes vazões de amônia (na faixa entre 0 e 1 g/s) a 140 (cm) do queimador, e constatou-se que:

- Para $\dot{m}_{NH_3} = 0,03$ (g/s) a concentração de NO, na saída do incinerador caiu 90,50% , porém a partir desse valor, à medida que se aumentou a vazão mássica de amônia a redução da concentração de NO foi suave.

- Ao mesmo tempo em que a concentração de NO reduziu com o aumento da vazão mássica de amônia, a concentração de amônia residual aumentou. Observou-se que até $\dot{m}_{NH_3} = 0,70$ (g/s) o aumento da concentração de amônia residual na saída do incinerador foi suave, porém a partir deste valor a concentração de tal gás nos produtos que seriam emitidos à atmosfera aumentou acintosamente, atingindo-se 3.694,01 (ppm) para $\dot{m}_{NH_3} = 1,00$ (g/s).

- Para $\dot{m}_{NH_3} = 0,65$ (g/s), a concentração de NO e amônia residual, estariam dentro de limites razoáveis a serem emitidos à atmosfera.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- ASSOCIAÇÃO BRASILEIRA DE NORMAS TÉCNICAS. *Incineração de resíduos perigosos: Normas de desempenho*. NBR. 11175. Rio de Janeiro: ABNT, 1990.
- BEÉR, J.M. Low NO_x burners for boilers, furnaces and gas turbines; drive towards the lower bounds of NO_x emissions. *Combust. Science and Technology*, v.121, p. 169-191, 1996.
- BEÉR, J.M., LEE K.B. The effect the residence time distribution on the performance and efficiency the combustors. In: *10th Symp. (Int.) on Combustion, The Combustion Institute*, p. 1187-1202, 1965.
- BIZZO, W. A. Desafios tecnológicos para a incineração de resíduos perigosos. *Rev. Brasileira de Engenharia Química*, v. 15, n.2 , p. 45-50, 1995.
- BOWMAN, C.T. Kinetics of pollutant formation and destruction in combustion. *Progress in Energy and Combustion Science*, v. 1, p. 33-45, 1975.
- CHIGIER, N.A. *Energy, Combustion and Environment*. New York: McGraw-Hill, 1981.
- CARVALHO, J.A., GOTAC, P.R. Análise de um incinerador de resíduos aquosos. *Rev. Brasileira de Engenharia Química*, v. 8, n.1, p. 21-24, 1993.
- CAVALCANTI, J.E. O que está sendo feito com os resíduos industriais? - A década de 90 é dos resíduos sólidos. *Rev. Saneamento Ambiental*, v.54, p.17-18, 1998.
- CHO, S.M. Properly apply selective catalytic reduction for NO_x removal. *Chemical Engineering Progress*. v.90, n.1, p.39-45, 1994.

- DEMPSEY, C.R., OPPELT, T.E. Incineration of hazardous waste: a critical review update. *Journal of the Air and Waste Management Association*, v. 43, 1993.
- EHRHARDT, K., TOQAN, M., JANSOHN, P., TEARE, J.D., BEER, J.M., SYBON, G., LEUCKEL, W. Modeling of NO_x Reburning in a Pilot-Scale Furnace Using Detailed Reaction-Kinetics *Combustion Science and Technology*, v.131, p.131-146,1998.
- EXNER, J.H. *Desintoxication of hazardous waste*. Michigan: Ann Arbor Science, 1982.
- FERREIRA, M.A Abordagem Teórica e Experimental de Combustores do Tipo Tubo de Rijke. Tese de Doutorado. Guaratingurá, 1997, UNESP (FEG).
- GARDINER, W., SMITH, G., BOWMAN, T., FRENKLACH, M. Gri-Mech: Detailed reaction mechanism for small hydrocarbons combustion [online]. Disponível na World Web < http://euler.berkeley.edu/gri_mech/>, 2000.
- GROSZEK, F. O que está sendo feito com os resíduos industriais? - A deficiência na fiscalização. *Rev. Saneamento Ambiental*, v. 54, p.18-19, 1998.
- KEE, R.J., RUPLEY, J.A., MILLER, J.A. Chemkin III: A Fortran Chemical Kinetics for the analysis of gas-phase chemical and plasma kinetics. Sandia Laboratories. SAND96-8216, 1986.
- KIM, T.J., YETTER, R.A., DRYER, F.L. New results on moist CO oxidation: high pressure, high temperature experiments and comprehensive kinetic modeling. In: *25th Symposium (Int.) on Combustion*, The Combustion Institute, p.59 - 766, 1994.

- KONNOV, A.A . Detailed reaction mechanism for small hydrocarbons combustion. Versão 0.4 [on line]. Disponível na World Web <<http://homepages.vub.ac.be/~akonnov/>>, 1998.
- KOROBENICHEV, O. P., SHVARTSBERG, V. M., ILIN, S. B. Destruction Chemistry of Organophosphorus Compounds in Hydrogen-Oxygen Flames. *Combustion Explosion and Shock Waves*, v.33, p. 270-283, 1997
- KUO, Keneth K. *Principles of Combustion*. New York: John Wiley & Sons, 1986, 810 p.
- HEAP M.P., LOWES T.M., WALSMY R. Emission of nitric oxide from large turbulent diffusion flames. In: *14th Symp. (Int.) on Combustion, The Combustion Institute*, p. 883-895, 1972.
- HIESH, T.C.A., DAHM, W.J.A., DRISCOLL, J.F. Scalling Law for NO_x performance of burners and furnaces from 30 kW to 12 MW. *Combustion and flame*, v. 114, p. 54-80, 1998.
- INSTITUTO BRASILEIRO DO PETRÓLEO. *Curso de informação sobre combustíveis e combustão*. Rio de janeiro, 1986. Apostila.
- LACAVALA, P.T. *Investigação experimental do enriquecimento do ar na incineração de resíduos aquosos*. Tese de doutorado. São José dos Campos, 2000, 282 p. Instituto Tecnológico Aeronáutico (ITA).
- LACAVALA, P.T., PIMENTA, A.P., VERAS C.A.G., CARVALHO J.A., Theoretical analysis of aqueous residues incineration with oxygen enriched flames. *International Communications in Heat and Mass Transfer*, v. 26, n.7, p.1029-1040, 1999.
- LILLEY, D.G. Swirl flows in Combustion: a Review . *AIAA journal*, v.15, n. 8, p. 1063-1078, 1977.

- LINAK, W.P., SRIVASTAVA, R.K., WENDT, J.O.L. Sorbent capture of nickel, lead and cadmium in a laboratory swirl flame incinerator. *Combustion and Flame*, v. 100, p. 241-250, 1995.
- LINAK, W.P., WENDT, J.O.L. Nitrogen oxide/chlorine interactions in a laboratory swirl flame combustor. *Combustion Science and Technology*, v.115, p. 69-82, 1996.
- LYGHT J.S., VERANT J.M. The role of research in practical incineration systems – A look at the past and the future. In: *27th Symp. (Int.) on Combustion, The Combustion Institute*, p. 1255-1273, 1998.
- MAO, F., KRETKOWISK, D., BARAT, R.B. A two zone turbulent flow reactor for studies of staged combustion of simulated hazardous wastes. *Combustion Science and Technology*, v.102, p.145-164, 1994.
- MAO, F., BARAT, R.B. Minimizing of NO during staged combustion of CH_3NH_2 . *Combustion and Flame*, v.105, p. 557-568, 1996.
- Manual plug* [CD-ROM]. Plug: A program for the analysis of the plug flow reactors with gas-phase and surface chemistry. Manual do usuário (parte do CD-ROM de instalação). SAND96-8211, 2000.
- Manual thermodynamic database* [CD-ROM]. The Chemkin thermodynamic database. Manual do usuário (parte do CD-ROM de instalação). SAND87-8215B, 2000.
- Manual transport* [CD-ROM]. Transport: A software package for the evaluation of gas-phase, multicomponent transport properties. Manual do usuário (parte do CD-ROM de instalação). SAND86-8246B, 2000.
- MELO, G.F. Estudo de enriquecimento do ar de combustão com oxigênio em incineradores tipo forno rotativo. Dissertação de mestrado. Guaratinguetá, 1997, 81 p. UNESP (FEG).

- MILLER, J. A., BOWMAN, C. T. Mechanism and Modeling of Nitrogen Chemistry in Combustion. *Progress in Energy and Combustion Science*, v.15, p. 287-338, 1989.
- PFEFFERLE, L.D., CHURCHILL, S.W. NO_x Production from the Combustion of Ethane Doped with Ammonia in a Thermally Stabilized Plug Flow Burner, *Combustion Science and Technology*, v. 49, p.235-249, 1986.
- PERRY, R.E., CHILTON, C.H. *Manual de engenharia química*. Guanabara Koogan, 1980.
- PURI, I. K., SESHADRI, K., SMOOKE, M. D., KEYES, D. E. A Comparison Between Numerical-Calculations and Experimental Measurements of the Structure of a Counterflow Methane Air Diffusion Flame. *Combustion Science and Technology*, v.56, p.1-22, 1987.
- Reaction design [on-line]. Products & Services:Chemkin software. Disponível na WorldWeb.<http://www.reactiondesign.com/mkt_combustion.html>, 2001. Citado como: Reaction Design (2001a).
- Reaction design [on-line]. Products & Services:Chemkin software. Disponível na WorldWeb.<http://www.reactiondesign.com/chemkin_overview.html>, 2001. Citado como: Reaction Design (2001b)
- Reaction design [on-line]. Products & Services:Chemkin software. Disponível na WorldWeb.<http://www.reactiondesign.com/chemkint_apps.html>, 2001. Citado como: Reaction Design (2001c)
- SANTOLERI, J. J., Incineration Technology- State- of-The Art Rewiew. In: *Seminar of hazardous waste incinerator permit writers inspector and operators*, p. 1-3, EPA , 1886.

SAXENA, E.C.; JOTSHI C.K. Management and combustion of hazardous wastes. *Prog. Energy Combustion*, v. 22, p. 401- 425, 1996.

URNS, S.R. An Introduction to Combustion: Concepts and Applications. McGraw-Hill, 1996.

WILLIAMS, Forman A. *Combustion Theory*. Benjamin /Cummings Publishing, 1985, 679p.

WOOD, S.C. Selective the right NO_x control technology. *Chemical Enginneering Progress* . v. 90, n.1, p.32-38, 1994.

XU, H., SMOOT, L. D., HILL, S. C. A Reduced Kinetic-Model For NO_x Reduction By Advanced Reburning. *Energy & Fuels*, v. 12, p.1278-1289, 1998.

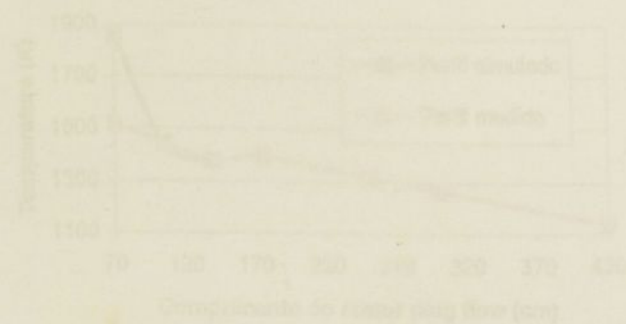


FIGURA 31 - Perfil da temperatura referente a simulação da zona de pré-queima ($T_0 = 1853$ (K); experimento 1)

ANEXO A - AJUSTE DA SIMULAÇÃO DO EXPERIMENTO

SEM INJEÇÃO DE ÁGUA PARA A

CONCENTRAÇÃO DE NO

Este anexo tem por objetivo apresentar o ajuste da simulação do experimento 1 (no qual Lacava (2000) não injetou água) à concentração de NO medida, da mesma forma que se procedeu com o experimento 2 no item 3.2.5.

Simulando-se então a zona de estabilização de chama para o experimento 1 a uma temperatura de convergência $T_x = 1863$ (K), e conectando-se os gases gerados em tal zona em um reator *plug flow*, através da metodologia adotada, obteve-se a concentração de NO medida por Lacava (2000), em base seca, na saída do incinerador. Obteve-se para tal experimento, através da equação (37), uma $T_A = 2.256,5$ (K), maior que $T_x = 1863$ (K), viabilizando o ajuste. O perfil de temperatura utilizado na simulação da zona de apagamento de chama de tal experimento é apresentado através da Figura 31. A Tabela 36 mostra a coincidência entre as concentrações dos gases medidas por Lacava (2000) na saída do incinerador, e as concentrações obtidas através da simulação de tal experimento utilizando $T_x = 1863$ (K).

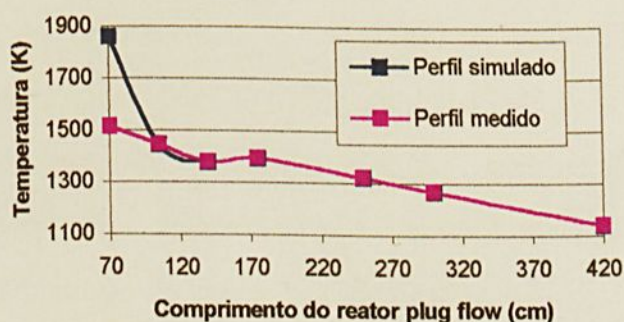


FIGURA 31- Perfil de temperatura referente a simulação da zona de pós-chama ($T_x = 1863$ (K), experimento 1).

TABELA 36- Comparação entre as concentrações dos gases O_2 , CO_2 , CO e NO , em base seca, para o final do incinerador, entre o caso simulado a $T_x=1863$ (K), e as medidas tomadas por Lacava (2000) (experimento 1) .

Espécies	Simulação	Medidas
	$T_x = 1863$ (K)	TF = 1516 (K)
CO_2 (%)	12,49	$12,57 \pm 0,11$
O_2 (%)	2,78	$2,82 \pm 0,14$
CO (%)	0	0
NO (ppm)	206,33	$204,02 \pm 6,38$

**ANEXO B – CÁLCULO DO NÚMERO DE REYNOLDS PARA
OS EXPERIMENTOS REALIZADOS POR
LAVACA (2000)**

Escoamentos turbulentos em incineradores significa um melhor grau de mistura entre os gases de combustão. Segundo Carvalho & Gotaç (1993) o regime é considerado turbulento em câmaras de combustão deste tipo para $Re > 5000$. Através da equação (41) apresentada pelos mesmos autores calculou-se o número de Reynolds (Re) nas posições referentes aos termopares 3, 4 e 6, Figura 13, para os experimentos 1 e 2, realizados por Lavaca (2000) no incinerador do INPE. Através dos resultados mostrados na Tabela 37, pode-se observar que para tais posições o escoamento gasoso no incinerador do INPE consiste em um escoamento intermediário entre o turbulento e o laminar.

$$Re = \frac{4 \cdot \dot{m}_t}{\pi \cdot \mu_m \cdot D} \quad (41)$$

Sendo: D o diâmetro do incinerador. As simulações realizadas mostraram através de seus resultados que para as posições dos termopares 3,4, e 6, a composição gasosa é a mesma do final do incinerador, portanto a viscosidade foi calculada considerando-se a temperatura referente à medida tomada pelo termopar e a composição gasosa de saída do incinerador.

TABELA 37 - Número de Reynolds para os experimentos 1 e 2 realizados por Lacava (2000).

Experimento 1					
\dot{m}_r (g/s)	Termopar	Temperatura (K)	Viscosidade (cP)	D (cm)	Re
52,23	3	1.445	0,0475	60	2.333
	4	1.379	0,0460		2.410
	6	1.268	0,0439		2.525

Experimento 2					
\dot{m}_r (g/s)	Termopar	Temperatura (K)	viscosidade (cP)	D (cm)	Re
64,73	3	1.247	0,0416	60	3.302
	4	1.223	0,0414		3.318
	6	1.132	0,0390		3.522



unesp

