

MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO
UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA MECÂNICA

IMPLEMENTAÇÃO DO MÉTODO FGM NO PACOTE OPENFOAM PARA SIMULAÇÃO DE
CHAMA LAMINAR DIFUSIVA

por

Lisandro Candiani Maders

Monografia apresentada ao Departamento de Engenharia Mecânica da Escola de Engenharia da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, como parte dos requisitos para obtenção do diploma de Engenheiro Mecânico.

Porto Alegre, novembro de 2015

Lisandro Candiani Maders

Implementação do método FGM no pacote OpenFOAM para simulação de chama laminar difusiva/ Lisandro Candiani Maders. – Porto Alegre, novembro de 2015-20 p. : il. (algumas color.) ; 30 cm.

Orientador: Prof. Dr. Fernando Marcelo Pereira

Trabalho de conclusão de curso – MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO
UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA MECÂNICA, novembro de 2015.

1. FGM. 2. chama laminar difusiva. I. Prof. Dr. Fernando Marcelo Pereira. II. Universidade Federal do Rio Grande do Sul. III. Faculdade de Engenharia Mecânica. IV. Implementação do método FGM no pacote OpenFOAM para simulação de chama laminar difusiva

CDU 02:141:005.7



Universidade Federal do Rio Grande do Sul
Escola de Engenharia
Departamento de Engenharia Mecânica

IMPLEMENTAÇÃO DO MÉTODO FGM NO PACOTE OPENFOAM PARA SIMULAÇÃO DE
CHAMA LAMINAR DIFUSIVA

por

Lisandro Candiani Maders

ESTA MONOGRAFIA FOI JULGADA ADEQUADA COMO PARTE DOS
REQUISITOS PARA A OBTENÇÃO DO TÍTULO DE
ENGENHEIRO MECÂNICO
APROVADA EM SUA FORMA FINAL PELA BANCA EXAMINADORA DO
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA MECÂNICA

Prof. Juan Pablo Raggio Quintas
Coordenador do Curso de Engenharia Mecânica

Área de concentração: Ciências Térmicas

Orientador: Prof. Dr. Fernando Marcelo Pereira

Comissão de avaliação:

Prof. Dra. Adriane Prisco Petry

Prof. Dr. Francis H. Ramos França

Prof. Dra. Thamy Cristina Hayashi

Porto Alegre, novembro de 2015

AGRADECIMENTOS

Agradeço primeiramente ao professor Fernando Pereira, meu orientador, pela confiança na realização deste trabalho e pela orientação ao longo da graduação.

Ao Leonardo Zimmer e ao Cristian Hoerlle, pelo constante auxílio com a técnica FGM e demais assuntos ao longo deste trabalho.

Ao Guilherme Garber, pelo empréstimo de seu notebook e pela grande amizade ao longo da graduação, e ao Anderson Brands (Bó), por nunca ter recusado meus pedidos de ajuda com relação à linguagem C++.

Aos meus pais, Jorge Raul Maders Filho e Elisa Candiani Maders, por terem investido na minha educação e ter tornado possível esta graduação; às amigas construídas ao longo destes anos, que tornaram esta caminhada mais divertida; e principalmente à Renata Stein, que trouxe luz à minha vida e me tornou uma pessoa melhor.

MADERS, C. L. **Implementação do método FGM no pacote OpenFOAM para simulação de chama laminar difusiva**. 2015. 28. Monografia (Trabalho de Conclusão do Curso em Engenharia Mecânica) – Departamento de Engenharia Mecânica, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2015.

RESUMO

O presente trabalho trata da solução de uma chama laminar não pré-misturada do tipo jato via simulação numérica. Os combustíveis empregados são metano puro e metano diluído em nitrogênio. Devido ao elevado custo computacional até mesmo para chamas laminares, o uso de abordagens de simplificação de cinética química torna-se necessário, sendo a técnica *Flamelet-Generated-Manifold* (FGM) usada neste trabalho. A implementação desta técnica no pacote aberto OpenFOAM é realizada no escopo multidimensional a partir de um *manifold* já construído. Resultados da literatura são utilizados para verificar a implementação e avaliar a técnica. Simulações utilizando mecanismo global de 1 passo são realizadas de forma a comparar ambas abordagens de simplificação de cinética química. O FGM apresentou resultados melhores que o mecanismo de 1 passo, se aproximando mais de soluções detalhadas com o mecanismo *skm-DRM19*. Uma piora nos resultados do FGM é observada variando-se a composição do combustível, e um outro caso foi estudado variando-se a definição da variável de progresso. Constatou-se que os resultados são bastante sensíveis a esta definição.

PALAVRAS-CHAVE: combustão. método FGM. chama difusiva laminar. OpenFOAM.

MADERS, L. C. **Abstract title**. 2015. 28. Monografia (Trabalho de Conclusão do Curso em Engenharia Mecânica) – Departamento de Engenharia Mecânica, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2015.

ABSTRACT

The present study solves a diffusive laminar jet flame through numerical simulation. The fuel used is pure methane and methane diluted in nitrogen. Due to the high computational cost even for laminar flames, the use of chemical kinetics simplification approaches become necessary. The *Flamelet-Generated-Manifold* technique is based on the *flamelets* and *manifold* approaches. The implementation of such technique in the open source tool OpenFOAM is performed on a multidimensional scope from an already built *manifold*. Results from literature are used to verify the implementation and evaluate the technique. Simulations using 1-step global mechanism are also performed in order to compare both chemical kinetics approaches. The FGM presented better results compared to the 1-step mechanism, getting closer to the detailed mechanism. The quality of the FGM results decreased when varying the fuel composition, and another study was performed by varying the progress variable definition. It was found that the results are very sensitive to this parameter.

KEYWORDS: combustion. FGM method. diffusive laminar flame. OpenFOAM.

SUMÁRIO

| | | |
|----------|--|------------|
| | Lista de ilustrações | vii |
| 1 | INTRODUÇÃO | 1 |
| 2 | OBJETIVOS | 2 |
| 3 | FORMULAÇÃO MATEMÁTICA DE ESCOAMENTOS REATIVOS | 2 |
| 3.1 | Equações de conservação | 2 |
| 3.2 | Cálculo das propriedades | 3 |
| 3.3 | Modelagem da cinética química | 4 |
| 3.3.1 | Mecanismo detalhado | 4 |
| 4 | FLAMELET-GENERATED-MANIFOLDS | 5 |
| 4.1 | Origem do método FGM | 5 |
| 4.1.1 | Modelos <i>Flamelets</i> | 5 |
| 4.1.2 | Método <i>Intrinsic Low-Dimensional Manifold</i> | 5 |
| 4.1.3 | FGM | 6 |
| 4.2 | Variáveis de controle | 6 |
| 4.3 | Equações resolvidas no escopo multidimensional | 7 |
| 5 | DEFINIÇÃO DO PROBLEMA ESTUDADO | 7 |
| 6 | A TÉCNICA FGM NO OPENFOAM® | 8 |
| 6.1 | Procedimento de solução | 8 |
| 6.2 | Sistema de busca e interpolação do <i>manifold</i> | 9 |
| 7 | RESULTADOS E DISCUSSÕES | 10 |
| 8 | CONCLUSÃO | 14 |
| | REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS | 16 |
| | APÊNDICE A – CONVERGÊNCIA NUMÉRICA E INDEPENDÊNCIA DE MALHA | 17 |
| | APÊNDICE B – MECANISMO DE 1 PASSO - CÁLCULO DE PROPRIEDADES E MODELAGEM DE CINÉTICA QUÍMICA | 18 |
| B.1 | Modelos de transporte | 18 |
| B.2 | Modelo termodinâmico | 18 |
| B.3 | Equação de estado | 18 |
| B.4 | Modelagem da cinética química | 19 |
| | APÊNDICE C – EQUACIONAMENTO DOS FLAMELETS | 20 |

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

| | |
|---|----|
| Figura 5.1 – Esquema do queimador de jato de combustível e ar, mostrando as condições iniciais e de contorno aplicadas para ambas abordagens de cinética química empregadas. | 8 |
| Figura 6.1 – Algoritmo de solução da simulação multidimensional no OpenFOAM® indicando as etapas implementadas (em vermelho) neste trabalho. | 9 |
| Figura 6.2 – Sistema de busca e interpolação empregado no <i>manifold</i> . As propriedades são função do par (Z_t, γ) e são obtidas por uma interpolação bi-linear, utilizadas nas equações de conservação e transporte na próxima iteração. Os campos de temperatura e frações mássicas são obtidos de forma análoga na reconstrução da chama (pós-processamento). | 10 |
| Figura 7.1 – Perfis radiais de temperatura e fração mássica de CO para diferentes posições axiais do queimador. Resultados do presente trabalho (FGM e 1 passo) comparados com os resultados de Verhoeven, 2011 (FGM - Verhoeven e Detalhado - Verhoeven). | 11 |
| Figura 7.2 – Perfis radiais de temperatura e fração mássica de CO_2 para o segundo caso estudado (CH_4 puro). Resultados obtidos no presente trabalho (FGM e 1 passo) comparados aos resultados obtidos em simulação com o mecanismo <i>skm-DRM19</i> realizada por integrantes do Laboratório de Combustão da UFRGS. | 12 |
| Figura 7.3 – Contorno de temperatura para o segundo caso estudado (CH_4 puro). | 13 |
| Figura 7.4 – Perfis radiais de temperatura e fração mássica de CO_2 comparando as simulações utilizando diferentes definições para a variável de progresso com o mecanismo <i>skm-DRM19</i> . O FGM1 corresponde à definição da Equação 4.1 e FGM2 corresponde à definição da Equação 7.1. | 14 |
| Figura A.1 – Perfis radiais de temperatura para diferentes malhas, a uma altura de $0.04m$ da entrada, para ambas abordagens de cinética química utilizadas no presente trabalho (1 passo e FGM) | 17 |

1 INTRODUÇÃO

De acordo com o [Balanço Energético Nacional, 2015](#), a queima de derivados do petróleo, gás natural, carvão mineral, lenha, carvão vegetal e dos resíduos agro-industriais corresponde a mais de 80% da energia utilizada no Brasil. A combustão tem grande impacto nos setores industrial, de transporte e de geração de energia elétrica, e, portanto, é de grande interesse da sociedade que estudos sejam desenvolvidos nesta área.

Dentre os diferentes tipos de chama existentes, as chamas laminares difusivas são objeto de muitas pesquisas fundamentais com o objetivo de entender melhor os fenômenos físico-químicos em escoamentos reativos mais complexos. Em [Lin *et al.*, 1999](#), por exemplo, resultados experimentais forneceram relações quase lineares entre a largura de chama e o número de Reynolds, e um melhor entendimento sobre a formação de fuligem na combustão não pré-misturada foi estudada em [Santoro *et al.*, 1987](#) e [Smooke *et al.*, 2005](#), sendo todos baseados em estudos sobre chamas laminares difusivas.

Segundo [Turns, 2012](#), embora muitas soluções analíticas e numéricas de chamas de jato laminar estejam disponíveis, equipamentos residenciais que empregam este tipo de chama, como fogões e fornos, ainda baseavam seus projetos na habilidade de projetistas experientes. Entretanto, a recorrente preocupação quanto à qualidade do ar e às emissões de poluentes tem levado ao uso de métodos de projeto mais sofisticados, como simulações numéricas de combustão através do Método dos Volumes Finitos. Para a oxidação de hidrocarbonetos, centenas de reações químicas e dezenas de espécies químicas podem ser necessárias para se calcular com exatidão a cinética química do processo de combustão. O conjunto de equações diferenciais não-lineares, rígidas e acopladas a serem resolvidas torna o problema computacionalmente pesado até mesmo para chamas laminares [[N.Peters e B.Rogg, 1993](#)]. Por esta razão, muitas ferramentas para a redução de mecanismos de cinética química têm sido desenvolvidas, como mecanismos globais e, mais recentemente, técnicas avançadas como o *Flamelet-Generated-Manifold* - FGM [[Oijen e Goey, 2000](#)].

Mecanismos globais são mais eficientes computacionalmente, porém, apresentam desvios em sua resposta quando comparados com mecanismos detalhados de cinética química. Mecanismos globais podem considerar um ou mais passos de reação química. [Ellsey *et al.*, 1990](#) realizou um estudo comparativo entre uma solução numérica e uma solução analítica, no qual um mecanismo global de 1 passo foi utilizado devido à falta de recursos computacionais da época. Algumas diferenças foram notadas com relação à solução analítica como alterações na estrutura da chama. Apesar das melhorias com relação à solução analítica, tal simplificação da cinética química levou a desvios significativos do campo de temperatura, sendo necessária uma correção na entalpia do combustível. Em [Hoerlle e Pereira, 2014](#), uma chama unidimensional contra-corrente foi simulada com mecanismos de 1, 2 e 4 passos, comparando-se os resultados com o mecanismo detalhado GRI-Mech 3.0. Neste estudo, concluiu-se que o mecanismo de 4 passos apresentou os melhores resultados de forma geral e que, surpreendentemente, o mecanismo de 1 passo apresentou resultados tão bons ou até melhores que o mecanismo de 2 passos, com exceção do perfil de fração mássica de CO_2 .

Em [Hoerlle *et al.*, 2015](#), um estudo comparativo entre um mecanismo de 4 passos e a técnica FGM foi realizado. O mecanismo de 4 passos se mostrou uma boa simplificação da cinética química conseguindo representar o campo de temperatura e frações mássicas da maioria das espécies satisfatoriamente, assim como o FGM. A diferença entre as abordagens foi evidente no perfil de espécies minoritárias como CO e H_2 , onde os resultados apresentaram discordâncias significativas, sendo o FGM o que apresentou resultados melhores com relação a um mecanismo detalhado. Problemas práticos de engenharia também foram resolvidos com a técnica FGM e reportados na literatura. Em [Oijen, 2002](#), o FGM foi usado para simular um queimador poroso de espuma-cerâmica. Neste trabalho, a complexidade deste problema que envolve os fenômenos da combustão, escoamento e transferência de calor tornaria a solução inviável via cinética química detalhada. [Verhoeven, 2011](#) realizou um estudo comparativo de chamas laminares difusivas comparando a técnica FGM com uma simulação detalhada com um mecanismo de 21 espécies e 84 reações, chamado *DRM19* [[Kazakov e Frenklach, 1994](#)].

Fancello, 2014 estudou a estabilização da chama em uma simulação transiente para resolver uma turbina a gás utilizando modelagem LES para turbulência, cujo modelo foi implementado no OpenFOAM®.

2 OBJETIVOS

O objetivo principal deste trabalho é realizar a implementação da técnica FGM no pacote aberto OpenFOAM® para resolver uma chama laminar não pré-misturada. Como forma de verificar a implementação, parte do trabalho de Verhoeven, 2011 será usado como referência, no qual Verhoeven implementou a técnica no programa comercial ANSYS® Fluent. O mesmo problema também será resolvido no OpenFOAM® utilizando um mecanismo reduzido de 1 passo, de forma a comparar ambas as abordagens de cinética química empregadas. Tais abordagens serão comparadas com resultados obtidos com o mecanismo *DRM19* reportados por Verhoeven. Uma vez verificada a implementação, o mesmo problema será resolvido variando a composição do combustível, de forma a avaliar a técnica em mais de um caso. Os resultados obtidos para a nova composição também serão comparados com uma simulação utilizando o mecanismo *DRM19*, a qual foi realizada por integrantes do Laboratório de Combustão da UFRGS.

3 FORMULAÇÃO MATEMÁTICA DE ESCOAMENTOS REATIVOS

Nesta seção, a formulação matemática de escoamentos reativos de chamas laminares é apresentada pelas equações de conservação resolvidas, cálculos das propriedades e modelagem da cinética química.

3.1 Equações de conservação

A conservação da massa é dada por

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u}) = 0, \quad (3.1)$$

onde ρ é a massa específica da mistura e \vec{u} é o vetor velocidade do escoamento. Em chamas laminares, a velocidade do fluido é pequena quando comparada à velocidade do som no meio. Neste regime de baixo número de Mach, variações na massa específica da mistura são muito mais dependentes de variações da temperatura do que da pressão, de forma que o escoamento pode ser considerado hidrodinamicamente incompressível. Com esta consideração, a equação de estado utilizada para calcular a densidade é dada por

$$\rho = \frac{p_0 MW_{mist}}{R_u T}, \quad (3.2)$$

sendo p_0 considerada a pressão atmosférica, MW_{mist} a massa molar da mistura e R_u a constante universal dos gases.

A equação de conservação da quantidade de movimento linear é dada por

$$\frac{\partial \rho \vec{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u} \otimes \vec{u}) = -\nabla p + \nabla \cdot \left[\mu \left(\nabla \vec{u} + (\nabla \vec{u})^T - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \vec{u}) I \right) \right], \quad (3.3)$$

onde p é a pressão, μ é a viscosidade dinâmica e I é o tensor identidade. Do lado esquerdo da igualdade, o primeiro termo representa os efeitos temporais e o segundo termo os efeitos advectivos, sendo toda a expressão à esquerda da igualdade a derivada material da velocidade do escoamento. Do lado direito da igualdade, o primeiro termo representa as forças de pressão, e o segundo termo representa as forças de origem viscosa.

Cabe observar que o termo das forças de campo, representado por ρg , foi excluído da Equação 3.3. Retirando-se este termo, eliminam-se os efeitos de empuxo, que são importantes para uma chama laminar do tipo jato. No entanto, os trabalhos utilizados como referência para comparação não consideraram este efeito pois visavam apenas comparar o método FGM com outras técnicas.

O transporte de massa de cada espécie química é descrito pela equação a seguir

$$\frac{\partial (\rho Y_i)}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{u} Y_i) = -\nabla \cdot \vec{J}_i + \dot{w}_i, \quad (3.4)$$

onde os termos da esquerda da igualdade representam a evolução temporal e o transporte por advecção da fração mássica Y_i da espécie i , respectivamente. Os termos à direita representam o divergente do fluxo difusivo \vec{J}_i da espécie i , e o termo fonte \dot{w}_i de consumo ou formação da espécie i . A Equação 3.4 é resolvida para $N_s - 1$ espécies, sendo N_s o número total de espécies. A fração mássica da espécie inerte N_2 é dada por

$$Y_{N_2} = 1 - \sum_{i=1}^{N_s-1} Y_i, \quad (3.5)$$

sendo Y_i as espécies químicas reativas do mecanismo utilizado.

A equação da conservação da energia é dada na forma da entalpia por

$$\frac{\partial (\rho h_s)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u} h_s) - \nabla \cdot \left(\frac{\lambda}{C_p} \nabla h_s \right) = S_h, \quad (3.6)$$

onde os termos à esquerda representam os termos temporais, transporte por advecção e o transporte de entalpia por difusão, respectivamente. O termo λ corresponde à condutividade térmica e o termo h_s à entalpia sensível. O termo S_h à direita da igualdade representa o termo fonte, definido por

$$S_h = - \sum_i h_i^0 MW_i R_i, \quad (3.7)$$

onde h_i^0 é a entalpia de formação da espécie i , MW_i é a massa molar da espécie i e R_i é a taxa volumétrica de produção da espécie i . Esta forma da equação da energia na forma da entalpia sensível foi utilizada nas simulações no OpenFOAM® com o mecanismo de 1 passo. Para os *flamelets*, a equação da energia é dada na forma da entalpia total (Equação C.5 do Apêndice C), cuja equação não possui um termo fonte neste caso.

A equação da energia considerada na Equação 3.6 desprezou os efeitos de variação de pressão devido à hipótese de baixo número de Mach. Desprezou-se também o fluxo de calor causado pelo gradiente de concentração das espécies (efeito Dufour). O fluxo de calor devido à difusão das espécies foi desconsiderado com a aproximação de número de Lewis unitário. Perdas de calor por radiação térmica também foram desconsideradas. O único fluxo de calor considerado foi devido ao gradiente de temperatura (Lei de Fourier).

3.2 Cálculo das propriedades

É importante ressaltar que nos cálculos das propriedades descritos abaixo são empregados nas simulações unidimensionais (*flamelets*) utilizadas na técnica FGM. Nas simulações multidimensionais resolvidas com a técnica, as propriedades são lidas do banco de dados criado a partir dos *flamelets*. Nas simulações multidimensionais resolvidas com o mecanismo reduzido de 1 passo, as equações utilizadas nos cálculos das propriedades estão apresentadas no Apêndice B.

A modelagem do fluxo difusivo \vec{J}_i pela lei de Fick é dada por

$$\vec{J}_i = -\rho D_{i,m} \nabla Y_i, \quad (3.8)$$

onde $D_{i,m}$ é o coeficiente de difusão binária da espécie i na mistura. Neste trabalho, este coeficiente é calculado considerando-se número de Lewis unitário, assumindo que o transporte por difusão da massa e da energia possuem a mesma taxa. O número de Lewis é dado por

$$Le_i = \frac{\lambda}{\rho C_p D_{i,m}}, \quad (3.9)$$

sendo Le_i o número de Lewis de cada espécie, e C_p o calor específico à pressão constante. As propriedades são calculadas através de equações fornecidas pelo estudo de Smooke, 1991, dadas por

$$\lambda/C_p = 2,58 \times 10^{-5} (T/298K)^{0,69}, \quad (3.10)$$

$$\mu/C_p = 1,67 \times 10^{-8} (T/298K)^{0,51}. \quad (3.11)$$

Efeitos de Soret e Dufour, que consideram difusão de massa devido à gradientes de temperatura e pressão, respectivamente, foram negligenciados. O calor específico da mistura é descrito como sendo uma média ponderada dos calores específicos das espécies,

$$C_p = \sum_{i=1}^{N_s} Y_i \cdot C_{p,i}. \quad (3.12)$$

3.3 Modelagem da cinética química

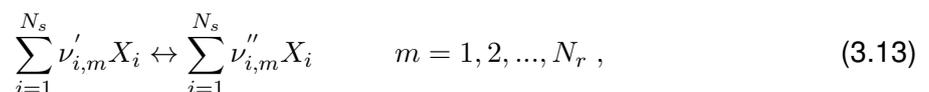
A modelagem da cinética química consiste no cálculo das taxas de consumo e produção das espécies químicas envolvidas nas reações químicas elementares. Mecanismos detalhados empregam tais cálculos para dezenas de espécies químicas e centenas de reações. Mecanismos reduzidos consideram somente algumas reações globais mais importantes, de forma que o tempo computacional é reduzido, contudo, erros são introduzidos.

Neste trabalho, as duas abordagens foram utilizadas. O mecanismo detalhado foi empregado nos *flamelets* utilizados na técnica FGM, e seu equacionamento é apresentado a seguir. O mecanismo reduzido utilizado considerou uma reação global de 1 passo, e a sua modelagem é apresentada no Apêndice B.

3.3.1 Mecanismo detalhado

O FGM, como será explicado na seção 4, apresenta um mecanismo detalhado no escopo unidimensional (*flamelets*). O equacionamento da modelagem da cinética química para reações elementares quaisquer é apresentado a seguir.

Seja um mecanismo constituído por N_r reações contendo N_s espécies. As M reações químicas podem ser expressas por



onde $\nu'_{i,m}$ e $\nu''_{i,m}$ são os coeficientes estequiométricos do lado dos reagentes e dos produtos, respectivamente, para a espécie i e reação m .

A taxa de reação \dot{w}_i da espécie i num mecanismo com N_r reações é dada por

$$\dot{w}_i = \sum_{m=1}^{N_r} (\nu''_{i,m} - \nu'_{i,m}) q_m, \quad (3.14)$$

em que q_m é dado por

$$q_m = k_{f,m} \prod_{i=1}^{N_s} [X_i]^{\nu'_{i,m}} - k_{b,m} \prod_{i=1}^{N_s} [X_i]^{\nu''_{i,m}}, \quad (3.15)$$

sendo $k_{f,m}$ e $k_{b,m}$ os coeficientes de taxa de reação dos sentidos direto e reverso, respectivamente, e X_i a concentração da espécie i . Os coeficientes de taxa de reação podem ser obtidos através de parâmetros empíricos empregados na equação modificada de Arrhenius, dada por

$$k = AT^\beta \exp\left(\frac{-E_A}{R_u T}\right), \quad (3.16)$$

onde A é o fator pré-exponencial, E_A a energia de ativação e β o expoente da temperatura. Estes são parâmetros empíricos encontrados geralmente por procedimentos de ajuste de resultados experimentais.

4 FLAMELET-GENERATED-MANIFOLDS

O método FGM foi introduzido por Oijen e Goey, 2000 como uma técnica de redução de cinética química que utiliza duas abordagens de simplificação de cinética química existentes: os modelos de *flamelets* e o método de redução *Intrinsic Low-Dimensional Manifold* (ILDM). Nesta seção, os modelos de *flamelets* e o método ILDM serão brevemente explicados de forma a apresentar a origem do método. Uma explicação sobre as variáveis de controle utilizadas e as equações resolvidas na simulação multidimensional são apresentadas na sequência.

4.1 Origem do método FGM

4.1.1 Modelos *Flamelets*

Os modelos baseados nos *flamelets* partem da ideia de que uma chama multidimensional pode ser representada por um conjunto de chamas unidimensionais. Equações de conservação na sua forma unidimensional são resolvidas para diferentes níveis de deformação da chama e a modelagem da cinética química é feita através de um mecanismo detalhado. Os resultados são guardados em uma tabela em função de certas variáveis de controle e da taxa de estiramento K da chama. Nas soluções multidimensionais, resolve-se uma equação de transporte para cada variável de controle e calcula-se K a partir do escoamento. Com essas informações, busca-se os valores correspondentes na tabela e a chama é reconstruída a partir destas informações. Esta abordagem apresenta resultados computacionalmente eficientes, no entanto, não representam tão bem a química do problema [Peters, 1984].

As equações de conservação unidimensionais resolvidas nos *flamelets*, a equação de transporte da variável de controle utilizada neste trabalho, a definição de K e sua respectiva equação de transporte encontram-se no Apêndice C. Para um melhor entendimento do conceito dos *flamelets*, sugere-se a leitura de Peters, 1984.

4.1.2 Método *Intrinsic Low-Dimensional Manifold*

O *Intrinsic Low-Dimensional Manifold* (ILDM) é um método de redução que resolve equações algébricas para um reator perfeitamente misturado e guarda os resultados em uma tabela (*manifold*) em função de um certo número de variáveis de controle. Quanto maior o

número de variáveis de controle, melhor serão os resultados, contudo, maior o custo computacional. Na simulação multidimensional, equações de transporte para essas variáveis de controle são resolvidas. Este método assume que certas reações químicas são rápidas o suficiente para serem consideradas em regime estacionário. A grande vantagem desta técnica com relação a outras técnicas que empregam a mesma consideração é que o ILDM identifica automaticamente as reações rápidas e lentas através de uma análise matemática do termo fonte das espécies químicas. A desvantagem do método é o fato de ele negligenciar os processos de difusão e convecção na chama, os quais são importantes em regiões de baixas temperaturas, e necessitar de um número de variáveis de controle elevado para uma boa precisão [Oijen, 2002]. Uma explicação detalhada do método ILDM pode ser encontrada em Mass e Pope, 1992.

4.1.3 FGM

O método FGM propõe construir um *manifold* a partir da solução dos *flamelets*. Desta forma, os processos de difusão e convecção, bem representados pelos *flamelets*, serão incluídos no *manifold*. Portanto, o FGM passa a possuir um *manifold* onde tanto os fenômenos de difusão e convecção quanto as informações químicas estão presentes. Na simulação multidimensional, equações de conservação e equações de transporte para as variáveis de controle são resolvidas. As propriedades necessárias nos cálculos destas equações são funções das variáveis de controle e são lidas e interpoladas do manifold. Os campos de temperatura e frações mássicas são reconstruídos ao fim da solução em uma etapa de pós-processamento. Para um melhor entendimento do método, sugere-se a leitura do artigo que deu origem a esta técnica [Oijen e Goey, 2000] bem como a leitura do capítulo 2 de Oijen, 2002.

4.2 Variáveis de controle

A escolha das variáveis de controle depende do problema que se quer resolver. Tais variáveis tem a função de parametrizar as variáveis térmicas e cinéticas da chama e conseguir representar o fenômeno físico em questão. Quanto maior o número de variáveis, mais detalhada será esta representação, porém, maior o custo computacional. No caso deste trabalho, no qual se deseja simular uma chama laminar não pré-misturada, sem troca de calor com as paredes, as mínimas variáveis de controle necessárias para representar de forma adequada a física do problema são a variável de progresso γ e a fração de mistura Z_t .

A definição da fração de mistura Z_t não tem significado físico. Ela é somente uma variável escalar que é transportada por advecção e por difusão pelo escoamento. Por se ausentar de um termo fonte em sua equação de transporte resolvida no *flamelet* (Equação C.7 do Apêndice C), a sua derivada com relação à coordenada espacial do *flamelet* não pode trocar de sinal, ou seja, seu valor não pode aumentar e diminuir subsequentemente no *flamelet*. Esta definição, puramente matemática, torna Z_t a variável parametrizadora do *manifold* [Verhoeven, 2011]. Sua similaridade no nome deve-se ao fato de ambas assumirem valor unitário na entrada do combustível, e nulo na entrada do oxidante.

A variável de progresso γ é a variável que contém as informações da cinética química e sua definição varia conforme o combustível utilizado. A definição de γ utilizada no *manifold* neste trabalho foi a mesma utilizada em Verhoeven, 2011, dada por:

$$\gamma = \alpha_1 Y_{CO_2} + \alpha_2 Y_{H_2O} + \alpha_3 Y_{H_2}, \quad (4.1)$$

onde α_i é definido pelo inverso da fração molar da espécie, $\alpha_i = 1/M_i$, sendo um fator de ponderação para as espécies envolvidas. Cabe ressaltar que esta definição é empregada somente na construção do *manifold*, pois na simulação multidimensional a variável de progresso γ é apenas um escalar transportado, assim como Z_t .

4.3 Equações resolvidas no escopo multidimensional

A grande redução no tempo computacional da técnica se deve ao fato de que, na simulação multidimensional, as equações de transporte de cada espécie química (Equação 3.4) bem como a equação da conservação da energia (Equação 3.6) são substituídas pelas equações de transporte das variáveis de controle. No caso de uma chama laminar difusiva, o sistema de equações resolvido consiste na equação da conservação da massa (Equação 3.1, equação da conservação da quantidade de movimento (Equação 3.3), equação de transporte da fração de mistura (Equação 4.2) e da variável de progresso (Equação 4.3), estas últimas dadas por

$$\vec{\nabla}(\rho \vec{u} Z_t) = \vec{\nabla} \left(\frac{\lambda}{C_p} \vec{\nabla} Z_t \right), \quad (4.2)$$

$$\vec{\nabla}(\rho \vec{u} \gamma) = \vec{\nabla} \left(\frac{1}{Le_\gamma} \frac{\lambda}{C_p} \vec{\nabla} \gamma \right) + \dot{\omega}_\gamma, \quad (4.3)$$

Pelo fato de $Le_\gamma = 1$, a fração λ/C_p corresponde ao termo difusivo em ambas equações (Eq. 4.2 e Eq. 4.3). A definição do termo fonte $\dot{\omega}_\gamma$ da variável de progresso é dada por

$$\dot{\omega}_\gamma = \alpha_1 \dot{\omega}_{CO_2} + \alpha_2 \dot{\omega}_{H_2O} + \alpha_3 \dot{\omega}_{H_2}, \quad (4.4)$$

cujos termos fontes das espécies são obtidos do mecanismo detalhado utilizado nos *flamelets*.

Cabe ressaltar que todas as propriedades termodinâmicas e de transporte são lidas no *manifold* empregando um algoritmo de interpolação bilinear em função dos campos de Z_t e γ obtidos pela solução das equações 4.2 e 4.3.

5 DEFINIÇÃO DO PROBLEMA ESTUDADO

Chamas laminares difusivas em um queimador do tipo jato são simuladas neste trabalho. O domínio computacional se baseia em um queimador cujo diâmetro do duto de combustível tem 12 mm e o diâmetro do duto co-axial de ar tem 55 mm. Considerou-se um domínio de 0,1 m de comprimento para a oxidação de metano diluído com N_2 , e 0,2 m para a oxidação de metano puro. Devido à condição de simetria do problema, considerou-se uma domínio computacional bidimensional axissimétrico formado por volumes uniformes. Um perfil parabólico de velocidade para a injeção de combustível foi utilizado em todas as simulações. Este perfil precisou ser implementado no programa, e é dado por

$$u = u_\infty \left(2 \frac{r}{D_c} - \left(\frac{r}{D_c} \right)^2 \right), \quad (5.1)$$

sendo r a coordenada radial, D_c o diâmetro da entrada de combustível e u_∞ o valor da velocidade máxima do perfil (0,23 m/s). A velocidade de injeção do ar é constante e igual a (0,23 m/s).

As composições de combustível utilizadas foram 55% de CH_4 e 45% de N_2 na comparação com Verhoeven, 2011, e 100% de CH_4 no segundo caso estudado. As condições inicial e de contorno para as simulações com o FGM se encontram no lado esquerdo do queimador esquematizado pela Figura 5.1 e do lado direito para o mecanismo de 1 passo.

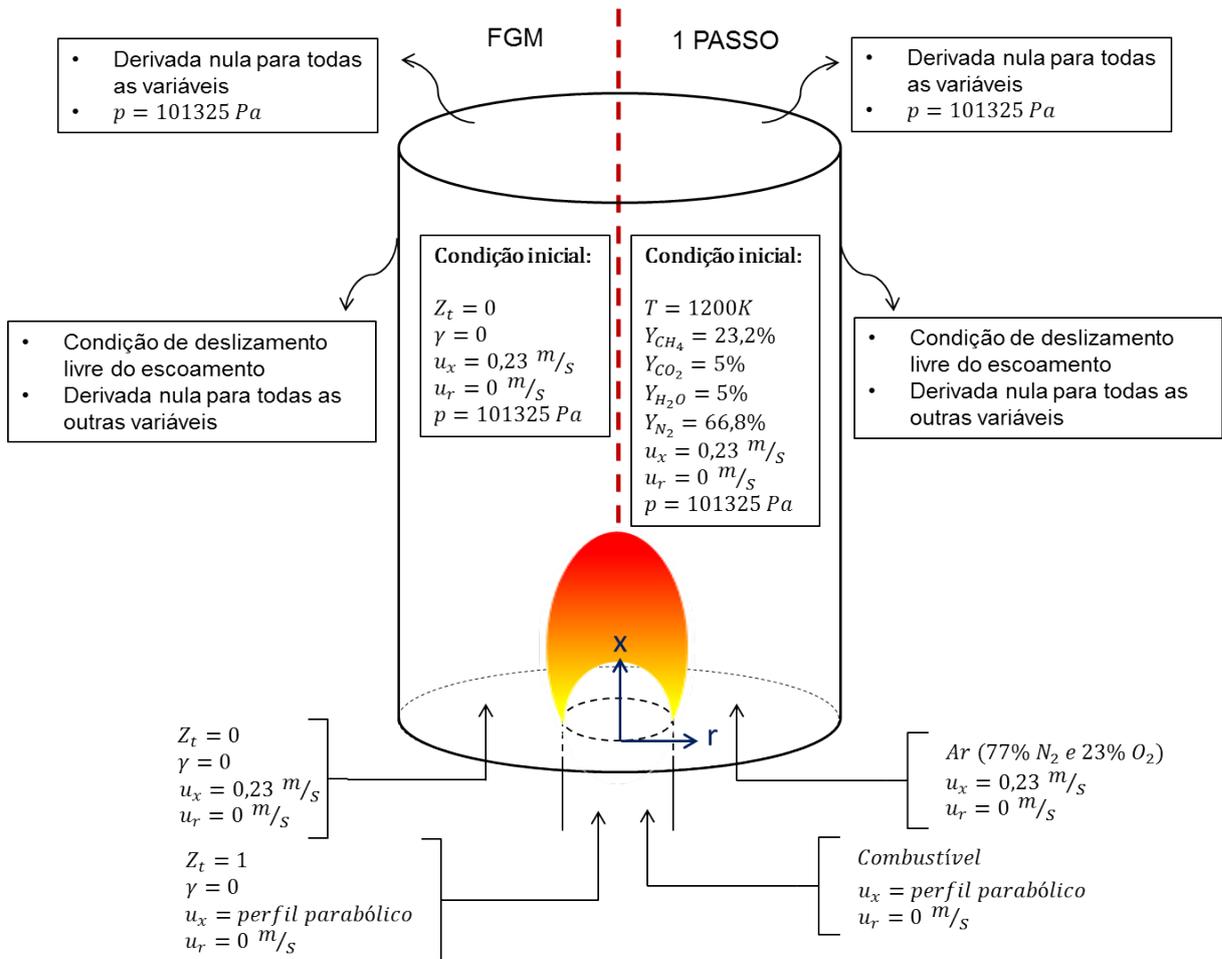


Figura 5.1 – Esquema do queimador de jato de combustível e ar, mostrando as condições iniciais e de contorno aplicadas para ambas as abordagens de cinética química empregadas.

6 A TÉCNICA FGM NO OPENFOAM®

Neste trabalho, o código da técnica FGM, já implementado por Fancello, 2014 no OpenFOAM®, foi alterado para simulações de chamas difusivas. Em seu trabalho, Fancello estudou a estabilização de chamas pré-misturadas com perda de calor utilizando o FGM. A variável de progresso e a entalpia foram as variáveis de controle utilizadas pelo auto. No presente trabalho, a equação de transporte da fração de mistura Z_t , necessária em uma chama difusiva, foi implementada. Além disso, foi necessário um novo sistema de busca e interpolação dos dados para o *manifold* do presente trabalho.

6.1 Procedimento de solução

Para a solução de chamas multidimensionais utilizando a técnica FGM, primeiramente resolve-se o escoamento a frio, cujo campo resultante de Z_t é utilizado como condição inicial para a ignição. Então, a ignição é dada prescrevendo-se valores de γ correspondentes ao valor máximo encontrado para o termo fonte $\dot{\omega}_\gamma$ no *manifold*. A região de ignição é imposta logo na saída do queimador, na posição onde encontram-se valores de Z_t próximos ao estequiométrico. O algoritmo do FGM (ver Figura 6.1) é executado até a convergência, quando os campos de temperatura e fração mássica das espécies são pós-processados através das funções de busca e interpolação do *manifold*.

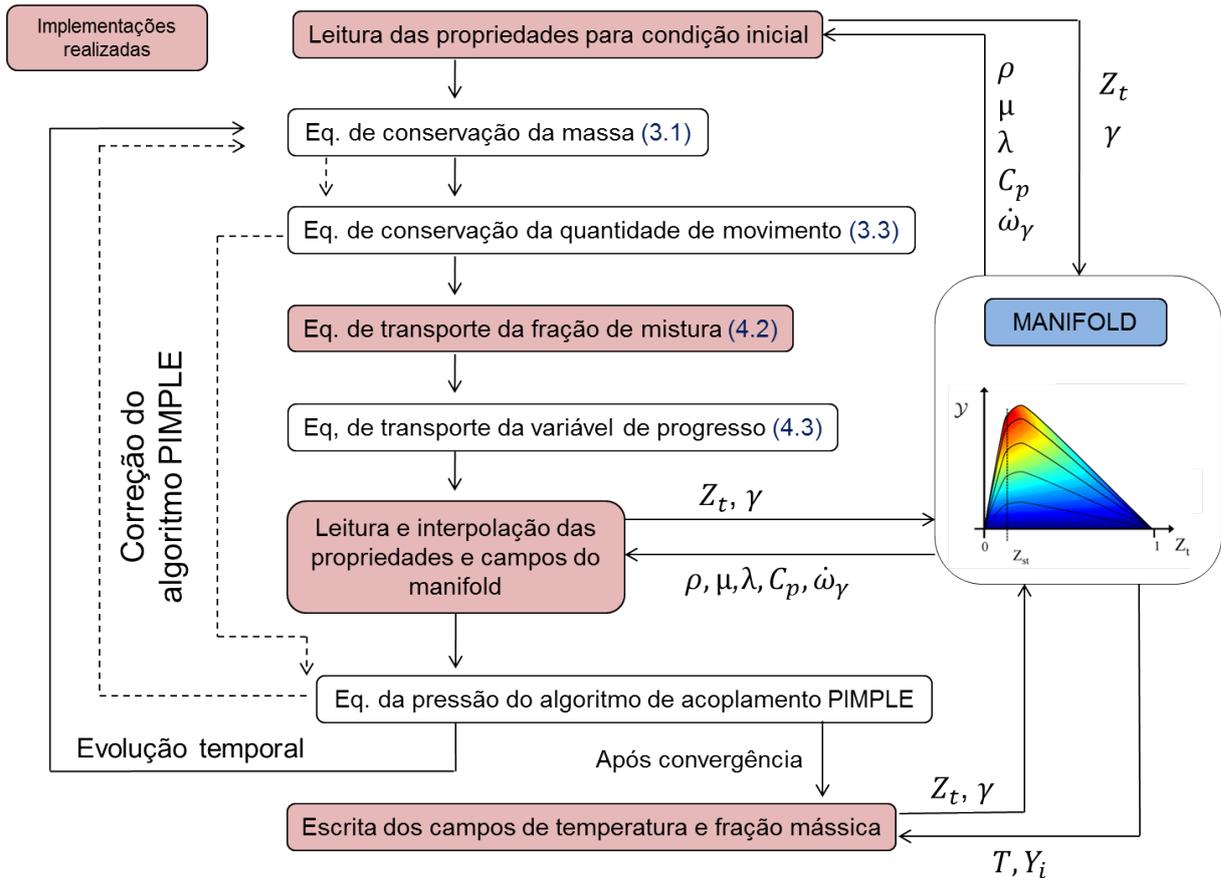


Figura 6.1 – Algoritmo de solução da simulação multidimensional no OpenFOAM® indicando as etapas implementadas (em vermelho) neste trabalho.

Utilizou-se uma abordagem pseudo-transiente para as simulações do presente trabalho, visto que o problema resolvido entra em regime permanente. Foi necessário utilizar passos de tempo pequenos (0,0001 s) no início das simulações e, somente após um certo número de iterações, utilizou-se um passo de tempo unitário (1 s). Valores baixos de sub-relaxação foram necessários, principalmente após a ignição, onde o valor de 0.1 foi utilizado para todas as equações. O critério de convergência adotado foi de 1×10^{-6} para todas as equações.

6.2 Sistema de busca e interpolação do *manifold*

Na Figura 6.2, o banco de dados para ρ e para μ estão exemplificados, onde as curvas coloridas representam os diferentes *flamelets* simulados. A transição de cor num mesmo *flamelet* corresponde aos diferentes valores assumidos pela propriedade em função da combinação de Z_t e γ . As demais propriedades são obtidas de forma análoga, bem como os campos de temperatura e frações mássicas, os quais são somente pós-processados.

As etapas de leitura das propriedades apresentadas no algoritmo de solução da Figura 6.1 são esquematizadas com mais detalhes pela Figura 6.2. Após resolver as Equações 4.2 e 4.3, o par (Z_t, γ) é utilizado como parâmetro de entrada no sistema de busca no *manifold*. O sistema consiste em encontrar as 4 combinações mais próximas deste par no banco de dados. Cada combinação única de Z_t e γ corresponde a uma linha do *manifold*, e o resultado do sistema de busca são os 4 índices correspondentes às 4 linhas das combinações mais próximas. As propriedades de interesse são encontradas de forma direta, onde cada propriedade corresponde a uma coluna do banco de dados. Assim, utiliza-se uma interpolação bi-linear para encontrar o valor da propriedade de interesse correspondente ao par (Z_t, γ) (ponto em verde na Figura 6.2) a partir dos 4 valores do banco de dados (pontos em azul na mesma figura). Este valor será

utilizado na próxima iteração nos cálculos das Equações 3.1, 3.3, 4.2 e 4.3.

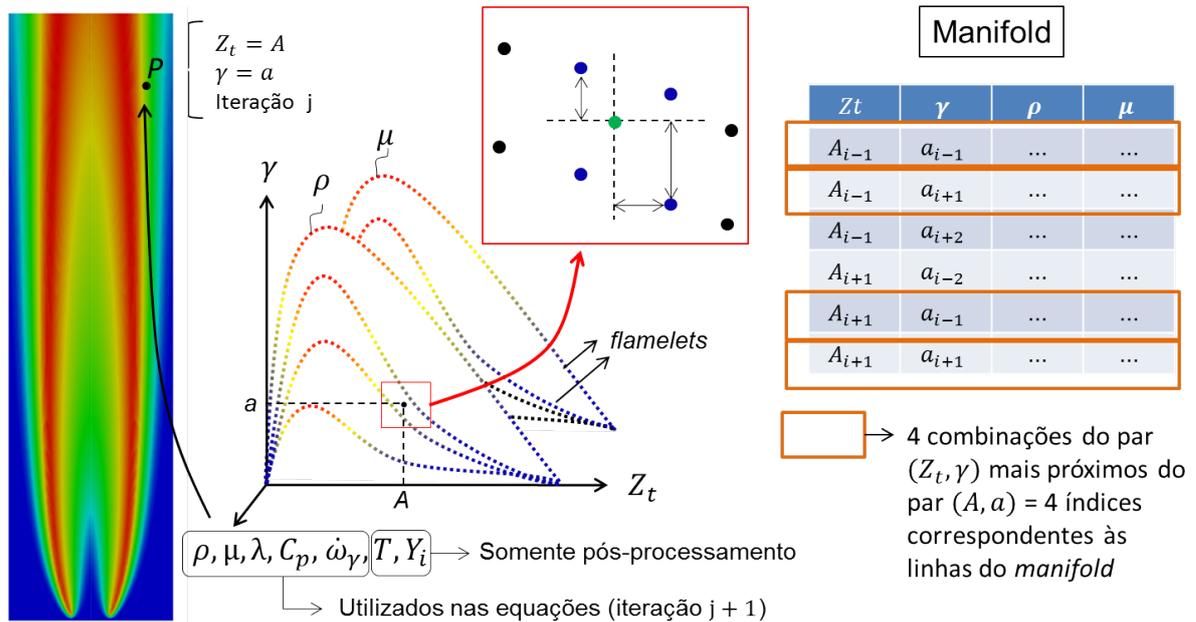


Figura 6.2 – Sistema de busca e interpolação empregado no *manifold*. As propriedades são função do par (Z_t, γ) e são obtidas por uma interpolação bi-linear, utilizadas nas equações de conservação e transporte na próxima iteração. Os campos de temperatura e frações mássicas são obtidos de forma análoga na reconstrução da chama (pós-processamento).

7 RESULTADOS E DISCUSSÕES

Nesta seção, os resultados obtidos serão apresentados e discutidos. Diferentes configurações de chama foram simuladas e um resumo das mesmas pode ser encontrado na Tabela 7.1 abaixo.

Tabela 7.1 – Configuração das simulações presentes neste trabalho (NA = Não se aplica; LC = Laboratório de Combustão)

| Nome no trabalho | Combustível | Método | Autor | Definição γ |
|-----------------------|------------------------|-----------|-------------------|--------------------|
| Detalhado - Verhoeven | 55% CH_4 e 45% N_2 | Detalhado | [Verhoeven, 2011] | NA |
| FGM - Verhoeven | 55% CH_4 e 45% N_2 | FGM | [Verhoeven, 2011] | Equação 4.1 |
| FGM | 55% CH_4 e 45% N_2 | FGM | Presente trabalho | Equação 4.1 |
| 1 passo | 55% CH_4 e 45% N_2 | 1 PASSO | Presente trabalho | NA |
| DRM19 | 100% CH_4 | Detalhado | LC - UFRGS | NA |
| FGM1 | 100% CH_4 | FGM | Presente trabalho | Equação 4.1 |
| FGM2 | 100% CH_4 | FGM | Presente trabalho | Equação 7.1 |
| 1 passo | 100% CH_4 | 1 PASSO | Presente trabalho | NA |

Resultados obtidos em Verhoeven, 2011, são usados como referência para verificar a implementação do FGM no OpenFOAM®. A malha utilizada tem 100.000 volumes para ambas simulações (mecanismo detalhado e FGM). Apesar do teste de independência de

malha (Apêndice A) ter mostrado que uma malha menos refinada seria adequada, utilizou-se uma malha de tamanho similar. Além dos resultados obtidos com o FGM, Verhoeven reportou resultados de um mecanismo detalhado para comparar com o FGM, onde se mostrou boa concordância dos perfis de temperatura e frações mássicas de algumas espécies. No presente trabalho, utilizou-se os perfis de temperatura e fração mássica de CO para verificar a implementação. Adicionalmente, simulou-se o mesmo problema utilizando o mecanismo simplificado de 1 passo como forma de comparar ambas abordagens de cinética química.

Conforme apresentado nas Figuras 7.1a e 7.1b, os perfis de temperatura encontrados com a técnica FGM no presente trabalho e por Verhoeven, 2011 apresentam ótima concordância, enquanto os perfis de fração mássica de CO mostrados nas Figuras 7.1c e 7.1d apresentam desvios pequenos na região com altos gradientes para a posição axial $H = 0,04 m$. Tais resultados mostram que a implementação da técnica FGM no pacote OpenFOAM® foi realizada com sucesso.

Em comparação ao mecanismo detalhado reportado por Verhoeven, percebe-se a boa concordância com o método FGM para os perfis de temperatura e fração mássica de CO . Já o mecanismo de 1 passo apresentou grandes desvios nos perfis de temperatura, mostrando-se, portanto, inferior à técnica FGM.

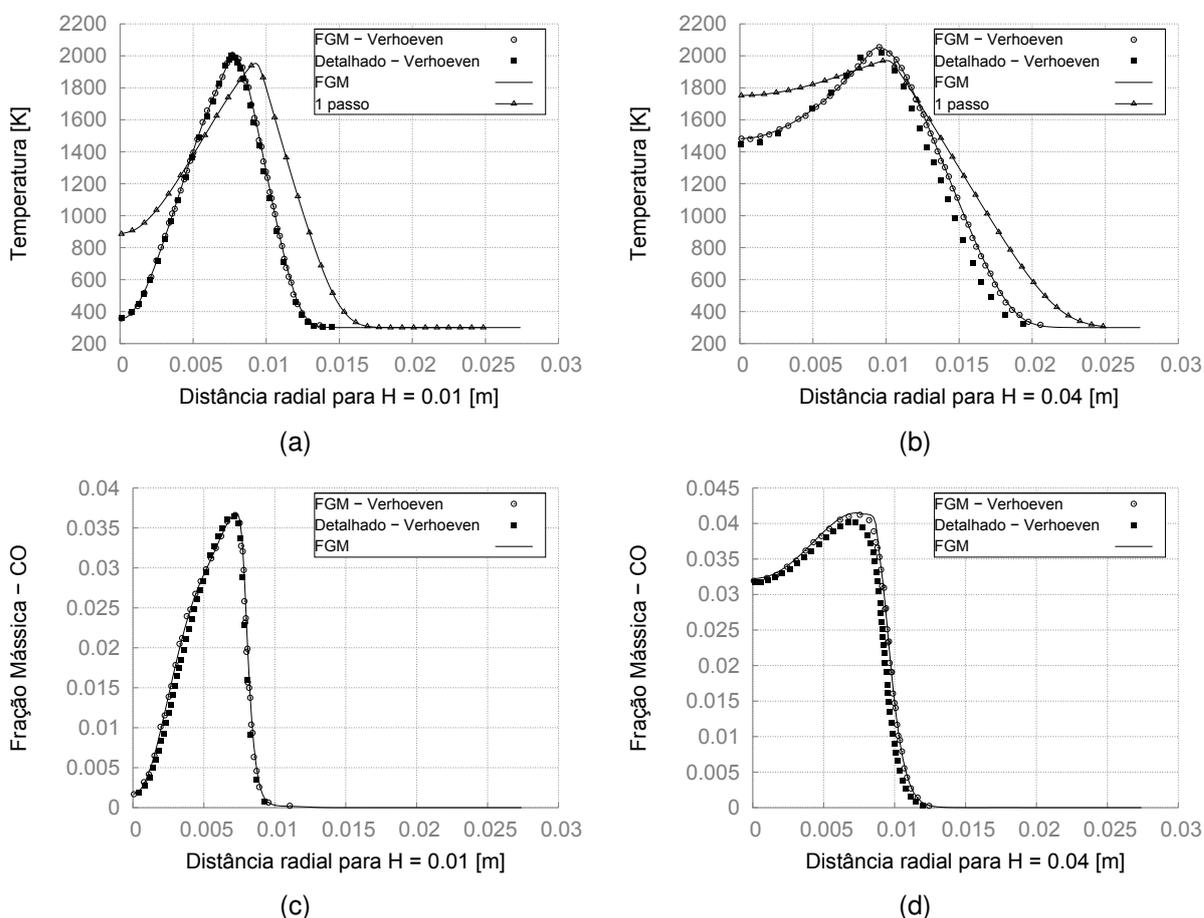


Figura 7.1 – Perfis radiais de temperatura e fração mássica de CO para diferentes posições axiais do queimador. Resultados do presente trabalho (FGM e 1 passo) comparados com os resultados de Verhoeven, 2011 (FGM - Verhoeven e Detalhado - Verhoeven).

Uma vez verificada a implementação do FGM, realizou-se uma simulação com uma composição de combustível diferente para avaliar a técnica em um segundo caso. O combustível utilizado foi 100% CH_4 , e o tamanho de malha utilizado foi o mesmo do caso anterior. O comprimento do queimador aumentou de 0,1 m para 0,2 m, pois o comprimento de chama

umenta para 100% CH_4 . Para este segundo caso, simulações utilizando mecanismo de 1 passo também foram realizadas para comparar ambas abordagens de cinética química. Uma simulação com um mecanismo detalhado (*skm-DRM19*) simulado no ANSYS® Fluent por integrantes do Laboratório de Combustão da UFRGS também será usada para comparação.

Neste segundo caso, os perfis de temperatura para o mecanismo de 1 passo apresentaram resultados mais próximos do mecanismo detalhado (Figuras 7.2a e 7.2b) quando comparados às simulações de metano diluído em N_2 . Acredita-se que resultados tão ruins obtidos com o mecanismo de 1 passo para metano diluído se devem ao fato dos coeficientes de taxa de reação utilizados terem sido ajustados para metano puro, onde a velocidade de chama era a variável de comparação no estudo [Westbrook e Dryer, 1981]. Esta é uma limitação de mecanismos globais, os quais possuem coeficientes de taxas de reação ajustados para condições específicas. Uma situação diferente das condições dos experimentos pode não responder bem a estes ajustes.

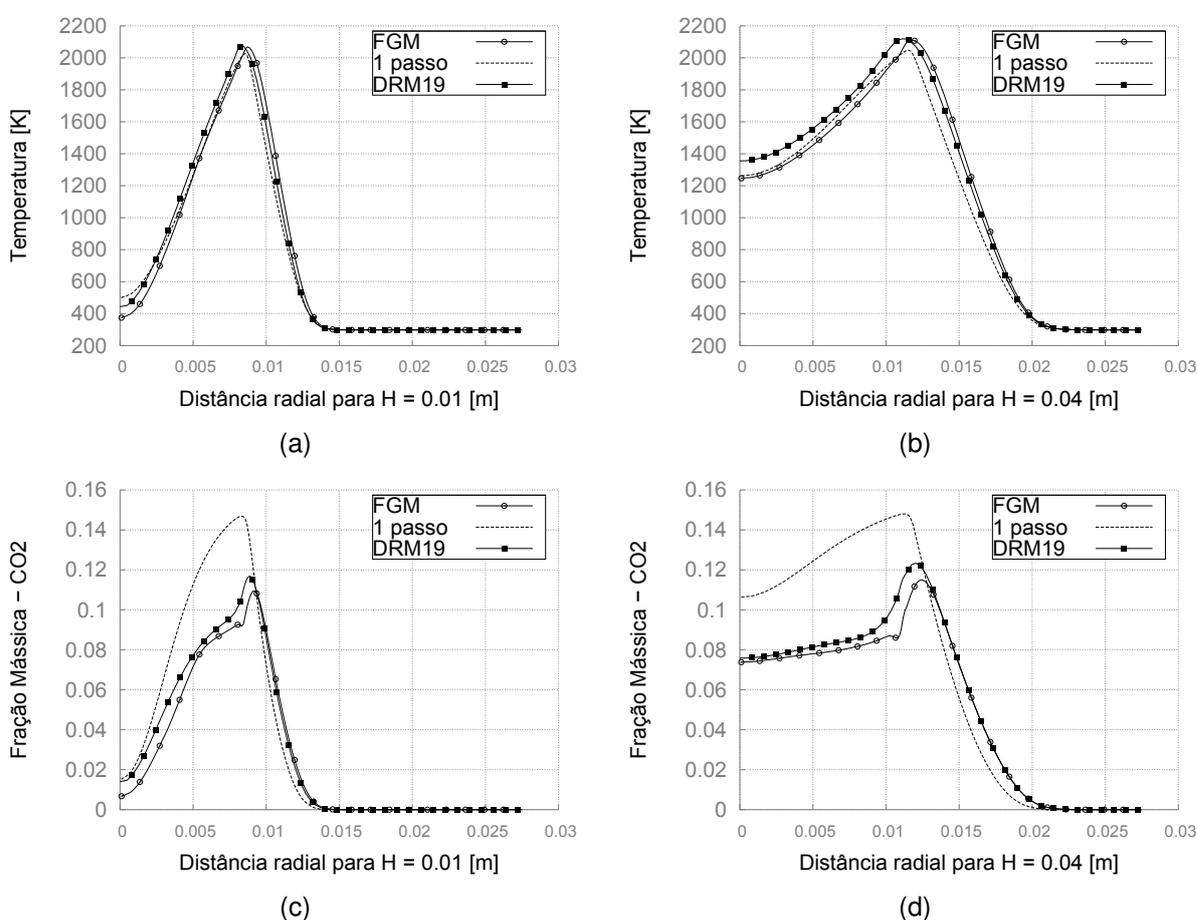


Figura 7.2 – Perfis radiais de temperatura e fração mássica de CO_2 para o segundo caso estudado (CH_4 puro). Resultados obtidos no presente trabalho (FGM e 1 passo) comparados aos resultados obtidos em simulação com o mecanismo *skm-DRM19* realizada por integrantes do Laboratório de Combustão da UFRGS.

Para metano puro, os perfis de temperatura obtidos com o FGM e com o mecanismo de 1 passo concordam de forma similar com o mecanismo detalhado, conforme as Figuras 7.2a e 7.2b. A diferença evidente entre o FGM e o mecanismo de 1 passo é vista nos perfis de fração mássica de CO_2 mostrados nas Figuras 7.2c e 7.2c, sendo o FGM o método que apresentou os melhores resultados. Analisando os contornos de temperatura da Figura 7.3, percebe-se que o mecanismo de 1 passo apresentou valores de temperatura cerca de $50K$ mais baixo nas regiões de altos gradientes. Para o FGM, no entanto, apesar dos valores possuírem magnitudes similares no FGM com relação ao detalhado, comprimentos de chama maiores

foram observados. Resultados inferiores de mecanismos reduzidos comparados à técnica FGM também foram reportados por Hoerlle *et al.*, 2015.

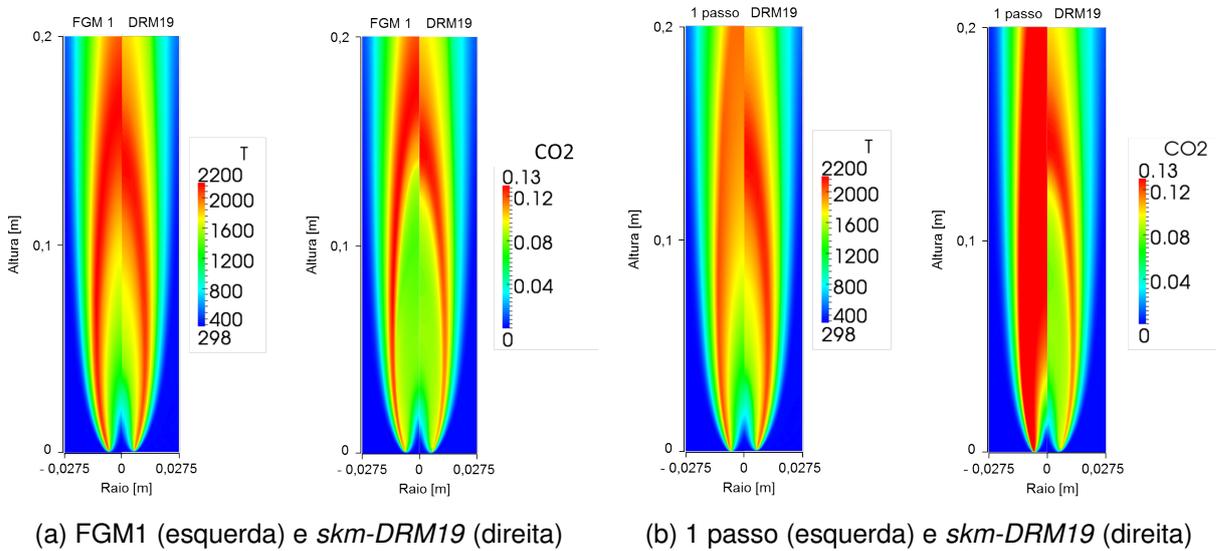


Figura 7.3 – Contorno de temperatura para o segundo caso estudado (CH_4 puro).

Apesar do método FGM apresentar bons resultados para ambos casos estudados, percebe-se que para metano diluído os perfis de temperatura e fração mássica concordaram mais com os perfis do detalhado do que para metano puro. Como forma de estudar esta variação nos resultados, variou-se a definição da variável de progresso na construção do manifold para metano puro. A nova definição é dada por

$$\gamma = \alpha_2 Y_{H_2O} + \alpha_3 Y_{H_2}, \quad (7.1)$$

onde a influência da fração mássica de CO_2 foi retirada da definição antiga.

Conforme pode ser visto nas Figuras 7.4a e 7.4b, os resultados obtidos para esta nova definição da variável de progresso (chamado de FGM2) foram piores que a definição antiga (chamado de FGM1). Isto se evidencia de forma mais clara nos perfis de fração mássica de CO_2 , observados nas Figuras 7.4c e 7.4d. Contudo, o que se deseja mostrar é que a simples retirada de uma das frações mássicas da definição de γ alterou de forma considerável os perfis de temperatura e significativamente os perfis de fração mássica de CO_2 , evidenciando a sensibilidade dos resultados com relação a esta definição.

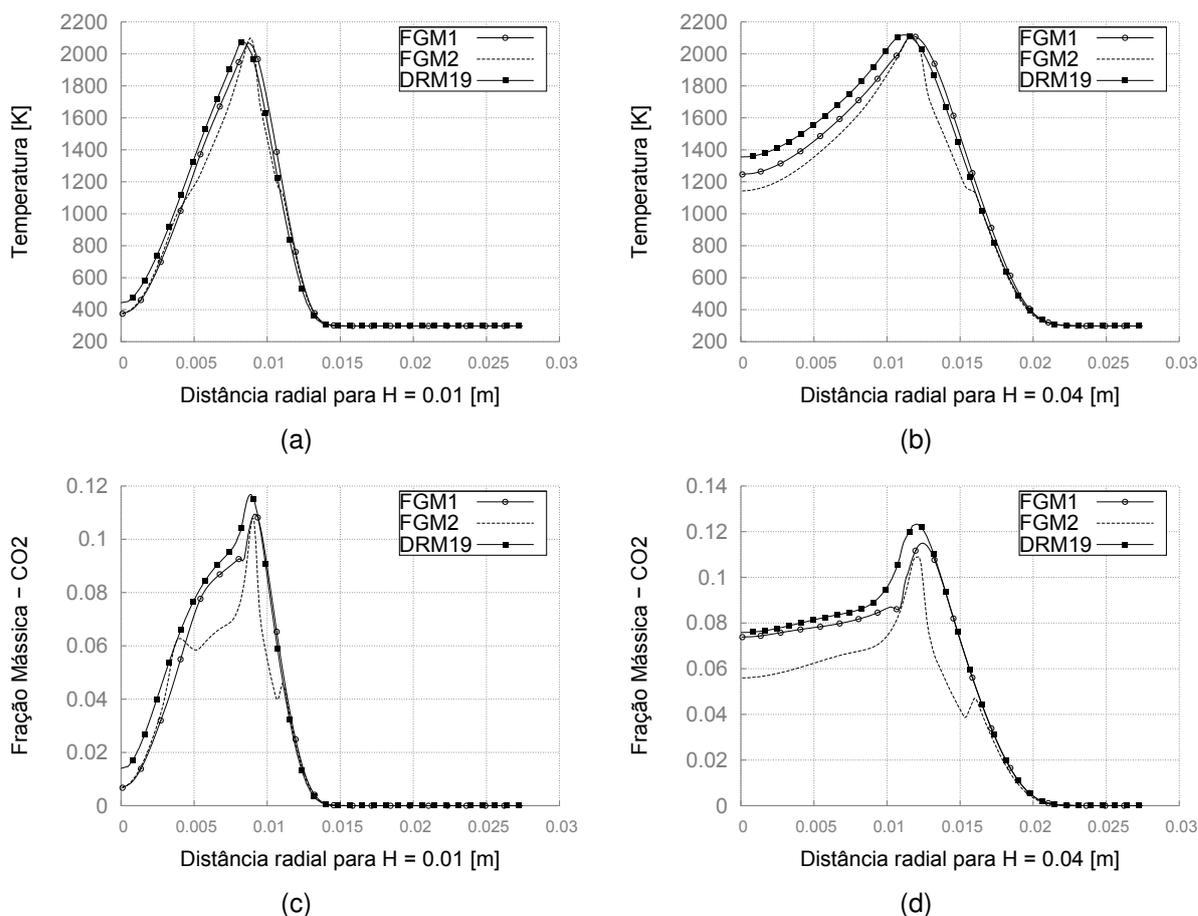


Figura 7.4 – Perfis radiais de temperatura e fração mássica de CO_2 comparando as simulações utilizando diferentes definições para a variável de progresso com o mecanismo *skm-DRM19*. O FGM1 corresponde à definição da Equação 4.1 e FGM2 corresponde à definição da Equação 7.1.

8 CONCLUSÃO

No presente trabalho, a implementação do método FGM para simulações multidimensionais foi realizada no programa OpenFOAM®. O problema resolvido foi com a técnica de uma chama laminar difusiva em um queimador do tipo jato de combustível e ar. Os resultados obtidos foram comparados com os resultados de Verhoeven, 2011, no qual se fez a mesma implementação no programa comercial ANSYS® Fluent. As curvas de temperatura e fração mássica de CO do presente trabalho apresentaram ótima concordância com os de Verhoeven, verificando a implementação da técnica no OpenFOAM®. Simulações utilizando um mecanismo de 1 passo para o mesmo problema também foram realizadas, onde os resultados encontrados apresentaram grandes desvios com relação ao mecanismo detalhado *DRM19*.

Após verificada a implementação, estudou-se um segundo caso para outra composição de combustível. Utilizou-se os resultados de uma simulação com o mecanismo *skm-DRM19*, disponível no Laboratório de Combustão, para comparar os resultados obtidos com o FGM e com o mecanismo de 1 passo para 100% CH_4 . Os resultados obtidos com o FGM não concordaram tão bem quanto o primeiro caso. Os perfis de temperatura obtidos em ambas abordagens de cinética química (FGM e 1 passo) apresentaram o mesmo comportamento, sendo o FGM um pouco mais preciso nas regiões de altos gradientes. Para os perfis de fração mássica de CO_2 , no entanto, o FGM apresentou resultados consideravelmente melhores que o mecanismo de 1 passo, o qual apresentou considerável desvio em relação ao mecanismo *skm-DRM19*. Além dos melhores resultados, outra grande vantagem do FGM é sua capacidade

de obtenção dos campos de fração mássica de qualquer espécie presente no mecanismo detalhado empregado nos *flamelets* ao invés de somente algumas espécies, como no caso de mecanismos reduzidos de reação global.

Devido aos resultados um pouco piores para o FGM no segundo estudo, resolveu-se variar a definição da variável de progresso de forma a estudar sua influência nos resultados. Os resultados encontrados com a mudança desta definição foram piores que o anterior, no entanto, conseguiu-se mostrar que existe uma grande sensibilidade dos resultados em relação a esta definição.

Por ser uma técnica recente, muitos assuntos ainda estão em aberto para serem melhor estudados e desenvolvidos. Um deles é o estudo de uma metodologia para definição da variável de progresso, pela qual os resultados se mostraram bastante sensíveis. A implementação de equações de transporte de variáveis de controle adicionais pode ser estudada, tanto para aumentar a exatidão da técnica quanto para representar outros fenômenos físicos, como turbulência, trocas de calor entre as paredes, entre outros.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Ministério de Minas e Energia. **Balço Energético Nacional**. 2015. Disponível em: <<http://www.mme.gov.br/>>. Acesso em: 13 out. 2015.
- Ellsey, J., Laskey, K., Oran, E. "**Study of Confined Diffusion Flame**". Naval Research Laboratory, v.6704, 1990.
- Fancello, A. "**Dynamic and turbulent premixed combustion using Flamelet-Generated-Manifold in OpenFOAM**". Tese de doutorado, Eindhoven University of Technology, 2014.
- Hoerlle, C., Pereira, F. "**Comparison of global reaction mechanisms in CH₄-CO₂/air counterflow diffusion flames**". ENCIT, Belém, PA, Brasil, v.15th, 2014.
- Hoerlle, C., Zimmer, L., Pereira, F. "**Numerical study of laminar diffusion flames of CH₄ diluted with CO₂ employing global kinetic mechanisms and the Flamelet-Generated-Manifold technique**". CleanAir, Lisboa, Portugal, v.12th, 2015.
- Kazakov, A., Frenklach, M. "**Reduced reaction sets based on GRI-Mech 1.2**". 1994.
- Lin, K., Sunderland, G. F. P., Urban, D., Yuan, Z. "**Shapes of Nonbuoyant Round Luminous Hydrocarbon/Air Laminar Jet Diffusion Flames**". Combustion and Flame, v.116, p.415–431, 1999.
- Mass, U., Pope, S. "**Simplifying Chemical Kinetics: intrinsic low-dimensional manifolds in composition space**". Combustion and Flame, v.88, p.239–264, 1992.
- N.Peters, B.Rogg. "**Reduced Kinetic Mechanisms for Applications in Combustion Systems**". Berlin, Germany: Lecture Notes in Physics, 1993. 3–4p.
- Oijen, J. v. "**Flamelet-generated manifolds - development and application to premixed laminar flames**". Tese de doutorado, Eindhoven University of Technology, 2002.
- Oijen, J. v., Goey, L. d. "**Modelling of premixed laminar flames using flamelet-generated-manifolds**". Combustion Science and Technology, v.161, p.113–137, 2000.
- Peters, N. "**Laminar diffusion flamelet models in non-premixed turbulent combustion**". Progress in Energy and Combustion Science, n.10, p.319–339, 1984.
- Santoro, R., Yeh, T., Horvath, J., H. G.Semerjian. "**The Transport and Growth of Soot Particles in Laminar Diffusion Flames**". Combustion Science and Technology, v.53, p.89–115, 1987.
- Smooke, M. "**Reduced Kinetic Mechanisms and Asymptotic Approximations for Methane-Air Flames**". Springer-verlag, 1991.
- Smooke, M., Long, M., Connelly, B., M. B.Colket, Hall, R. "**Soot Formation in Laminar Diffusion Flames**". Combustion and Flame, v.143, p.613–628, 2005.
- Turns, S. R. "**An Introduction to Combustion - Concepts and Applications**". 3ª edição.ed. New York, US: The McGraw-Hill Global Education Holdings, 2012. 111–112p.
- Verhoeven, L. M. "**Radical Tar Removal - Numerical Modelling of Tar Conversion in a Partial Combustion Reactor**". Tese de doutorado, Eindhoven University of Technology, 2011.
- Westbrook, C., Dryer, F. "**Simplified Reaction Mechanisms for the Oxidation of Hydrocarbon Fuels in Flames**". Combustion Science and Technology, v.27, p.31–43, 1981.

APÊNDICE A – CONVERGÊNCIA NUMÉRICA E INDEPENDÊNCIA DE MALHA

Para o mecanismo de 1 passo, constatou-se que a malha de 137 mil volumes volumes é necessária para se obter uma independência dos resultados com relação ao tamanho da malha. Tamanho refino se deve ao fato da malha ser uniforme. Com um refino localizado nas regiões de altos gradientes ou com algoritmos de malha adaptativa, acredita-se que este valor diminuiria consideravelmente. O critério adotado para decisão foi a análise visual de um perfil de temperatura radial (ver Figura A.1a).

Para o FGM, foram realizadas simulações com as mesmas malhas utilizadas nas simulações com mecanismo de 1 passo. Nota-se que há pouca diferença entre os resultados obtidos com a malha de 28.500 volumes para a malha com 63.840 volumes, e quase nenhuma diferença entre as duas malhas mais refinadas. Estas simulações foram feitas para as simulações com metano puro, sem diluição de N_2 . Concluiu-se que a malha de 63.840 volumes já seria adequada, porém, nas simulações com metano diluído em N_2 realizadas pela Verhoeven, 2011, a malha utilizada foi de aproximadamente 100.000 volumes. Portanto, como o objetivo nas comparações com este trabalho era a validação da implementação, optou-se por uma malha de 100 mil volumes também.

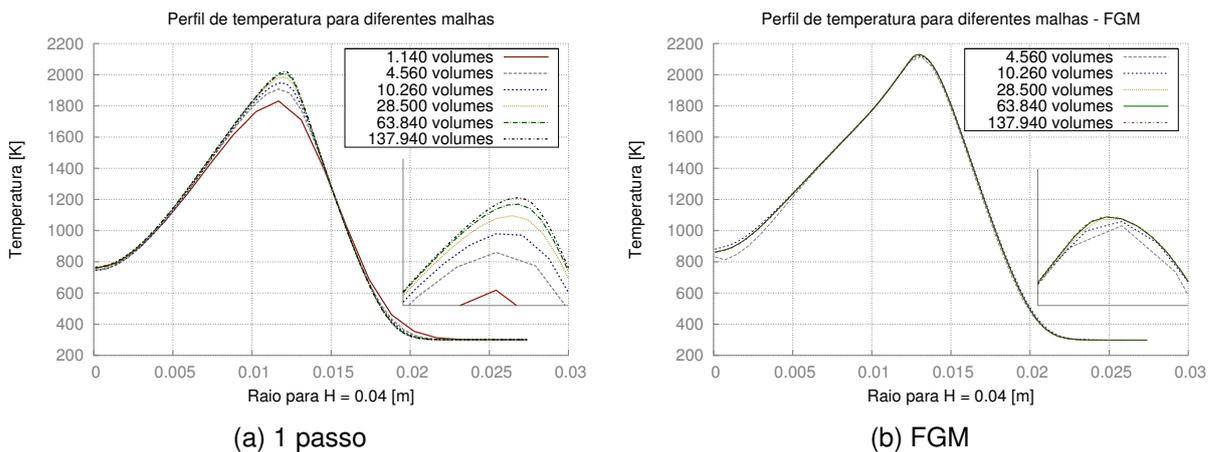


Figura A.1 – Perfis radiais de temperatura para diferentes malhas, a uma altura de $0.04m$ da entrada, para ambas abordagens de cinética química utilizadas no presente trabalho (1 passo e FGM)

APÊNDICE B – MECANISMO DE 1 PASSO - CÁLCULO DE PROPRIEDADES E MODELAGEM DE CINÉTICA QUÍMICA

Diferentemente do FGM, onde as propriedades são retiradas do *manifold* no escopo multidimensional, em um mecanismo reduzido de 1 passo as propriedades devem ser calculadas seguindo modelos termodinâmicos, modelos de transporte e equações de estado. As equações descritas a seguir foram todas identificadas no código do OpenFOAM.

B.1 Modelos de transporte

A viscosidade dinâmica é calculada através da equação de *Sutherland* para cada espécie, dada por

$$\mu_i = \frac{A_{s_i} \sqrt{T_i}}{1 + T_{s_i}/T_i}, \quad (\text{B.1})$$

onde os coeficientes A_s e T_s são parâmetros de entrada para cada espécie química. O cálculo da condutividade térmica λ é dado pela correlação Modificada de *Eucken*, dada pela equação

$$\lambda_i = \mu_i(p, T) C_v \left(1.32 + \frac{1.77 R_i}{C_v} \right), \quad (\text{B.2})$$

onde R_i é a constante universal dos gases para um determinado gás i , que se relaciona com a massa molar MW_i do gás através da equação

$$R_i = \frac{R_u}{MW_i}. \quad (\text{B.3})$$

O fluxo difusivo é dado pela lei de Fick, conforme a Equação 3.8. Após analisar o código do OpenFOAM, constatou-se que a difusividade $D_{i,m}$ é calculada com a aproximação de número de Schmidt unitário, assumindo que a difusividade mássica seja igual à difusividade de quantidade de movimento linear. O número de *Schmidt* é dado por

$$S_c = \frac{\mu}{\rho D}. \quad (\text{B.4})$$

B.2 Modelo termodinâmico

Para avaliar o calor específico à pressão constante C_p , foi utilizado as tabelas *JANAF*, já incluídas no programa, onde a partir dos coeficientes a_0 , a_1 , a_2 , a_3 e a_4 o C_p é calculado pela seguinte equação

$$C_p = R(((a_4 T + a_3) T + a_2) T + a_1) T + a_0), \quad (\text{B.5})$$

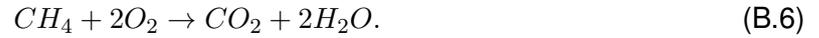
sendo R a constante universal para um determinado gás.

B.3 Equação de estado

Visto que a mesma simplificação de escoamento hidrodinamicamente incompressível é adotada, a equação de estado é dada na mesma forma que a Equação 3.2.

B.4 Modelagem da cinética química

A reação global considerada é dada por



Segundo Turns, 2012, é comum o uso da Equação B.7 para aplicações de engenharia. Tal equação é utilizada nos códigos presentes nos modelos de mecanismos reduzidos do OpenFOAM, e a taxa de produção ou consumo do hidrocarboneto considerado é dada por

$$\frac{d[C_xH_y]}{dt} = -A \exp\left(\frac{-E_A}{R_u T}\right) [C_xH_y]^m [O_2]^n, \quad (B.7)$$

onde A , E_A , m e n são parâmetros empíricos, e C_xH_y um hidrocarboneto qualquer (no caso deste trabalho, CH_4).

APÊNDICE C – EQUACIONAMENTO DOS FLAMELETS

Chamas unidimensionais contra-corrente difusivas são resolvidas para construção do banco de dados a ser usado nas simulações multidimensionais. Soluções em regime estacionário são obtidas resolvendo-se o conjunto de equações de conservação apresentado a seguir. As equações descrevem a conservação da massa, espécies, entalpia e deformação da chama. Os desvios da chama em relação à situação unidimensional são contabilizados pela taxa de estiramento K , definida por Oijen e Goey, 2000 como uma taxa relativa de mudança de massa $M(t)$ contida em um volume infinitesimal $V(t)$ da chama

$$M(t) = \int_{V(t)} \rho dx, \quad (C.1)$$

e que se move com a velocidade local da superfície da chama, chegando a

$$K = \frac{1}{M} \frac{dM}{dt}. \quad (C.2)$$

Negligenciando a curvatura da chama, o sistema de equações é dado por

$$\frac{\partial \rho u}{\partial x} = -\rho K, \quad (C.3)$$

$$\frac{\partial \rho u Y_i}{\partial x} = \frac{1}{Le_i} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\lambda}{C_p} \frac{\partial Y_i}{\partial x} \right) + \dot{w}_i - \rho K Y_i, \quad (C.4)$$

$$\frac{\partial \rho u h}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\lambda}{C_p} \frac{\partial h}{\partial x} + \sum_{i=1}^{N_s} h_i \frac{\lambda}{C_p} \left(\frac{1}{Le_i} - 1 \right) \right) - \rho K h + \dot{q}_R''', \quad (C.5)$$

A equação de transporte é derivada da quantidade de movimento radial, onde é apresentada da seguinte forma em Oijen e Goey, 2000

$$\frac{\partial \rho u K}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial K}{\partial x} \right) - \rho K^2 + \rho_2 a^2, \quad (C.6)$$

na qual x , u e K representam respectivamente a coordenada espacial perpendicular à superfície da chama, velocidade e deformação da chama. N_s representa o número total de espécies. Na Equação C.6, a representa a taxa de deformação linear $a = -\partial u / \partial x$ e ρ_2 a densidade, ambos para o lado do oxidante.

O conjunto de equações acima representa o conjunto de equações de conservação de chamas unidimensionais contabilizadas pelos termos da deformação da chama para ajustar os desvios de uma chama multidimensional. Nos *flamelets*, além das equações acima, ainda é resolvida a equação de transporte para a variável de controle. Neste trabalho, a variável de controle utilizada foi a fração de mistura Z_t , e sua equação de transporte é dada por

$$\frac{\partial (\rho u Z_t)}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\lambda}{C_p} \frac{\partial Z_t}{\partial x} \right) - \rho K Z_t. \quad (C.7)$$