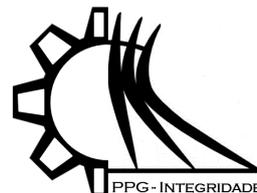




ISSN 2447-6102



Artigo

# Modelagem CFD da combustão com mecanismo de cinética química detalhada para escoamento incompressível laminar

Cunha, F.A.<sup>1\*</sup>, Ferracuti, P.<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Universidade de Brasília; fabioalfaia@unb.br\*

<sup>2</sup> Universidade de Brasília; pedro0ferracuti@gmail.com

Received: 06/11/2020; Accepted: 05/12/2020; Published: 31/12/2020

**Resumo:** Este trabalho apresenta um modelo de fluidodinâmica computacional da combustão com mecanismo de cinética química detalhada para escoamento incompressível laminar. Na modelagem CFD, o campo de velocidade é obtido pela solução das equações de Navier-Stokes, o campo de temperatura é obtido pela solução de uma equação de conservação da energia e a composição da mistura de gases é obtida pela solução de equações de conservação de espécies químicas individuais e o mecanismo de reação GRI-MECH 3.0 é utilizado para o cálculo da cinética química. O método numérico para discretização de uma equação genérica de conservação e a técnica de divisão de operadores usada para a avaliação dos termos de fonte químicos são apresentados em detalhes. Um código computacional programado na linguagem Matlab é utilizado para simulação de um caso de teste e dados experimentais de uma chama de difusão laminar de metano são utilizados para validação da modelagem CFD proposta.

**Palavras-chave:** fluidodinâmica computacional, combustão de metano, mecanismo de cinética química detalhada.

## CFD modeling of the combustion with detailed chemical kinetics mechanism for incompressible laminar flow

**Abstract:** This work presents a computational fluid dynamics modeling of combustion with detailed chemical kinetics mechanism for incompressible laminar flow. In CFD modeling, the velocity field is obtained by solving the Navier-Stokes equations, the temperature field is obtained by solving an energy conservation equation, and the gas mixture composition is obtained by solving the conservation equations of individual chemical species and the GRI-MECH 3.0 reaction mechanism is used in the calculation of chemical kinetics. The numerical method for discretization of a generic conservation equation and the operator splitting technique used for the evaluation of chemical source terms are presented in detail. A computer code programmed in the Matlab language is used to simulate a test case and experimental data from a laminar diffusion flame of methane are used to validate the proposed CFD modeling of combustion.

**Key words:** computational fluid dynamics, combustion of methane, detailed chemical kinetics mechanism.

### 1. Introdução

A melhoria do projeto de máquinas térmicas pode minimizar a emissão de poluentes, o que é uma tarefa complexa e por isso necessita de uma boa descrição da combustão, que pode ser obtida por uma combinação de experimentação em laboratório e cálculos teóricos. Muito esforço foi realizado em décadas passadas para a descrição da combustão considerando somente a cinética química, mas tais estudos não conseguiram descrever detalhadamente a combustão em equipamentos reais. Uma boa descrição da combustão também requer a determinação espacial da distribuição de espécies químicas, com a zona onde o combustível e oxidante estão em proporção estequiométrica, a chama se estabelece e ocorre a temperatura máxima da reação (Westbrook e Dryer, 1981). Na maioria das máquinas industriais a combustão ocorre em escoamento turbulento, ainda assim, Mitchell,

Sarofim e Clomburg (1980) afirmam que estudo de chamas de difusão laminar auxiliaram na compreensão de estruturas de chamas de difusão turbulentas, cujos formatos podem ser aproximados como chamas laminares enrugadas.

Combustores de chama de Burke-Schumann, que utilizam dois tubos concêntricos para emissão de reagentes, são bastante utilizados em estudos de chamas de difusão, como pode ser visto em Mitchell (1975), Mitchell, Sarofim e Clomburg (1980), Santoro (1983), Smooke (1999), Mcenally e Pfefferle (1999), Bennett et al (2000) e Thomson et al (2005). O combustor de Mitchell (1975) é utilizado como referência para a validação de modelos de simulação 2D axissimétricos até os dias atuais: Dasgupta (2015), Bhowal e Mandal (2016), Azarkhavarani, Lessani e Tabejamaat (2017), Soloklou e Golneshan (2019) e Dasgupta, Juez e Haworth (2019). Dentre os trabalhos citados, o único que simulou a chama de Mitchell (1975) com um mecanismo de reação detalhado foi o de Dasgupta (2015), que utilizou o mecanismo de reação GRI-MECH 3.0, que conta com 53 espécies químicas e 325 passos de reação otimizados para combustão de gás natural, mas negligenciou todas as reações associadas a formação de NO.

A experimentação em laboratório chegou em um nível de excelência já na década de 90, Smooke (1999) e Mcenally e Pfefferle (1999), porém, no mesmo período, as simulações CFD com mecanismos de reação detalhados estavam restritos a poucas situações e envolviam muitas simplificações. Com a grande evolução dos computadores nas últimas décadas, a utilização de mecanismos de reação detalhados e CFD ficou ao alcance da computação pessoal e isso motivou a proposta do presente trabalho, que consiste em um modelo de simulação que considera a fluidodinâmica computacional e combustão gasosa com mecanismo de reação detalhado (GRI-MECH 3.0) para escoamento incompressível laminar.

## 2. Modelagem CFD da combustão

As equações matemáticas necessárias para a modelagem CFD da combustão são apresentadas a seguir.

### 2.1. Modelo matemático de cálculo do campo de velocidade de um escoamento incompressível laminar

Para escoamento incompressível e fluido Newtoniano às equações Navier-Stokes são dadas pelas Eqs. (1) e (2), que expressam a conservação da massa e da quantidade de movimento linear, respectivamente.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \mathbf{u}) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) = -\nabla \cdot (p) + \nabla \cdot (\mu \nabla \mathbf{u}) + (\rho - \rho_\infty)g \quad (2)$$

em que  $\mathbf{u}$  é o vetor velocidade,  $p$  é a pressão,  $\rho$  é a massa específica,  $\mu$  é a viscosidade dinâmica e  $g$  é a aceleração da gravidade. O termo  $(\rho - \rho_\infty)g$  contabiliza o efeito das forças empuxo no fluido.

### 2.2 Modelo matemático para o cálculo do campo de fração de massa de espécies químicas

As reações químicas associadas a combustão são muito rápidas, porém a consideração de taxa de reação infinita pode conduzir a resultados que divergem dos experimentais. A simulação da combustão envolve o cálculo do transporte de espécies individuais e um mecanismo de reação detalhado. Considerando que o fluxo de difusão pode ser aproximado pela Lei de Difusão de Fick, o campo de fração de massa para cada espécie química  $k$  é dado pela seguinte equação de conservação para a fração de massa:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_k) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} Y_k) = \nabla \cdot (\rho D \nabla Y_k) + \dot{\omega}_k, \quad k = 1, \dots, n_s - 1 \quad (3)$$

em que,  $Y_k$  e  $\dot{\omega}_k$  são fração de massa e taxa líquida de produção de uma espécie  $k$ , respectivamente. O coeficiente de difusão das espécies é dado pelo termo  $\rho D$ . O termo  $n_s$  representa o número total de espécies químicas e a fração de massa da espécie  $n_s$  é obtida pela equação:

$$Y_{n_s} = 1 - \sum_{k=1}^{n_s-1} Y_k \quad (4)$$

A taxa líquida de produção de uma espécie  $k$  é obtida pela Eq. (5) em conjunto com o mecanismo de reação.

$$\dot{\omega}_k = W_k \sum_{j=1}^{n_r} (v''_{k,j} - v'_{k,j}) \left[ k_j^f \prod_{k=1}^{n_s} [X_k]^{v'_{k,j}} - k_j^r \prod_{k=1}^{n_s} [X_k]^{v''_{k,j}} \right] \quad (5)$$

em que  $v'_{j,k}$  e  $v''_{j,k}$  são coeficientes estequiométricos dos reagentes e dos produtos, respectivamente, para espécie  $k$  na reação  $j$ . Os termos  $k_j^f$  e  $k_j^r$  são coeficientes de taxa das reações direta e reversa, respectivamente. Os termos  $[X_k]$  e  $n_r$  representam a concentração molar de uma espécie  $k$  e o número total reações químicas, respectivamente.  $W_k$  é a massa molar da espécie  $k$ .

O Instituto de Pesquisa sobre Gás (Gas Research Institute - GRI) em parceria com o departamento de Engenharia Mecânica da Universidade de California, em Berkeley, tem conduzido há algumas décadas pesquisas para determinação de mecanismos de reação realistas para combustão de gás natural. O mecanismo de reação do GRI não incorpora todas as espécies e reações elementares conhecidas para a combustão de gás natural, mas otimiza sua performance com base em uma quantidade expressiva de dados experimentais para uma representação realista de chamas de gás natural e ignição (Smith et al., 1999). Batizada de GRI-Mech 3.0, a versão mais recente do mecanismo de reação possui 325 reações elementares, 53 espécies químicas, inclui formação/destruição de NO e química de requeima. O GRI-MECH 3.0 é uma das principais referências para a combustão de gás natural, por isso foi escolhido para uso no presente estudo para computação das taxas líquidas de produção de espécies química.

### 2.3 Modelo matemático para o cálculo do campo de temperatura

A equação de conservação de energia utilizada no presente estudo é dada na Eq. (6), na qual se admitiu a aproximação de baixo número de Mach, para que a dissipação viscosa pudesse ser negligenciada e para que as mudanças no campo de pressão estivessem associadas somente ao campo de velocidade. Se utilizou a entalpia absoluta como variável dependente para que fosse evitado um termo de fonte rígido devido reação química. A entalpia absoluta é a soma de uma entalpia que leva em consideração a energia associada a ligações químicas (entalpia de formação) e uma entalpia associada apenas à temperatura (entalpia sensível), Turns (2013).

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho h) + \nabla \cdot (\rho u h) = \nabla \cdot \left( \frac{k}{c_p} \nabla h \right) + \nabla q_{rad} \quad (6)$$

em que, os termos  $k$  e  $c_p$  representam a condutividade térmica e o calor específico a pressão constante da mistura de gases, respectivamente. O termo  $\nabla q_{rad}$  contabiliza as perdas de calor por radiação e foi calculado conforme o trabalho de BARLOW et al. (2001), o qual supõe que o meio gasoso é opticamente fino, em que os efeitos da absorção podem ser negligenciados e somente emissão radiativa precisa ser considera.

### 2.4 Propriedades termofísicas

A massa específica da mistura de gases,  $\rho$ , a temperatura,  $T$ , e a pressão,  $p_0$ , são relacionadas pela da equação de estado para um gás ideal:

$$\rho = p_0 \bar{W} / (R_u T) \quad (7)$$

$$\bar{W} = 1 / \sum_{k=1}^{n_s} Y_k / W_k \quad (8)$$

em que,  $p_0$  é a pressão atmosférica (101325Pa) e  $R_u$  é a constante universal dos gases perfeitos (8314.51J/kmol-K).

As dependências do calor específico a pressão constante e da entalpia absoluta específica de cada espécie  $k$  com a temperatura são calculadas com polinômios dados pelas Eqs. (9) e (10), respectivamente, McBride, Gordon e Reno (1993). O calor específico à pressão constante (J/kg-K) e a entalpia absoluta (J/kg) da mistura de gases são calculados pelas Eqs. (11) e (12), respectivamente.

$$\bar{c}_{p,k} / R_u = a_{1,k} + a_{2,k} T + a_{3,k} T^2 + a_{4,k} T^3 + a_{5,k} T^4 \quad (9)$$

$$h_k / R_u = a_{1,k} T + a_{2,k} T^2 / 2 + a_{3,k} T^3 / 3 + a_{4,k} T^4 / 4 + a_{5,k} T^5 / 5 + a_{6,k} \quad (10)$$

$$c_p = \sum_{k=1}^{n_s} Y_k \bar{c}_{p,k} / W_k \quad (11)$$

$$h = \sum_{k=1}^{n_s} h_k Y_k \tag{12}$$

em que, os coeficientes dos polinômios foram obtidos em Smith et al (1999).

A viscosidade (kg/m-s) e a condutividade térmica (W/m-K) de um componente puro são calculadas pelas Eqs. (13) e (14), respectivamente. A viscosidade e a condutividade térmica da mistura de gases são calculadas pelas Eqs. (15) e (16), respectivamente (Bird, Stewart e Lightfoot, 2001).

$$\mu_k = 2,6693 \times 10^{-6} (W_k T)^{1/2} / (\sigma_k^2 \Omega_{\mu,k}) \tag{13}$$

$$k_k = (\bar{c}_{p,k} + 5R_u / 4)(\mu_k / MW_k) \tag{14}$$

$$\mu = \sum_{k=1}^{n_s} X_k \mu_k / (\sum_{j=1}^{n_s} X_j \Theta_{kj}) \tag{15}$$

$$k = \sum_{k=1}^{n_s} X_k k_k / (\sum_{j=1}^{n_s} X_j \Theta_{kj}) \tag{16}$$

$$\Theta_{kj} = 8^{-1/2} (1 + W_k / W_j)^{-1/2} [1 + (\mu_k / \mu_j)^{1/2} (W_j / W_k)^{1/4}]^2 \tag{17}$$

em que,  $X_k$  e  $\sigma_k$  fração molar e diâmetro de colisão de uma espécie  $k$ , respectivamente;  $\Omega_{\mu,k}$  é a integral de colisão para viscosidade. Os parâmetros necessários para os cálculos das propriedades foram obtidos em Smith et al (1999).

Admitindo número de Lewis unitário (Le=1) o coeficiente de difusão de espécies químicas é calculado como  $\rho D = k / c_p$ , uma vez que  $Le = \alpha / D = 1$  e  $\alpha = k / (\rho c_p)$ . As propriedades presentes no termo de empuxo foram assumidas iguais a:  $\rho_\infty = p_0 \bar{W} / (R_u T_\infty)$ ,  $T_\infty = 298K$  e  $g = 9.81m/s^2$ .

### 3. Metodologia de solução numérica

Um código computacional na linguagem do software MATLAB foi desenvolvido para a realização das simulações numéricas. Cada rotina computacional do código foi verificada por meio de comparação direta de resultados das rotinas do código desenvolvido em Cunha (2010), mas otimizadas para redução de tempo de execução. No código, uma malha de elementos finitos triangulares não estruturada é utilizada para discretização do domínio de cálculo e uma segunda malha de volumes de controle poligonais, centrado nos vértices, é utilizada para discretização das equações diferenciais de conservação. Somente uma equação de conservação para um escalar genérico  $\phi$  é considerada no código computacional, para um sistema coordenado cilíndrico (axissimétrico) e transiente:

$$\underbrace{\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi)}_{\text{termo transiente}} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial z}(\rho u\phi) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(r\rho v\phi)}_{\text{termo advectivo}} = \underbrace{\frac{\partial}{\partial z}(\Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial z}) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(r\Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial r})}_{\text{termo difusivo}} + \underbrace{S_\phi}_{\text{termo de fonte}} \tag{18}$$

em que  $t$  é o tempo,  $u$  é a componente de velocidade na direção  $z$ ,  $v$  é a componente de velocidade na direção  $r$ ,  $\rho$  é a massa específica,  $\Gamma_\phi$  é o coeficiente difusivo e  $S_\phi$  é o termo fonte, que engloba qualquer termo diferente dos citados.

Formas específicas da Eq. (18) são apresentadas na Tabela 1.

**Tabela 1.** Formas específicas da Eq. (18).

Equação	$\phi$	$\Gamma_\phi$	$S_\phi$
Conservação da massa	1	0	0
Conservação de quant. de movimento-z	$u$	$\mu$	$\partial p / \partial z + (\rho - \rho_\infty)g$
Conservação de quant. de movimento-r	$v$	$\mu$	$\partial p / \partial r - \mu v / r^2$
Conservação da Energia	$h$	$k / Cp$	$\nabla q_{rad}$
Conservação da fração de massa	$Y_k$	$k / Cp$	0

O método de Euler implícito foi utilizado para discretização do termo temporal da Eq. (18). O CVFEM foi utilizado para discretização dos termos advectivo e difusivo, de forma semelhante ao apresentado no trabalho de Masson, Saabas e Baliga (1994), ou seja, um esquema de interpolação linear foi utilizado para discretização do termo difusivo e

o *Flow-Oriented upwind scheme* (FLO) foi utilizado para discretização do termo advectivo. O termo de fonte médio sobre volume de controle associado um vértice  $i$  foi aproximado pelo valor na posição do vértice  $i$ .

A discretização das equações diferenciais produz sistemas de equações algébricas para cada variável de interesse. Alguns sistemas de equações podem ser resolvidos de forma direta por funções intrínsecas do MATLAB, como é o caso do sistema de equações algébricas da entalpia, mas não é possível a solução direta de todos os sistemas equações algébricas. Por exemplo, as equações de Navier-Stokes são não-lineares e altamente acopladas, por isso necessitaram de determinação simultânea de  $u$ ,  $v$  e  $p$ . Este trabalho optou pela determinação segregada de  $u$ ,  $v$  e  $p$  com o algoritmo de Saabas e Baliga (1994). As equações de fração de massa de espécies químicas também precisaram de um procedimento especial de solução devido ao forte acoplamento entre os termos de fonte  $\dot{\omega}_k$ . A técnica de separação de operadores foi utilizada para solução do problema de acoplamento químico. Assim, o problema original foi dividido em dois passos fracionados. No primeiro passo só eram considerados os termos transientes e os termos  $\dot{\omega}_k$  de cada equação de conservação de fração de massa. O conjunto de equações diferenciais ordinárias resultante era resolvido com o método de Euler explícito, com um passo de tempo " $\Delta t_r$ " pequeno o suficiente para estabilizar a solução e proporcionar precisão. No segundo passo só não eram considerados os termos  $\dot{\omega}_k$  das equações de fração mássica de espécies químicas, por isso os mesmos foram excluídos da Tabela 1. O conjunto de equações algébricas deste segundo passo era resolvido de forma implícita e direta, partindo da solução do primeiro passo fracionado, com um passo de tempo  $\Delta t$ . A relação entre os passos de tempo dos dois passos era de  $\Delta t = 10000 \Delta t_r$ , ou seja,  $10000 \Delta t_r$ 's tinham que ser dados no primeiro passo e um único  $\Delta t$  no segundo passo. A equação de conservação de energia era resolvida de forma implícita e direta, sem qualquer fracionamento, uma vez que a mesma não tinha um termo de fonte de reação química. O campo de temperatura era calculado com o método de Newton-Raphson, explorando as dependências das  $h_k$ 's com a temperatura.

Todas as equações de conservação foram resolvidas de forma transiente. Em cada passo tempo (admitido igual a  $\Delta t = 10^{-4}$  s) as equações eram resolvidas uma única vez, na sequencia apresentada na Figura 1. Da forma apresentada a influência simultânea dos campos de velocidade, de temperatura e de concentração de espécies químicas sobre os resultados em cada passo de tempo não era considerada, mas isto não foi nenhum problema, uma vez que o objetivo final era somente a solução em regime permanente.

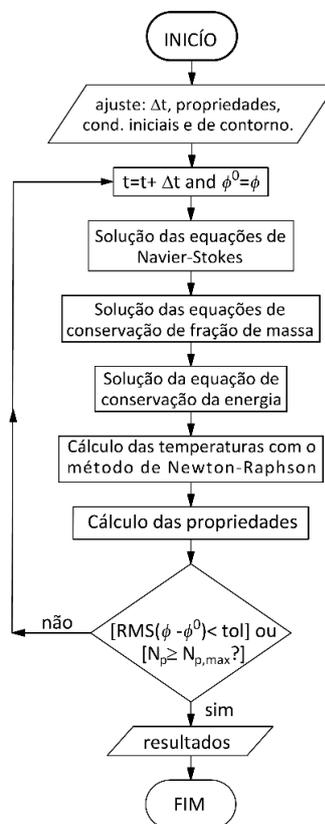


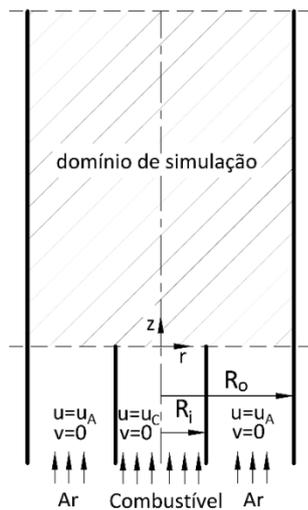
Figura 1. Evolução temporal da simulação.

Em que:  $RSM(\phi - \phi^0) = (\sum_{i=1}^n (\phi_i - \phi_i^0)^2)^{0,5}$ ,  $n$  é o número de vértices da malha. O termo  $tol$  é uma tolerância, admitida igual a  $10^{-5}$  para todas as variáveis. O termo  $N_p$  representa o número do passo de tempo, cujo valor máximo é dado por  $N_{p,max}$ .

**4. Resultados e Discussões**

O caso da chama laminar sem pré-mistura, coflow e confinada estudada experimentalmente por Mitchell (1975) e Mitchell, Sarofim e Clomburg (1980) é utilizado como referência nesta parte do trabalho. A chama laminar foi confinada em uma câmara cilíndrica vertical, com dois tubos concêntricos de raios  $R_i$  e  $R_o$ , nos quais passam combustível e ar, respectivamente, como mostrado na Figura 2. O raio interno  $R_i$  tem 0,635 cm e o raio externo  $R_o$  tem 2,54 cm. O combustor tem 30 cm de comprimento.

A condição inicial no interior de domínio se resumiu a  $u=0, v=0, h=h_{mistura@298K}$  e foi assumido que ar preenchia totalmente o interior do combustor no instante inicial. No combustor experimental, ar e combustível eram emitidos por uma placa perfurada metálica, cuja representação em uma simulação 2D axissimétrica é complexa, assim, a principal simplificação associada a condição de contorno está na placa emissora de combustível. As condições de contorno assumidas neste estudo estão resumidas na Tabela 2, com base nos contornos identificados na Figura 3(a). A pressão foi admitida igual a 101325Pa no contorno saída. Nos contornos de entrada de combustível e oxidante as entalpias foram ajustadas iguais à do metano e do ar a 298K, respectivamente:  $h_c = h_{CH_4@298K}$  e  $h_A = h_{ar@298K}$ . A entalpia do contorno parede foi calculada a cada iteração em função da composição dos gases:  $h_M = \sum_{k=1}^{n_s} h_{k@298K} Y_k$ .



- Entrada de combustível:**  
 Velocidade axial na entrada:  $u_c=4,5\text{cm/s}$   
 Velocidade radial na entrada:  $v_c=0\text{cm/s}$   
 Temperatura:  $T_c=298\text{K}$   
 Fração de massa:  $Y_{CH_4}=1$
- Entrada de ar:**  
 Velocidade axial de entrada:  $u_A=9,88\text{cm/s}$   
 Velocidade radial de entrada:  $v_A=0\text{cm/s}$   
 Temperatura:  $T_A=298\text{K}$   
 Composição do ar:  $Y_{O_2}=0,232, Y_{N_2}=0,755$  e  $Y_{AR}=0,013$
- Saída do combustor:**  
 Pressão na saída:  $p=101325\text{Pa}$
- Parede do combustor:**  
 Temperatura da parede:  $298\text{K}$

Figura 2. Esquema do combustor cilíndrico vertical.

Tabela 2. Condições de contorno.

Contorno	$u$	$v$	$Y_k$	$h$
Eixo	$\partial u/\partial r=0$	$\partial v/\partial r=0$	$\partial Y_k/\partial r=0$	$\partial h/\partial r=0$
Parede	$u=0$	$v=0$	$\partial Y_k/\partial r=0$	$h=h_M$
Entrada combustível	$u=u_c$	$v=0$	$Y_{CH_4}=1$	$h=h_c$
Entrada oxidante	$u=u_A$	$v=0$	$Y_{O_2}=0,232; Y_{N_2}=0,755$ e $Y_{AR}=0,013$	$h=h_A$
Saída	$\partial u/\partial z=0$	$\partial v/\partial z=0$	$\partial Y_k/\partial z=0$	$\partial h/\partial z=0$

Para facilitar o processo de discretização do domínio a geometria do combustor foi dividida em duas partes por uma linha paralela ao eixo-r e localizada em  $z=0,70\text{cm}$ . A primeira parte da geometria continha a entrada e a segunda a saída do combustor, conforme Figura 3(b). Para assegurar um erro pequeno de discretização na região de entrada, um refinamento elevado de malha foi realizado em tal região, o tamanho dos elementos na primeira parte do domínio foi inflado em duas direções simultaneamente a partir do contorno que representa a placa do combustor. O tamanho

dos elementos na segunda parte do domínio foi variado somente na direção Z, ou seja, o número de elementos na direção radial ficou constante. Para que não existisse a necessidade de interpolação das variáveis para as posições de tomadas de resultados as malhas foram criadas de modo que houvessem nós nas posições dos perfis radiais experimentais, localizadas em  $Z=1,2\text{cm}$ ,  $Z=2,4\text{cm}$  e  $Z=5,0\text{cm}$ . Duas malhas foram criadas para testar a sensibilidade dos resultados ao refinamento de malha. A malha mais fina ficou com 9947 volumes e 19352 elementos e a malha mais grossa ficou com 4885 volumes e 9388 elementos.

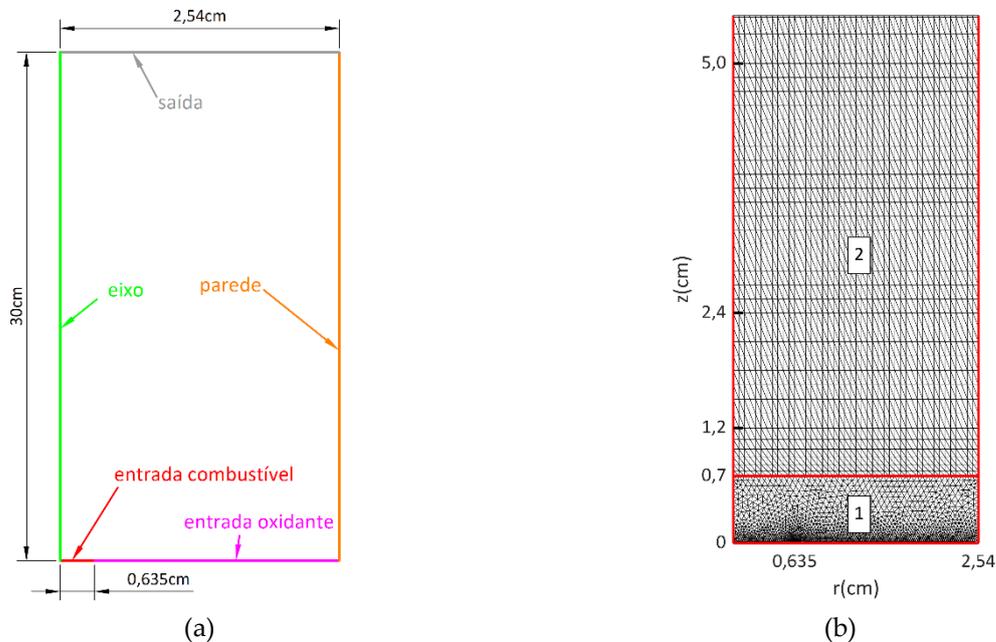


Figura 3. (a) Identificação dos contornos do domínio; (b) Parte da malha grossa de elementos triangulares.

Um computador pessoal foi usado para realizar as simulações, com os seguintes recursos: Processador Intel® Core™ i7-6700k, 64GB de memória DDR4, SSD de 480GB e SO Windows 10 Pro de 64 bits. Foram necessários 4231 e 4412 passos de tempo para a convergência para o regime permanente com as malhas fina e grossa, respectivamente. Os tempos de CPU gastos com as simulações foram de 309211s e 165522s com as malhas fina e grossa, respectivamente, que são tempos de simulação razoáveis, comprovando a viabilidade deste tipo de simulação em um computador pessoal. Os resultados das simulações empregando as malhas grossa e fina são apresentados na Figura 4, na qual se nota pouquíssima diferença entre os perfis de temperatura e da componente axial de velocidade, o que significa que os resultados das simulações não são mais sensíveis ao refinamento de malha.

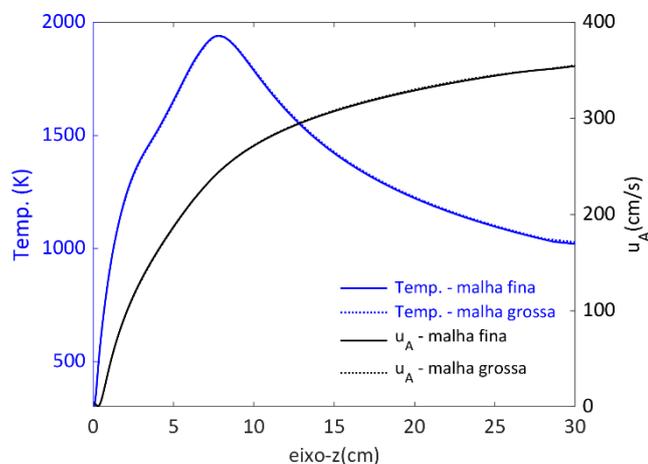


Figura 4. Teste de malha.

Os resultados obtidos por meio de simulação com a malha fina são comparados aos dados experimentais nas próximas figuras. Para  $Z=1,2\text{cm}$ , observa-se que as frações molares de  $\text{CH}_4$  e  $\text{O}_2$  se aproximam de zero em  $r=0,66\text{cm}$ ;

este ponto marcaria a posição da chama se a combustão fosse tratada com um mecanismo de reação global de passo único, porém, devido ao uso de um mecanismo de reação detalhado, isto não é verdadeiro. A posição de máxima temperatura para  $Z=1,2\text{cm}$  ocorre em  $0,7\text{cm}$ ; que deve ser o local provável de chama.

As diferenças entre os resultados das simulações e os dados experimentais são maiores na região central ao combustor. Mesmo tratando da cinética química com um mecanismo detalhado, a concentração de  $\text{CH}_4$  é superestimada pela simulação nas posições  $Z=1,2\text{cm}$  e  $5,0\text{cm}$ . A concentração de  $\text{O}_2$  é melhor predita nas duas posições. Existe uma concordância qualitativa entre os perfis radiais de  $\text{H}_2\text{O}$  e  $\text{CO}_2$  preditos com os dados experimentais. As posições das concentrações máximas de  $\text{H}_2\text{O}$  e  $\text{CO}_2$  aproximam a posição temperatura máxima radial, o que está de acordo com os dados experimentais. A concentração de  $\text{CO}_2$  é subestimada na parte central do combustor pela simulação, para as duas posições de referência. Existe uma concordância um pouco melhor entre o predito e os dados experimentais na parte central do combustor para a concentração de  $\text{H}_2\text{O}$ .

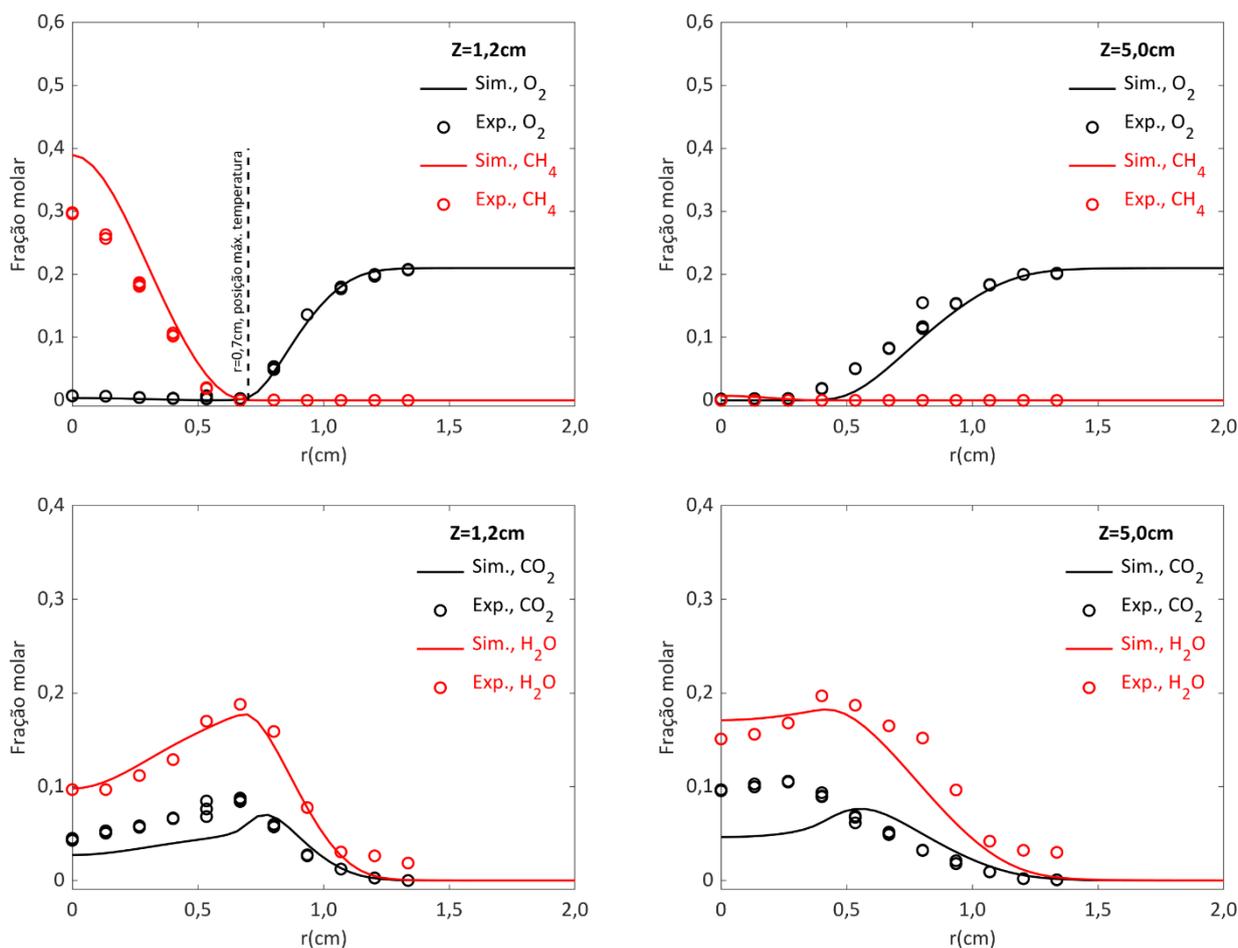


Figura 5. Perfis radiais de fração de massa.

Os perfis de temperatura preditos são similares as curvas experimentais, conforme Figura 6. O ponto de temperatura máxima em cada perfil radial térmico marca a posição da chama para cada altura  $Z$ . A predição da temperatura máxima, para as três cotas  $Z$ , subestima os dados experimentais, o que deve ter ocorrido por que o modelo de radiação utilizado superestima a perda de calor por radiação, como exposto por Liu, Guo e Smallwood (2004) e Datta e Saha (2007). Nota-se que a largura da chama diminui com o aumento de  $Z$ , o que é razoavelmente capturado pela simulação. Para  $Z=1,2\text{cm}$  a largura é bem predita, mas para  $Z=2,4\text{cm}$  e  $Z=5,0\text{cm}$  a largura da chama predita é um pouco maior que a experimental. Este mesmo comportamento também foi observado nos trabalhos de Dasgupta (2015) e Uygur, Selçuk e Tuncer (2008).

As predições do campo de velocidade são avaliadas por meio dos três perfis radiais apresentados na Figura 7. As predições aproximam bem os dados experimentais, para as três cotas em  $Z$ . As predições para  $Z=1,2\text{cm}$  subestimam levemente as velocidades axiais na região central do combustor. Aparentemente a simulação superestima o espalhamento dos produtos, pois, na região  $0,7\text{cm} < r < 1,2\text{cm}$  os perfis de velocidade para as três posições são um

pouco superestimados, o que é um sinal da existência de um problema na condição associada a emissão de reagentes a partir da placa do combustor.

As discordâncias verificadas entre os resultados das simulações e os dados experimentais não devem ter ocorrido devido ao modelo de combustão, que é robusto, nem devido as equações que descrevem o movimento do fluido, tão pouco devido a alguma simplificação na equação de conservação da energia. O modelo mais simplificado utilizado na modelagem matemática foi o de radiação, mas o impacto da consideração das perdas de calor por radiação sobre a concentração de espécies químicas é pequeno para este combustor, como exposto em Uygur, Selçuk e Tuncer (2008) e Azarkhavarani, Lessani e Tabejamaat (2017). Dasgupta (2015), que também utilizou o GRI-MECH 3.0 para simulação da Chama de Mitchell, obteve resultados parecidos com os apresentados no presente trabalho, por isso, acredita-se que a origem das discordâncias observadas deve estar associada a emissão dos reagentes a partir da placa do combustor, que é bastante complexa e de difícil representação em uma simulação 2D axissimétrica.

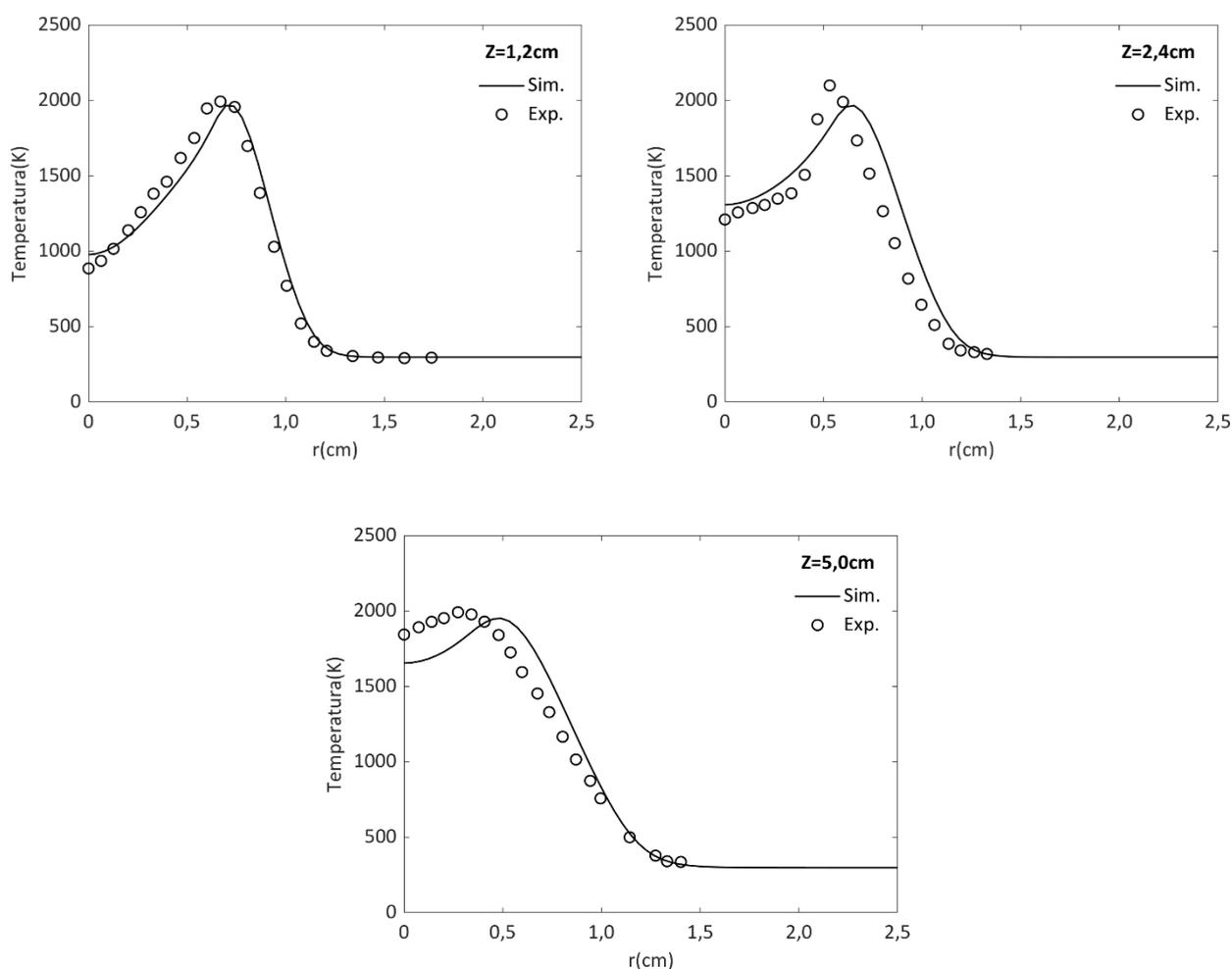


Figura 6. Perfis radiais térmicos.

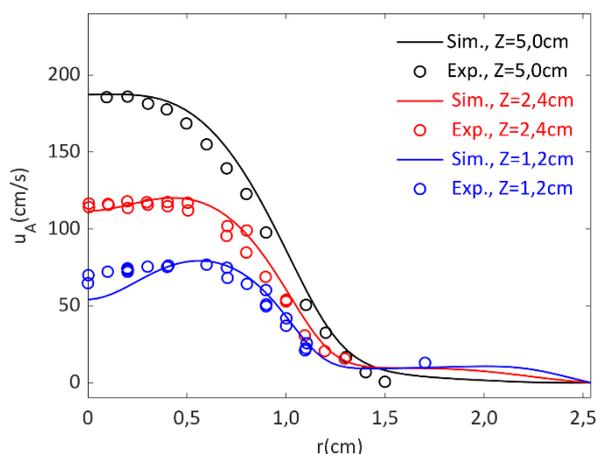


Figura 7. Perfis radiais da componente de velocidade axial.

## 5. Conclusão

Neste trabalho foi apresentado um modelo de fluidodinâmica computacional da combustão com mecanismo de cinética química detalhada para escoamento incompressível laminar. Simulações numéricas 2D axissimétricas da combustão gasosa sem pré-mistura em um combustor cilíndrico foram realizadas em um computador pessoal e o tempo de CPU necessário para uma simulação com uma malha refinada foi de 309211s, demonstrando a viabilidade deste tipo de simulação em um computador pessoal. Os resultados obtidos com as simulações foram razoavelmente próximos das referências experimentais, as maiores divergências ocorreram na parte central do combustor, para os campos de temperatura, de concentração de espécies químicas e de velocidade ( $Z=1,2\text{cm}$ ). As maiores discrepâncias do campo de velocidade para  $Z=5,0\text{cm}$  ficaram na faixa radial compreendida entre  $0,7\text{cm}$  e  $1,2\text{cm}$ ; indicando que a predição do espalhamento dos produtos é superestimada. Dada a robustez da modelagem matemática, acredita-se que as diferenças entre os resultados da simulação e os dados experimentais devem ter ocorrido devido a condição de contorno de entrada de reagentes, que no experimento ocorre através de uma placa metálica perfurada e na simulação 2D axissimétrica é aproximada por um simples perfil de velocidade constante.

## References

- Westbrook, C.K.; Dryer, F.L. Simplified Reaction Mechanisms for the oxidation of hydrocarbon fuels in Flames. *Combust. Sci. and Tech* **1981**, Volume 27, pp. 31-43.
- Mitchell, R.E.; Sarofim, A.F.; Clomburg, L.A. Experimental and numerical investigation of confined laminar diffusion flames. *Combust. Flame* **1980**, Volume 37, pp. 227-244.
- Mitchell, R.E. Nitrogen Oxide Formation in Laminar Methane-air Diffusion Flames. Doutorado, Massachusetts Institute of Technology, MA, EUA, 1975.
- Santoro, R.J.; Semerjian, H.G.; Dobbins, R.A. Soot Particle Measurements in Diffusion Flames. *Combust. Flame* **1983**, Volume 51, pp. 203-218.
- Smooke, M.D.; Mcenally, C.S.; Pfefferle, L.D. Computational and Experimental Study of Soot Formation in Coflow, Laminar Diffusion Flame. *Combust. Flame* **1999**, Volume 117, pp. 117-139.
- McEnally, C.S.; Pfefferle, L.D. Experimental Study of Nonfuel Hydrocarbon Concentrations in Coflowing Partially Premixed Methane/Air Flames. *Combust. Flame* **1999**, Volume 118, pp. 619-632.
- Bennett, B.A.V.; Mcenally, C.S.; Pfefferle, L.D.; Smooke, M.D. Computational and Experimental Study of Axisymmetric Coflow Partially Premixed Methane/Air Flames. *Combust. Flames* **2000**, Volume 123, pp. 522-546.
- Thomson, K.A.; Gulder, O.L.; Weckman, E.J.; Fraser, R.A.; Smallwood, G.J.; Snelling, D.R. Soot concentration and temperature measurements in co-annular, nonpremixed  $\text{CH}_4/\text{air}$  laminar flames at pressures up to 4 MPa. *Combust. Flame* **2005**, Volume 140, pp. 222-232.
- Dasgupta, A. Numerical Simulation of Axisymmetric Laminar Diffusion Flames with Soot. Dissertation in Mechanical Engineering, Pennsylvania State University, PA, USA, 2015.
- Bhowal, A.J.; Mandal, B.K. A Computational Study of Soot Formation in Methane Air Co-Flow Diffusion Flame Under Microgravity Conditions. *Microgravity Science and Technology* **2016**, Volume 28, pp.395-412.

11. Azarkhavarani, M.F.; Lessani, B.; Tabejamaat, S. Artificial compressibility method on half-staggered grid for laminar radiative diffusion flames in axisymmetric coordinates. *Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals* **2017**, Volume 72, pp. 392-407.
12. Soloklou, M.N.; Golneshan, A.A. Numerical investigation on effects of fuel tube diameter and co-flow velocity in a methane/air non-premixed flame. *Heat and Mass Transfer* **2019**.
13. Dasgupta, A.; Juez, E.G.; Haworth, D.C. Flame simulations with an open-source code. *Computer Physics Communications* **2019**, Volume 237, pp. 219-229.
14. Smith, G.P.; Golden, D.M.; Frenklach, M.; Moriarty, N.W.; Eiteneer, B.; Goldenberg, M.; Bowman, C.T.; Hanson, R.K.; Song, S.; Gardiner Jr., W.C.; Lissianski, V.V.; Qin, Z. GRI-Mech 3.0 – An Optimized Detailed Chemical Reaction Mechanism for Methane Combustion. Disponível online: [http://www.me.berkeley.edu/gri\\_mech/](http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/) (visitado em 06/05/2019).
15. Turns, S.R. An introduction to combustion: Concepts and Applications, 3<sup>rd</sup> ed.; McGraw-Hill Education: NY, EUA, 2013.
16. Barlow, R.S.; Karpetis, A.N.; Frank, J.H.; Chen, J.Y. Scalar profiles and NO formation in laminar opposed-flow partially premixed methane/air flames. *Combust. Flame* **2001**, Volume 127, pp. 2102-2118.
17. McBride, B.J.; Gordon, S.; Reno, M.A. Coefficients for calculating thermodynamic and transport properties of individual species. NASA Technical Memorandum 4513 **1993**.
18. Bird, R.B.; Stewart, W.E.; Lightfoot, E.N. Transport Phenomena, 2<sup>nd</sup> ed.; John Wiley & Sons: NJ, EUA, 2001.
19. Cunha, Fábio Alfaia. 2010. Tese (Doutorado em Ciências Mecânicas) – Faculdade de Tecnologia, Pós-Graduação em Ciências Mecânicas, Universidade de Brasília.
20. Masson, C.; Saabas, H.J.; Baliga, B.R. Co-located Equal-Order Control-Volume Finite Element Method for Two-Dimensional Axisymmetric Incompressible Fluid Flow. *Int. J. Numer. Methods in Fluids* **1994**, Volume 18, pp. 1-26.
21. Saabas, H.J.; Baliga, B.R. Co-located Equal-Order Control-Volume Finite-Element Method for Multidimensional, Incompressible, Fluid Flow – Part I: Formulation. *Numerical Heat Transfer Part B* **1994**, Volume 26, pp. 381-407.
22. Liu, F.; Guo, H.; Smallwood, G.J. Effects of radiation model on the modeling of a laminar coflow methane/air diffusion flame, *Combustion and Flame* **2004**, Volume 138, Issues 1–2, pp. 136-154.
23. Datta, A.; Saha, A. Contributions of self-absorption and soot on radiation heat transfer in a laminar methane—air diffusion flame. *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part A: Journal of Power and Energy* **2007**, Volume 221, pp. 955–970.
24. Uygur, A.B.; Selçuk, N.; Tuncer, I.H. A non-iterative pressure based scheme for the computation of reacting radiating flows. *International Journal of Thermal Sciences* **2008**, Volume 47, pp. 209-220.