

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

SIMULAÇÃO NUMÉRICA DA COMBUSTÃO DE GÁS NATURAL EM CÂMARA DE
COMBUSTÃO CILÍNDRICA UTILIZANDO NOVAS CORRELAÇÕES DO MODELO DA SOMA-
PONDERADA-DE-GASES-CINZA

por

Cristiano Saboia Ruschel

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, Junho de 2012



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

SIMULAÇÃO NUMÉRICA DA COMBUSTÃO DE GÁS NATURAL EM CÂMARA DE
COMBUSTÃO CILÍNDRICA UTILIZANDO NOVAS CORRELAÇÕES DO MODELO DA SOMA-
PONDERADA-DE-GASES-CINZA

por

Cristiano Saboia Ruschel

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. Arnaldo Ruben Gonzalez
Coordenador do Curso de Engenharia Mecânica

Área de Concentração: **Ciências Térmicas**

Orientador: Prof. Francis Henrique Ramos França

Comissão de Avaliação:

Prof. Daniel Dall'Onder dos Santos

Prof. Paulo Otto Beyer

Prof. Sérgio Luiz Frey

Porto Alegre, 15 de junho de 2012.

RUSCHEL, C. S. **Simulação Numérica da Combustão de Gás Natural em Câmara de Combustão Cilíndrica Utilizando Novas Correlações do Modelo da Soma-Ponderada-de-Gases-Cinza**. 2012. 19 páginas. Monografia (Trabalho de Conclusão do Curso em Engenharia Mecânica) – Departamento de Engenharia Mecânica, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2012.

RESUMO

Este trabalho consiste em simulações numéricas de uma câmara de combustão cilíndrica que utiliza gás natural como combustível empregando o *Software* Ansys CFX v13. Um tratamento especial é dado à modelagem da radiação térmica, utilizando-se novas correlações da literatura para o modelo da soma-ponderada-de-gases-cinza, comparando-as com correlações antigas, bem como com trabalhos numéricos e experimentais encontrados na literatura. Os resultados atingiram um bom grau de concordância com os dados experimentais disponíveis, e indicaram que as novas correlações testadas trazem resultados superiores em relação aos obtidos com as tradicionalmente utilizadas.

PALAVRAS-CHAVE: simulação numérica, gás natural, combustão, soma-ponderada-dos-gases-cinza.

RUSCHEL, C. S.; **Numerical Simulation of Natural Gas Combustion in Cylindrical Combustion Chamber Using New Correlations for the Weighted-Sum-of-Gray-Gases Model**. 2012. 19 pages. Monografia (Trabalho de Conclusão do Curso em Engenharia Mecânica) – Departamento de Engenharia Mecânica, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2012.

ABSTRACT

This work consists of numerical simulations of a cylindrical combustion chamber that uses natural gas as combustible employing Ansys CFX v13 software. A special treatment is given to the thermal radiation modeling, using new correlations from the literature for the weighted-sum-of-the-gray-gases model, comparing with old correlations, as well as with numerical and experimental works found in the literature. The results reached a good level of agreement with the available experimental data, and indicated that the new tested correlations lead to superior results relatively to those obtained with the traditionally used ones.

KEYWORDS: numerical simulation, natural gas, combustion, weighted-sum-of-gray-gases.

ÍNDICE

	Pág.
1	INTRODUÇÃO1
2	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA1
3	METODOLOGIA.....1
3.1	Método Numérico.....1
3.2	Modelos de Turbulência.....2
3.2.1	Modelo $k-\varepsilon$3
3.2.2	Modelo <i>SSG Reynolds Stress</i>3
3.3	Modelos de Radiação Térmica.....4
3.4	Modelos de Reações Químicas.....5
4	DEFINIÇÃO DO PROBLEMA.....6
4.1	Geometria da Câmara.....6
4.2	Discretização e Solução Numérica.....7
4.3	Condições de Contorno.....8
5	RESULTADOS E DISCUSSÃO.....8
6	CONCLUSÕES.....14
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....15

1. INTRODUÇÃO

Os processos de combustão são de grande importância em diversas atividades industriais, além de serem responsáveis pela geração de boa parte da energia elétrica utilizada no planeta. Portanto, qualquer avanço na eficiência energética desses processos traz enormes benefícios, tanto do ponto de vista financeiro, pela redução de custos, quanto do ponto de vista ambiental, pela redução da emissão de gases de efeito estufa. Dentre os combustíveis mais utilizados, destaca-se o gás natural, objeto de estudo neste trabalho.

Com o crescimento do poder de processamento computacional nos últimos anos, tem crescido a possibilidade de realizar simulações numéricas de diferentes processos de engenharia, reduzindo a necessidade da construção de experimentos, facilitando assim o teste de hipóteses com maior rapidez e menor custo. Nesse sentido, tem contribuído também a difusão e aprimoramento de códigos comerciais para simulações numéricas, que podem ser utilizados para diversos casos reais, sem necessidade de um código específico para cada tipo de problema.

O presente trabalho consiste de um estudo numérico da combustão de gás natural em uma câmara de combustão cilíndrica, utilizando o código comercial Ansys CFX. O caso em questão apresenta acoplamento de diversos fenômenos físicos: reações químicas, turbulência, transferência de calor, com significativa participação da radiação térmica. Esse acoplamento causa dificuldades na solução, e os modelos apropriados para cada fenômeno devem ser escolhidos com muito critério, além de ser necessário seguir um procedimento adequado a fim de obter resultados coerentes com a realidade. Assim, faz parte da proposta do trabalho um melhor entendimento desses modelos, em especial no estudo do modelo da soma-ponderada-de-gases-cinza, onde se pretende comparar os coeficientes tradicionalmente utilizados obtidos por Smith et al., 1982, com os coeficientes obtidos mais recentemente, por Dorigon, 2011.

2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

O caso aqui estudado, de combustão de gás natural em câmara cilíndrica, por ser de grande interesse, foi assunto de alguns trabalhos nos últimos anos. Garréton e Simonin, 1994, apresentaram resultados experimentais de temperatura e concentração de espécies químicas para uma câmara de combustão, que se tornou um caso padrão para simulações, sendo utilizados em diversas pesquisas.

Nieckele et al., 2002, simularam numericamente no *software* FLUENT comparando diferentes modelos de reações químicas, tanto modelos de taxas finitas de reação quanto os que consideram o fenômeno estocástico, a partir de funções densidade de probabilidade para as reações. Da Silva, C. V., 2005, estudou a mesma câmara pela resolução dos fenômenos envolvidos a partir da implementação do Método dos Volumes Finitos, comparando modelos de reações químicas de uma e duas etapas, com um foco na influência da radiação térmica na transferência de calor e no processo de combustão como um todo. Ambos os trabalhos utilizaram o modelo de turbulência $k-\varepsilon$ e o modelo espectral de radiação térmica da soma-ponderada-de-gases-cinza, valendo-se dos coeficientes de Smith et al., 1982.

Ronchetti et al., 2005, simularam esse caso no código comercial Ansys CFX, comparando os modelos de turbulência $k-\varepsilon$ e $k-\omega$, utilizando-se do modelo espectral de gás cinza com um modelo de combustão em duas etapas.

3. METODOLOGIA

3.1 Método Numérico

O estudo deste trabalho será realizado a partir de simulações numéricas no *Software* Ansys CFX v.13, disponibilizado pelo Centro Nacional de Supercomputação (CESUP). Esse código resolve o problema a partir do método dos volumes finitos, que se baseia na

discretização do sistema físico em volumes de controle menores, gerando as chamadas malhas, de forma que as equações diferenciais sejam substituídas por equações algébricas. Essa transformação incorre em um erro, que é reduzido com o aumento da quantidade de volumes da malha. Para mais informações sobre o método, é recomendada a leitura de Patankar, 1980; para detalhes sobre de sua implementação no programa, ver o manual do código [Ansys Inc., 2010].

O caso estudado neste trabalho apresenta um acoplamento de diversos fenômenos físicos: reações químicas, turbulência, transferência de calor, com significativa participação da radiação térmica. Portanto, é resolvido um sistema de equações acoplado para simulação de todos esses fenômenos. Devido à complexidade dos fenômenos, são utilizados modelos para representá-los, pois sua resolução em todos os detalhes se tornaria inviável numericamente ou mesmo impossível em alguns casos, e a representação por modelos pode trazer resultados com precisão suficiente para boa parte dos casos de engenharia.

O Ansys CFX v.13, utilizado neste trabalho, possui diversas opções de modelos para simular cada um dos fenômenos físicos envolvidos em um determinado problema. A seleção correta de cada um desses modelos é etapa crucial do estudo, pois se deve garantir que a opção feita seja a mais indicada para fornecer resultados fisicamente coerentes.

Neste capítulo, são apresentados os modelos utilizados na solução, além de uma breve explicação do funcionamento e da base teórica de cada um deles. Para uma leitura mais detalhada, recomenda-se consultar o manual do *Software Ansys CFX v.13* [Ansys Inc., 2010] e as demais referências presentes no texto.

3.2 Modelos de Turbulência

A turbulência consiste em flutuações no escoamento, sendo especialmente complexa pelas suas características tridimensionais, instabilidades, e por apresentar diversas escalas. Ela ocorre quando as forças de inércia se tornam significativas em relação às forças viscosas, isto é, quando o número adimensional de Reynolds do escoamento é alto.

Em princípio, as equações de Navier-Stokes são capazes de descrever tanto escoamentos laminares quanto os turbulentos. Porém, os escoamentos turbulentos possuem diversas escalas de tempo e comprimentos, que necessitariam para sua resolução completa uma malha muito mais refinada que as que são utilizadas em análises numéricas, requerendo assim um esforço computacional várias ordens de grandeza maiores do que o que se possui atualmente.

Por isso, o estudo da turbulência em *softwares* de simulação numérica foi concentrado no uso de modelos de turbulência, que simplificam o problema de maneira que esse possa ser resolvido com os recursos disponíveis. A maioria dos modelos, incluindo os dois utilizados neste trabalho, são modelos estatísticos de turbulência.

A ideia central desses modelos é que, para escalas de tempo muito maiores que as escalas de tempo características da turbulência, podem-se dividir as quantidades envolvidas em uma fração que represente seu comportamento médio, e outra componente representando sua flutuação. A partir dessas médias, denominadas médias de Reynolds, as equações de Navier-Stokes são modificadas, dando origem às equações RANS (Reynolds Averaged Navier-Stokes). Com a substituição das quantidades por suas médias e flutuações, as equações de transporte são alteradas. As equações da continuidade e da quantidade de movimento em regime permanente são apresentadas a seguir:

$$\frac{\partial}{\partial x_j}(\rho U_j) = 0 \quad (3.1)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_j}(\rho U_i U_j) = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\tau_{ij} - \rho \overline{u_i u_j}) + S_m \quad (3.2)$$

onde U_i é o componente médio da velocidade na direção i , ρ a massa específica, p a pressão absoluta, τ_{ij} é o tensor de tensões e S_m o termo fonte da equação de quantidade de movimento. Os termos $\overline{u_i u_j}$ são conhecidos como Tensões de Reynolds e criam a necessidade de equações adicionais para o fechamento do problema. Dois tipos de modelos serão utilizados nesse trabalho: o primeiro, $k-\varepsilon$, é baseado no conceito de viscosidade turbulenta, enquanto o segundo, SSG Reynolds Stress, resolve as equações de transporte para todas as tensões de Reynolds.

3.2.1 Modelo $k-\varepsilon$

O modelo $k-\varepsilon$ é o modelo mais utilizado e indicado para a maioria das aplicações de engenharia, sendo um dos modelos que utiliza o conceito de viscosidade turbulenta, μ_t , para modelar o tensor de tensões de Reynolds. Nele, a viscosidade turbulenta é determinada a partir de dois parâmetros, a conservação da energia cinética turbulenta, k , e sua dissipação, ε , [Launder e Sharma, 1974] a partir de:

$$\mu_t = C_\mu \rho \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (3.3)$$

Esses parâmetros são obtidos a partir da resolução das seguintes equações:

$$\frac{\partial}{\partial x_j} (\rho U_j k) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right) + P_k - \rho \varepsilon \quad (3.4)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_j} (\rho U_j \varepsilon) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right) + C_{1,\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k} P_k - C_{2,\varepsilon} \frac{\varepsilon^2}{k} \quad (3.5)$$

onde U_j é a velocidade média na direção j , ρ é a massa específica e P_k é o termo de produção ou dissipação da energia cinética. As constantes $C_{1,\varepsilon}$, $C_{2,\varepsilon}$, C_μ , σ_k e σ_ε são padrões do modelo, e seus valores são:

$$\begin{aligned} C_{1,\varepsilon} &= 1,44 \\ C_{2,\varepsilon} &= 1,92 \\ C_\mu &= 0,09 \\ \sigma_k &= 1,0 \\ \sigma_\varepsilon &= 1,3 \end{aligned}$$

Esse modelo é um dos chamados modelos a duas equações, pois essa é a quantidade de equações adicionais requeridas para resolver o problema das tensões de Reynolds. Esses modelos costumam apresentar um ponto de equilíbrio entre custo computacional e acuracidade nos resultados. Porém, os mesmos possuem limitações em alguns casos. Seu uso não é recomendado para casos onde haja, por exemplo, escoamentos rotacionais (*swirl*), pois nessas condições a simplificação de viscosidade turbulenta deixa de ser válida [Ansys Inc.,2010].

3.2.2 Modelo SSG Reynolds Stress

Os modelos *Reynolds Stress* não utilizam a simplificação para a viscosidade turbulenta, resolvendo uma equação de transporte para cada uma das seis componentes do tensor de tensões de Reynolds $\overline{u_i u_j}$. Por isso, são adequados para resolver qualquer tipo de problema turbulento, sendo indicados especialmente para casos onde a simplificação da viscosidade turbulenta deixe de ser válida, como em escoamentos em fluidos rotacionais ou com forte curvatura nas linhas de corrente. Como resultado de um maior número de equações a serem

resolvidas, há um aumento considerável no custo computacional da simulação. Portanto, são utilizados geralmente nos casos onde os modelos mais simples não podem ser aplicados. A equação de transporte em regime permanente a ser resolvida é apresentada a seguir:

$$\frac{\partial}{\partial x_k} (U_k \rho \overline{u_l u_j}) - \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\left(\delta_{kl} \mu + \rho C_S \frac{k}{\varepsilon} \overline{u_k u_l} \right) \frac{\partial \overline{u_l u_j}}{\partial x_l} \right) = P_{ij} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \rho \varepsilon + \phi_{ij} + P_{ij,b} \quad (3.6)$$

onde P_{ij} e $P_{ij,b}$ são os termos de produção de turbulência das tensões de Reynolds por cisalhamento e por empuxo, ϕ_{ij} é o tensor pressão-deformação, e C_S é uma constante. Como o termo de dissipação da turbulência aparece na equação das tensões de Reynolds (Equação 3.6), uma equação para o mesmo ainda é necessária, e tem a seguinte forma:

$$\frac{\partial}{\partial x_k} (\rho U_k \varepsilon) = \frac{\varepsilon}{k} (C_{\varepsilon 1} P_k - C_{\varepsilon 2} \rho \varepsilon) + \frac{\partial}{\partial x_k} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_{\varepsilon RS}} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_k} \right] \quad (3.7)$$

Existem diversos modelos de turbulência do tipo *Reynolds Stress*, onde são variadas as constantes $C_{\varepsilon 1}$, $C_{\varepsilon 2}$, $\sigma_{\varepsilon RS}$, C_S , além de outras constantes que fazem parte dos termos P_{ij} , $P_{ij,b}$, ϕ_{ij} . Uma explicação mais detalhada de todos os termos e variações desse método é muito extensa e foge do escopo desse trabalho. Mais informações podem ser encontradas no manual do *Software* [Ansys Inc., 2010]. Nesse trabalho é utilizada a variação *SSG Reynolds Stress* do modelo.

3.3 Modelos de Radiação Térmica

A radiação térmica possui duas características que tornam mais complexa sua descrição, a natureza espectral e sua natureza direcional [Incropera et al., 2008]. Para descrevê-la com precisão, é necessária a utilização de um modelo para cada uma dessas características.

O modelo utilizado para cálculo da característica direcional da radiação térmica foi o *Discrete Transfer Radiation Method* (DTRM), no qual a variação da Intensidade de Radiação, integrada em todos os comprimentos de onda, ao longo de um caminho S é calculada a partir de:

$$\frac{dI}{dS} = -aI + \frac{a\sigma T^4}{\pi} \quad (3.8)$$

Os termos no lado direito representam, respectivamente, os ganhos por absorção e as perdas por emissão devido ao meio participante [Siegel e Howell, 1981]. O modelo integra a Equação (3.8) ao longo de diversas direções a partir de cada volume. O termo fonte na equação da entalpia devido à radiação em cada volume é obtido a partir da soma da variação da intensidade de radiação de todos os raios que cruzam o mesmo.

Para a natureza espectral, é utilizado o modelo soma-ponderada-de-gases-cinza, que considera que o coeficiente de absorção possa ser decomposto em um conjunto de coeficientes constantes, referentes a cada gás cinza, cobrindo todo o espectro do número de onda. Seguindo a formulação matemática descrita por Smith et al., 1982, a emissividade é obtida a partir da equação abaixo:

$$\varepsilon_g(S) = \sum_{i=1}^I \left(\sum_{j=1}^J c_{e,i,j} T^{j-1} \right) [1 - e^{-a_i S}] \quad (3.9)$$

sendo S a trajetória percorrida pela radiação, enquanto $c_{e,i,j}$ e a_i são coeficientes obtidos a partir da interpolação de resultados experimentais. Serão comparados dois conjuntos de

coeficientes, o primeiro obtido por Smith et al., 1982, que considera três gases cinza, enquanto o segundo foi retirado de Dorigon, 2011, e apresenta quatro gases cinza. Esses coeficientes são apresentados na Tabela 3.1.

Tabela 3.1 – Coeficientes para o modelo da soma-ponderada-de-gases-cinza

i	$a_i [m^{-1}]$	$c_{e,i,1} \times 10$	$c_{e,i,2} \times 10^4 [K^{-1}]$	$c_{e,i,3} \times 10^7 [K^{-2}]$	$c_{e,i,4} \times 10^{11} [K^{-3}]$	$c_{e,i,5} \times 10^{14} [K^{-4}]$
Correlações de Smith et al., 1982						
1	0,12603	6,508	-5,551	3,029	-5,353	-
2	1,9548	-0,2504	6,112	-3,882	6,528	-
3	39,57	2,718	-3,118	1,221	-1,612	-
Correlações de Dorigon, 2011						
1	0,192	0,5617	7,844	-8,563	42,46	-7,44
2	1,719	1,426	1,795	-0,1077	-6,971	1,774
3	11,37	1,362	2,574	-3,711	15,75	-2,267
4	111,016	1,222	-0,2327	-0,7492	4,275	-0,6608

3.4 Modelos de Reações Químicas

Para simular as reações químicas, são disponibilizados pelo *Software* três modelos diferentes: *Finite Rate Model*, *Eddy Dissipation*, e uma combinação de ambos.

O primeiro desses é baseado na lei de Arrhenius, utilizando dados de cinética para calcular as taxas da reação, conforme a equação exposta a seguir:

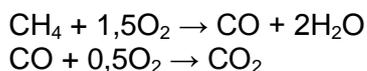
$$\overline{R_{\alpha,j}} = \left(A_j T^{\beta_j} e^{\left(\frac{-E_j}{RT}\right)} \prod_{\alpha=A,B,\dots}^{N_c} [\alpha]^{\gamma_{\alpha,j}} \right) \quad (3.10)$$

onde $\overline{R_{\alpha,j}}$ é a taxa da reação j com relação à espécie química α , E_j é a energia de ativação, β é o expoente adimensional de temperatura, A_j é o fator pré-exponencial, $\gamma_{\alpha,j}$ é o expoente da espécie química α na reação j e $[\alpha]$ é a concentração molar da componente α . A Equação 3.10 é a equação para reações com apenas uma direção, como é o caso da combustão.

O segundo modelo considera que a reação ocorre rapidamente em comparação com a escala de tempo da turbulência. As reações ocorrem instantaneamente quando há a mistura dos componentes em nível molecular. Em escoamentos turbulentos o tempo de mistura entre seus componentes é proporcional à relação entre a energia cinética k e a dissipação da energia cinética, ε [Wilcox, 2002]. Logo, a taxa de reação é proporcional ao inverso dessa relação, conforme mostrado na equação abaixo:

$$\overline{R_{\alpha,k}} = A \frac{\varepsilon}{k} \min \left(\frac{[\alpha]}{\eta_{\alpha,k}} \right) \quad (3.11)$$

O código calcula então as escalas de tempo de reação e turbulência, e aplica a taxa de reação referente ao fenômeno limitante. A reação de combustão, modelada em duas etapas, é considerada como:



O nitrogênio é considerado inerte, não participando das reações.

Os parâmetros de cinética de reação adotados nesse trabalho são os padrões do *Software Ansys CFX*, cujos valores são apresentados na Tabela 3.2.

Tabela 3.2 – Parâmetros utilizados para as reações químicas

Reação	A_k	E_k	β_k	$\gamma_{CH_4,k}$	$\gamma_{O_2,k}$	$\gamma_{CO_2,k}$	γ_{H_2O,k^m}	$\gamma_{CO,k}$
1	$1,57 \left[\frac{1}{s} \right]$	$125520 \left[\frac{J}{mol} \right]$	0	-0,3	1,3	1	2	-
2	$10^{14,6} \left[\frac{1}{mol^{0,75} m^{2,25} s} \right]$	$167360 \left[\frac{J}{mol} \right]$	0	-	0,25	1	-	1

4. DEFINIÇÃO DO PROBLEMA

Neste capítulo, será apresentado um detalhamento do problema, com sua geometria, discretização e condições de contorno.

4.1 Geometria da Câmara

A câmara escolhida é a utilizada por Garréton e Simonin, 1994, para a qual se possui resultados experimentais para temperatura e concentrações de espécies químicas para comparação posterior. A câmara possui formato cilíndrico, com comprimento de 1,7 m e diâmetro de 50 cm, e é abastecida com gás natural por meio de um duto injetor composto de dois círculos concêntricos: o menor, de 6 cm, por onde é abastecido o combustível; e o maior, com 8 cm, por onde entra o ar. A geometria foi construída no *Software ICEM CFD*, e é apresentada na Figura 4.1.

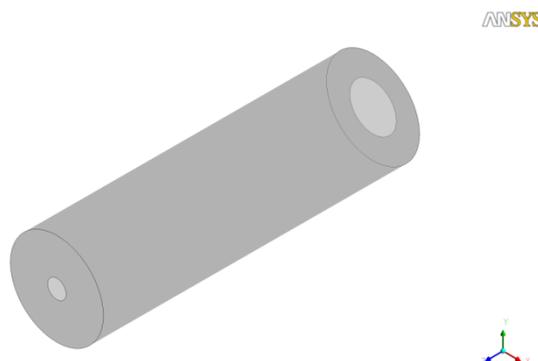


Figura 4.1 – Geometria da Câmara

Para melhor visualização, um detalhamento da região de entrada é apresentado na Figura 4.2.

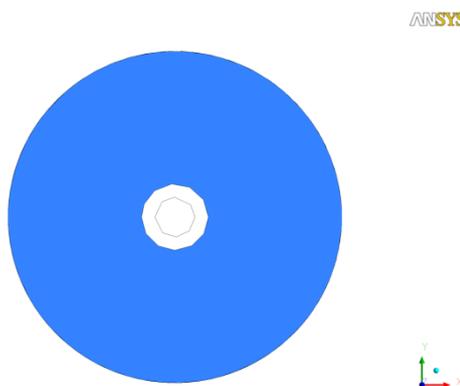


Figura 4.2 – Detalhamento da Região de Entrada

4.2 Discretização e Solução Numérica

A geração da malha também foi realizada utilizando o *Software* ICEM CFD. A mesma possui diversos tipos de volumes, a fim de uma melhor adaptação à geometria da câmara, com prismas e tetraedros próximos às paredes e volumes hexaédricos no núcleo, como pode ser visto na Figura 4.3.

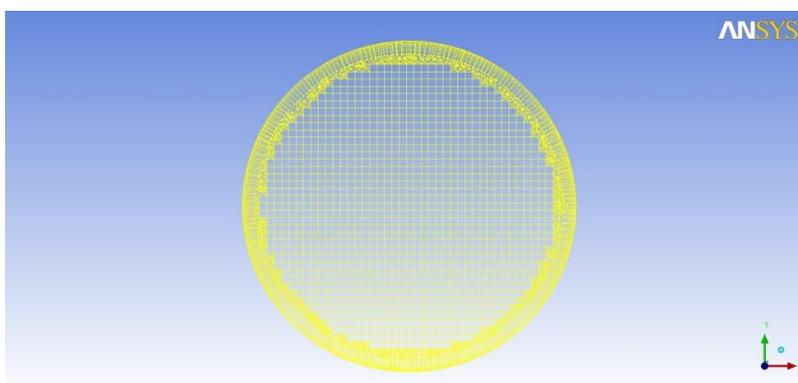


Figura 4.3 – Vista em corte da malha utilizada

A malha utilizada possui um total de 1357981 volumes, e foi escolhida a partir de testes preliminares com casos mais simples. Posteriormente, foi simulado o caso com todos os fenômenos físicos para diversas malhas, a fim de confirmar que a independência de malha já havia sido alcançada. Na Figura 4.4, é apresentado o resultado desse teste, onde perfil de temperaturas na linha de centro foi a variável de controle utilizada e as malhas testadas são denominadas de acordo com a porcentagem de volumes em relação à malha utilizada.

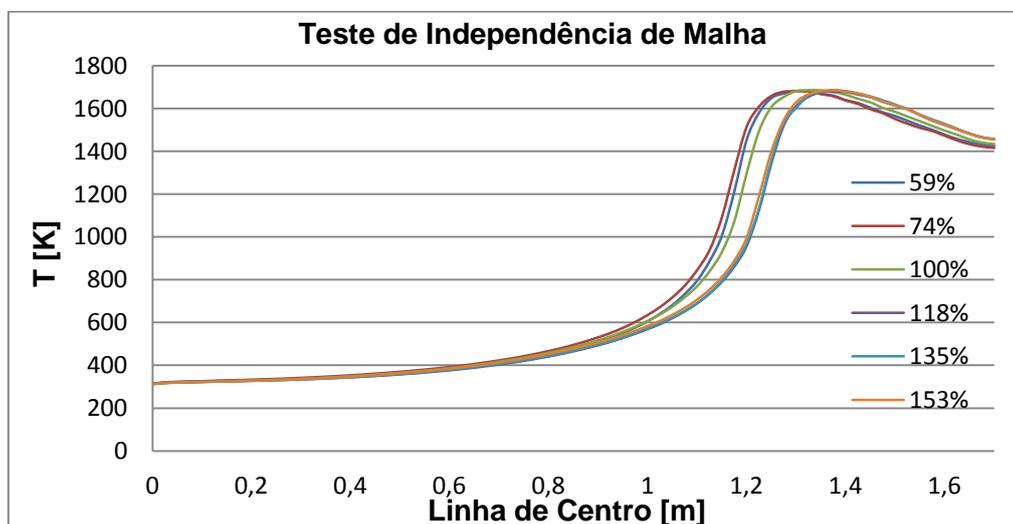


Figura 4.4 – Teste de Independência de Malha

Na Figura 4.4 pode-se ver que com a malha utilizada a independência de malha ainda não havia sido obtida. Porém, essa malha é suficiente para a produção de bons resultados do ponto de vista numérico, pois o erro produzido pela discretização é pequeno em comparação com as simplificações dos modelos ou com as incertezas do caso experimental. Além disso, as análises realizadas no Capítulo 5 tem caráter qualitativo e continuam válidas levando-se em conta esse erro.

O tempo físico considerado para cada iteração foi de 0,01 s. O critério de convergência utilizado estabeleceu que o valor RMS dos resíduos numéricos de todas as equações fosse inferior a 1E-06. Algumas malhas com menos de 500 mil volumes apresentaram dificuldades de

convergência, e para propósito da realização do teste apresentado tiveram seu critério relaxado para $1E-05$. Todos os resultados apresentados no Capítulo 5 atingiram a convergência numérica com o critério padrão.

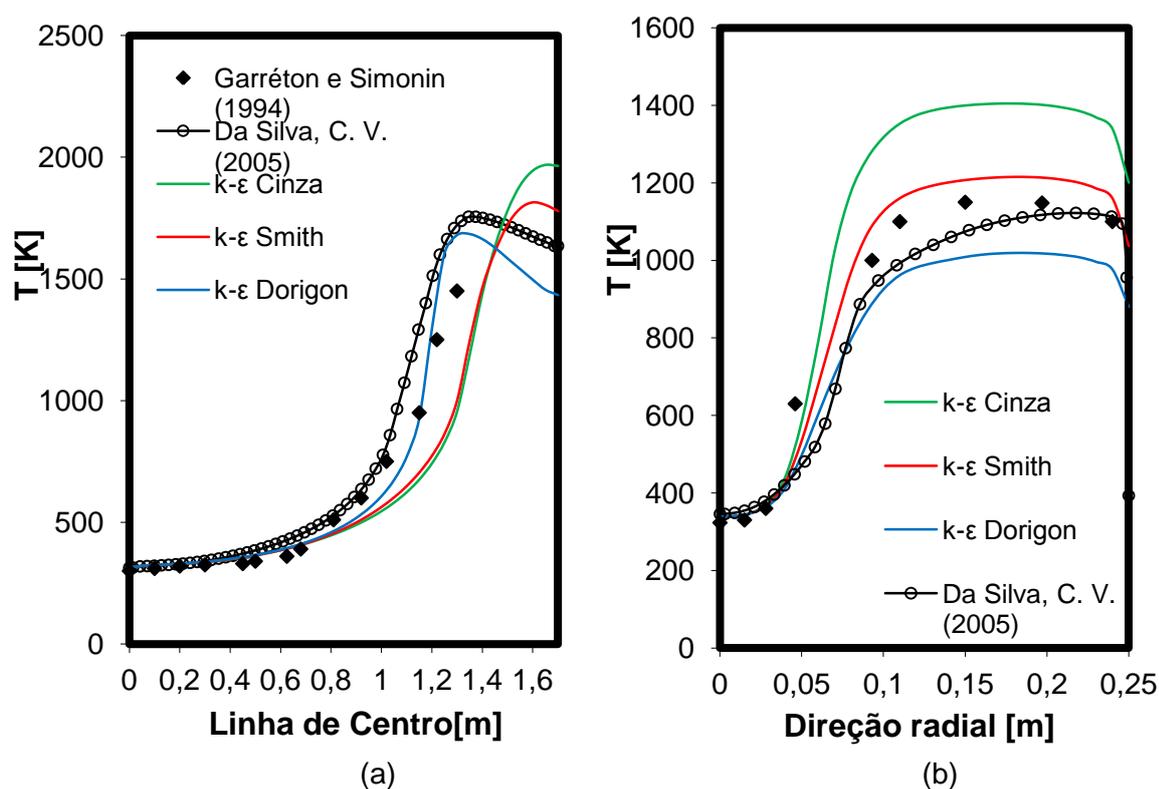
4.3 Condições de Contorno

Todas condições de contorno utilizadas nesse trabalho são uma reprodução do caso experimental apresentado por Garréton e Simonin, 1994. Para a entrada tem-se vazão mássica de 0,186 kg/s de ar, na temperatura de 313,15 K, e 0,0125 kg/s de combustível, na temperatura de 323,15 K, resultando em um excesso de combustível de 5%. As intensidades de turbulência consideradas na entrada foram de 6% para o ar, com comprimento turbulento de 0,04 m, e de 10% para o combustível, com comprimento turbulento de 0,03 m. Para as paredes, a condição de contorno é de temperatura prescrita, em 393,15 K, e emissividade de 0,6.

A composição do ar é considerada como 76% de nitrogênio, 23% de oxigênio e 1% de vapor de água. O gás natural é modelado como possuindo 90% de metano (CH_4) e 10% de nitrogênio, como proposto por Garréton e Simonin, 1995.

5. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Na Figura 5.1 são apresentados, respectivamente, os gráficos comparando as temperaturas obtidas ao longo da linha de centro da câmara, e na direção radial, a 0,312 m, 0,912 m e 1,312 m da entrada. Conforme pode ser observado na legenda, são comparados no total 5 resultados: o experimental, obtido por Garréton e Simonin, 1995; o obtido por Da Silva, C. V. , 2005, utilizando o modelo de turbulência $k-\varepsilon$, o modelo de combustão em duas etapas e as correlações de Smith et al., 1982, para a natureza espectral da radiação; e três obtidos no presente trabalho, todos com o modelo de turbulência $k-\varepsilon$, diferindo entre si apenas pelo modelo espectral da radiação, onde no primeiro foi considerado o modelo de gás cinza, com absorvidade de $0,1 m^{-1}$, o segundo utiliza os coeficientes de Smith et al., 1982 e o terceiro utiliza os coeficientes de Dorigon, 2011.



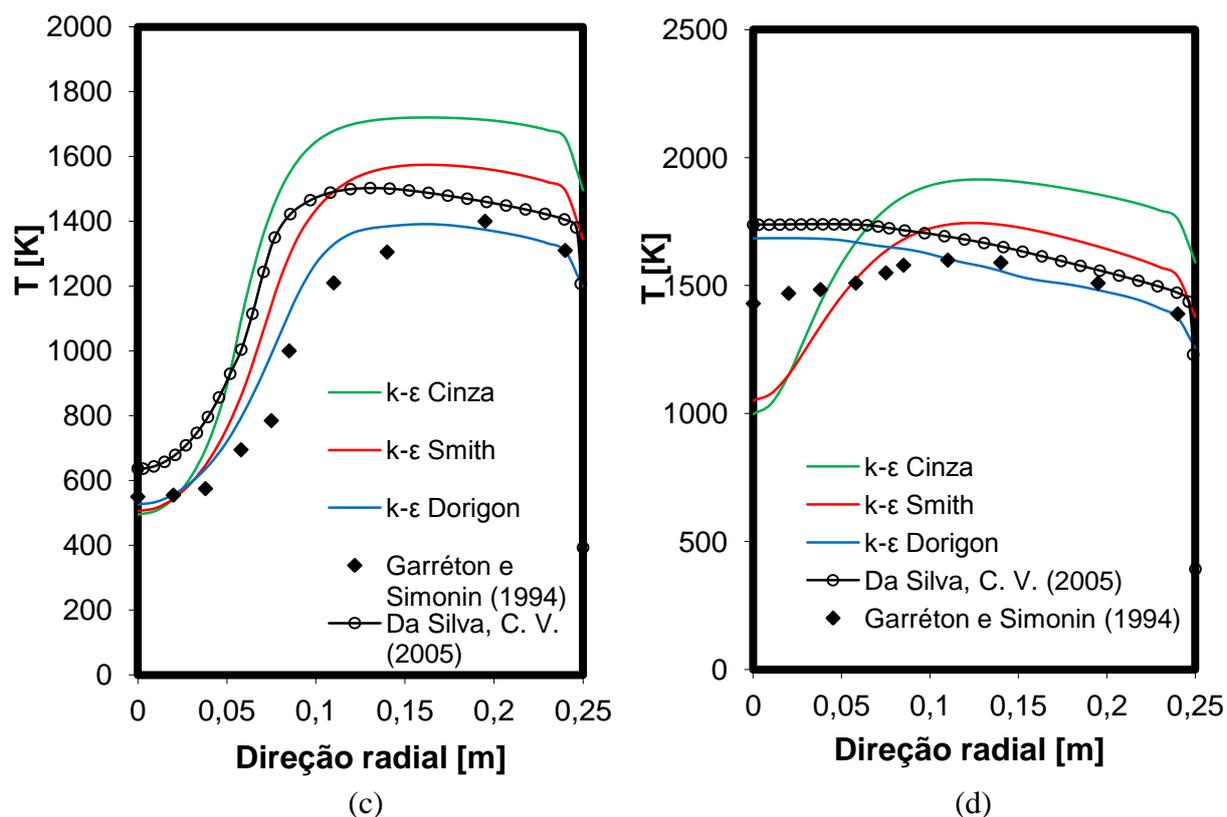


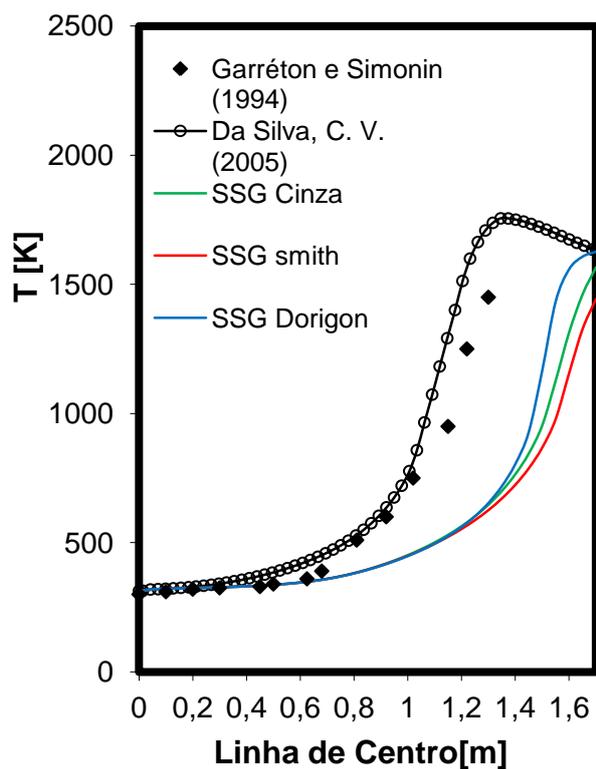
Figura 5.1 – Perfil de temperaturas, modelo $k-\epsilon$: (a) Na linha de centro; (b) Direção radial, 0,312 m da entrada; (c) Direção radial, 0,912 m da entrada; (d) Direção radial, 1,312 m da entrada

Analisando a Figura 5.1-a, conclui-se que para o caso do modelo de radiação espectral cinza e para o modelo utilizando os coeficientes de Smith et al., 1982, que a reação ocorre com um atraso em relação às outras simulações e às medições experimentais. Como resultado, a combustão não se completa dentro da câmara, tendo sua temperatura máxima muito próximo à saída. Isso mostra a importância do processo de radiação dentro desse problema, pois apenas alterando a absorvidade espectral do meio participante, mantendo todos os outros parâmetros inalterados, o processo é alterado significativamente.

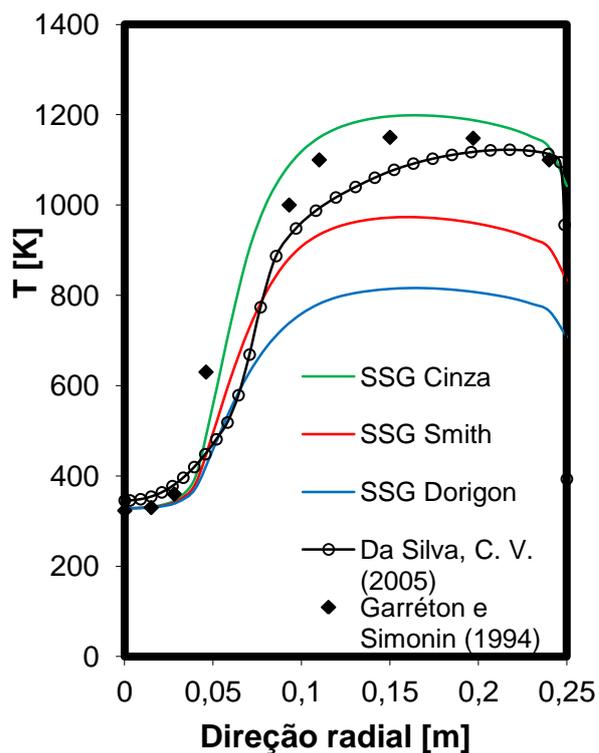
De todos os gráficos apresentados na Figura 5.1, é fácil notar também que o da simulação que utiliza os coeficientes de Dorigon é o que melhor se aproxima dos resultados experimentais. Esse resultado era de certa forma esperado, pois o estudo de Dorigon, 2011, dispõe de recursos mais avançados do que os presentes nos anos 80, quando os coeficientes de Smith, usados por boa parte dos códigos comerciais, foram determinados.

Era esperado que o resultado da simulação que utiliza os coeficientes de Smith se aproximasse do obtido por da Silva, 2005, o que não se confirmou. Possíveis causas para essa diferença são a utilização de diferentes modelos de radiação térmica e, principalmente, de reações químicas.

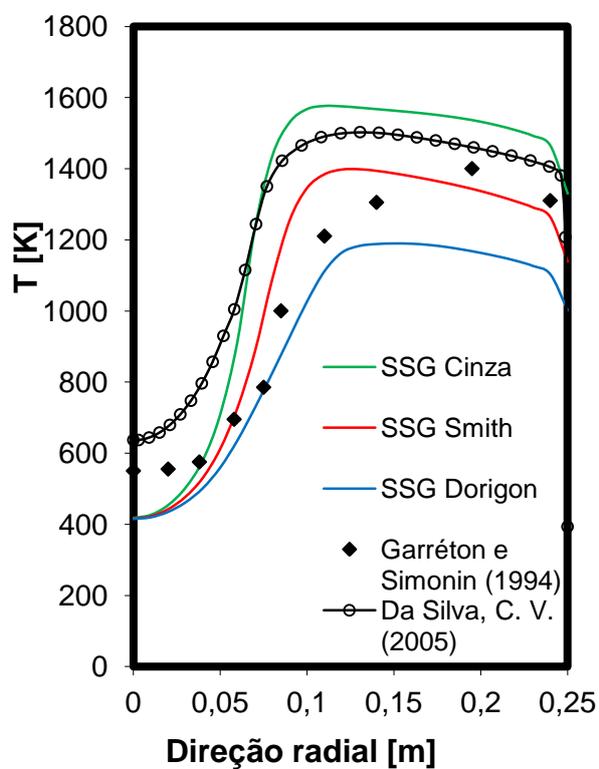
Posteriormente, foram repetidas as mesmas simulações, alterando-se o modelo de turbulência, de um modelo a duas equações ($k-\epsilon$), para um modelo baseado na resolução completa do Tensor de Reynolds, o SSG *Reynolds Stress*, conforme explicado no Capítulo 3. Na Figura 5.2 são apresentados esses resultados, sendo os mesmos análogos aos da Figura 5.1, com essa troca do modelo de turbulência.



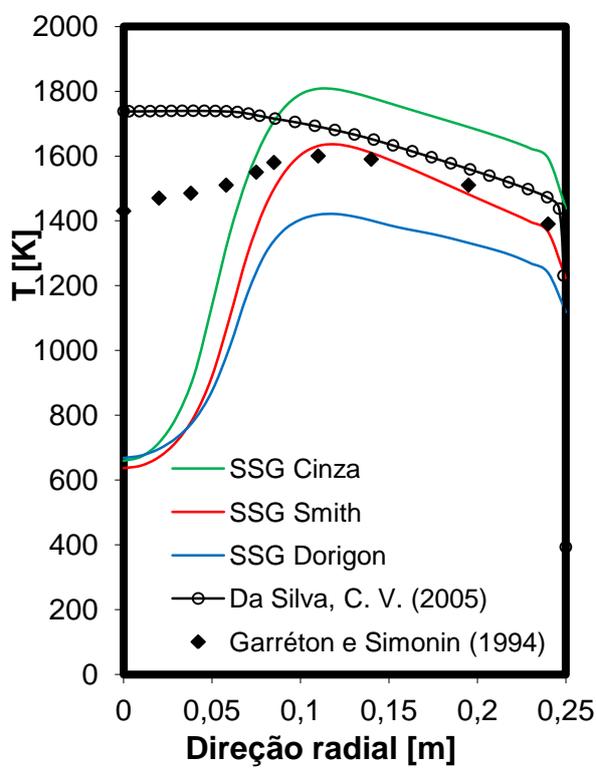
(a)



(b)



(c)



(d)

Figura 5.2 – Perfil de temperaturas, modelo *SSG Reynolds Stress*: (a) Na linha de centro; (b) Direção radial, 0,312 m da entrada; (c) Direção radial, 0,912 m da entrada; (d) Direção radial, 1,312 m da entrada

Comparando os resultados da Figura 5.2 com os da Figura 5.1, percebe-se que o modelo *SSG Reynolds Stress* de turbulência causa uma redução na temperatura em todos os casos simulados, na comparação com o modelo *k-ε*. O que ocorre é um atraso na reação de combustão, que faz com que a mesma não consiga ser completada no comprimento da câmara.

Para melhor compreender o porquê dessa diferença entre os dois modelos de turbulência, foi simulado o escoamento na câmara desligando as reações químicas, com os gases a uma temperatura constante de 300 K. Na figura 5.3, são apresentadas as linhas de corrente desse escoamento isotérmico, para ambos modelos.

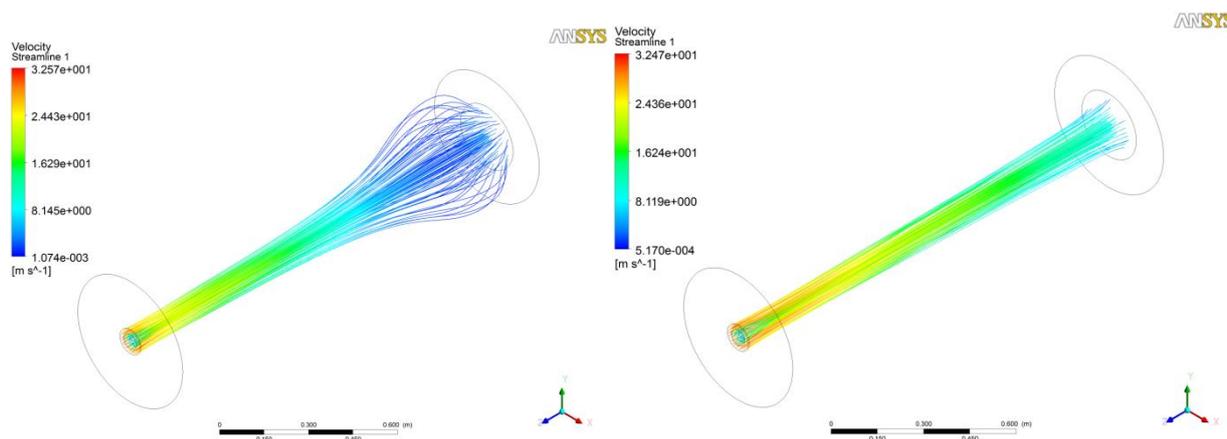
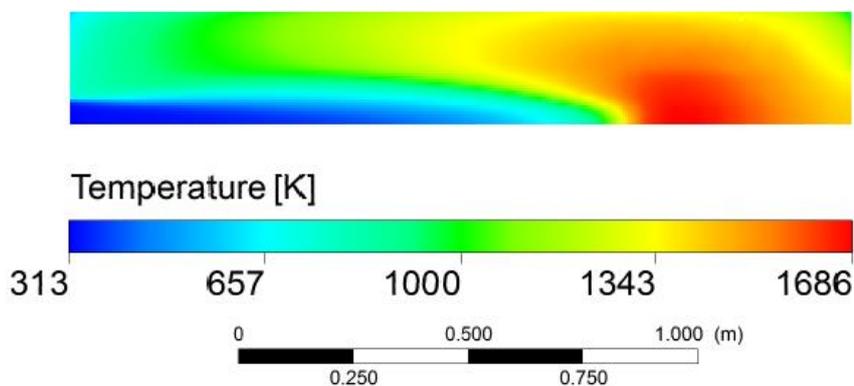


Figura 5.3 – Linhas de corrente em um escoamento isotérmico; à esquerda utilizando o modelo de turbulência *k-ε* e à direita com o modelo *SSG Reynolds Stress*.

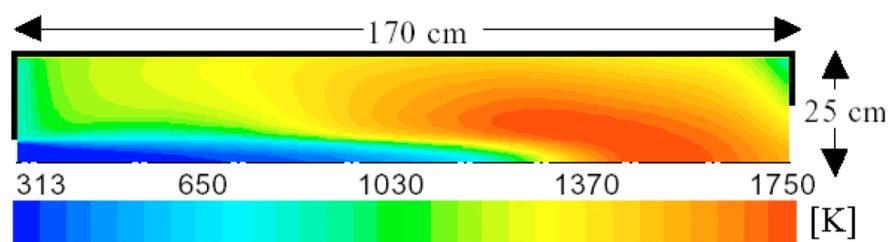
Comparando os dois casos, percebe-se que há uma maior dissipação da energia cinética no primeiro caso, resultando em uma menor velocidade. Portanto, os componentes do escoamento permanecem mais tempo no interior da câmara no primeiro caso do que no segundo. Esse é um fator que contribui para a combustão não ter tempo suficiente para se completar, no caso da simulação completa quando se utiliza o modelo de turbulência *SSG Reynolds Stress*. Além desse menor tempo, no modelo de reações químicas utilizado, a taxa de reação é proporcional à relação entre a dissipação da energia cinética ϵ e a energia cinética k , conforme a Equação 3.11. Como nos casos com o modelo de turbulência *SSG Reynolds Stress* há uma menor dissipação da energia cinética, e uma maior energia cinética, as taxas de reação são mais baixas, dificultando ainda mais a combustão, que acaba não ocorrendo por completo no interior da câmara.

Portanto, conclui-se que o modelo mais simples obteve resultados fisicamente mais corretos. Esse não é um caso isolado; o próprio manual do *Software* alerta que, apesar de teoricamente serem capazes de resolver qualquer problema turbulento, frequentemente os modelos de turbulência *Reynolds Stress* apresentam qualidade inferior a modelos mais simples, de duas equações, para casos onde ambos possam ser utilizados.

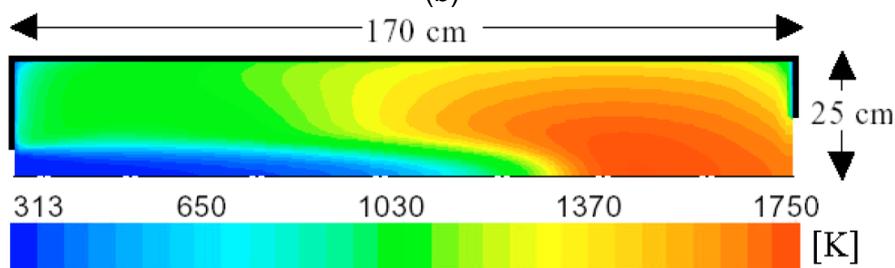
Para fins de comparação com outros trabalhos recentes da literatura, é apresentado na Figura 5.4 o perfil de temperaturas no plano de simetria da câmara para o resultado que utilizou o modelo de turbulência *k-ε* e os coeficientes de Dorigon, 2011, com os perfis obtidos por Nieckele et al., 2001 e da Silva, 2005, todos com o modelo de reação em duas etapas.



(a)



(b)



(c)

Figura 5.4 – Perfil de temperaturas na linha de simetria: (a) presente trabalho; (b) Nieckele et al., 2001; (c) da Silva, 2005

Visualizando-se a Figura 5.4, percebe-se que os perfis possuem uma certa semelhança, apresentando as mesmas regiões características e faixas de temperatura. Imediatamente após a entrada há uma região mais fria, onde ocorre a mistura do combustível com o ar. A temperatura máxima ocorre na linha de centro, devido à maior concentração de combustível e no terço final da câmara em relação ao comprimento, devido à cinética da reação.

Para um melhor entendimento das reações, são apresentados na Figura 5.5 os gráficos de concentração de CO e CO₂ ao longo da linha de centro.

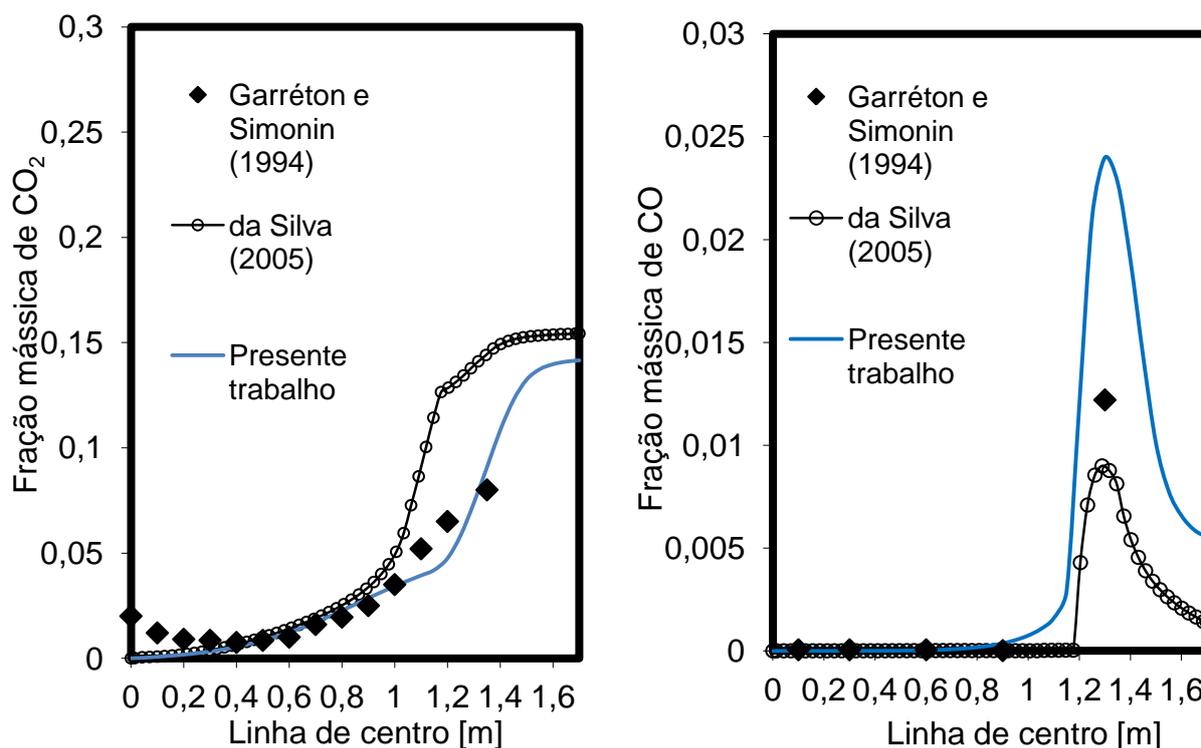


Figura 5.5 – Concentração de CO₂ (gráfico à esquerda) e de CO (gráfico à direita) ao longo da linha de centro

O resultado para a concentração de CO₂ ao longo da linha de centro possui concordância com o resultado experimental, e ajuda a explicar o perfil de temperatura. No início da câmara, com a menor temperatura, as taxas de reação são mais baixas, como pode ser notado na inclinação do gráfico de concentração de CO₂ na primeira metade da câmara. Com a temperatura mais alta, as taxas aumentam, como visto nas inclinações das concentrações de CO e CO₂, sendo que a região de maior temperatura coincide com o pico na concentração de CO. As taxas então caem, devido à queda nas concentrações dos reagentes, em concordância com as Equações 3.10 e 3.11. O resultado para o monóxido de carbono indica que a reação foi incompleta. Esse comportamento era esperado no resultado, já que há um excesso de combustível de 5%, ou seja, falta de oxigênio para completar a reação. Porém, a quantidade de CO encontrada foi bem acima do caso experimental, o que não era esperado, podendo indicar alguma dificuldade do modelo de reações químicas utilizado.

Para melhor investigação dessa divergência, é apresentado na Figura 5.6, o comportamento da concentração de O₂ ao longo da linha de centro.

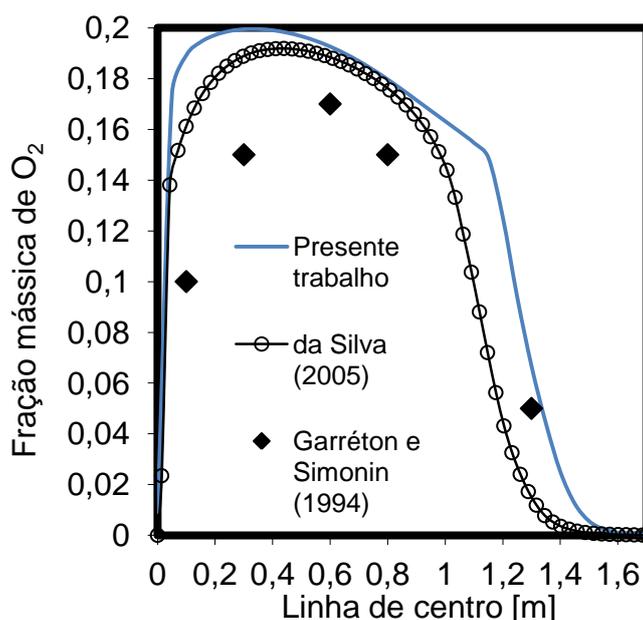


Figura 5.6 – Concentração de O₂ ao longo da linha de centro

Na figura pode ser visto que o comportamento qualitativo da concentração de oxigênio segue o esperado, obtido no caso experimental e na simulação de da Silva, 2005. Logo na entrada a concentração é zero, pois pelo centro da câmara entra o combustível. Depois há um súbito aumento, quando o oxigênio chega ao centro, e a queda devida à combustão. Um possível motivo para a combustão incompleta verificada na concentração de monóxido de carbono é o atraso na combustão em relação ao caso experimental. Como não há mais medições para o caso experimental, não é possível afirmar o perfil da concentração de CO na linha de centro. Uma possibilidade é que tenha forma parecida com a obtida nesse trabalho, porém ocorrendo mais cedo, o que explicaria a concentração menor de monóxido de carbono no ponto medido, e concordaria com a diferença na concentração de oxigênio.

Resultados para concentrações químicas em outros locais da câmara foram obtidos mas não serão apresentados. Em geral, obtiveram boa concordância qualitativa com as medições experimentais, divergindo em alguns locais, em parte concordando com o já exposto, e também pelos já discutidos erros incorridos das simplificações dos fenômenos físicos em modelos.

6 CONCLUSÕES

Com a realização desse trabalho, os objetivos foram alcançados de maneira satisfatória, conseguindo-se simular a combustão com um bom grau de acuracidade. Os resultados indicam que para esse tipo de caso a utilização do modelo de turbulência $k-\varepsilon$ é não apenas suficiente como traz resultados melhores que a utilização de modelos mais complexos como o SSG *Reynolds Stress*.

A meta principal, de comparação de coeficientes do método para simulação do comportamento espectral da radiação da Soma-Ponderada-de-Gases-Cinza, também foi atingida, sendo que nos resultados desse estudo os coeficientes obtidos por Dorigon, 2011, trouxeram o comportamento da solução para mais próximo do caso experimental do que os coeficientes de Smith et al., 1982, tradicionalmente utilizados em problemas desse tipo. Nesse sentido, é importante que mais estudos sejam feitos utilizando esses novos coeficientes, com o objetivo de comprovar se essa tendência de melhoria nos resultados se confirmará.

Outro fato importante concluído desse estudo é o grau de acoplamento e complexidade desse problema. Ficou claro que qualquer alteração nos parâmetros de solução ou dos

modelos pode alterar completamente o comportamento do sistema, como na alteração dos coeficientes de absorção, que alteraram significativamente as taxas de reação, a temperatura máxima e a posição onde a mesma ocorre. Portanto, avanços em qualquer dos modelos de simulação são muito importantes para obtenção de resultados mais próximos da realidade.

Alguns outros caminhos a serem tomados nessa linha de pesquisa em próximos trabalhos podem incluir, por exemplo, a utilização de modelos de combustão que considerem as reações de forma estocástica, a partir de funções de densidade de probabilidade para a ocorrência das reações químicas. Outro estudo importante a ser feito é o de um modelo mais completo de combustão, que considere a formação de óxidos de nitrogênio, ao invés de apenas CO e CO₂.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ANSYS Inc.; **“Ansys CFX User Theory Guide”**, Release 13.0, 2010.

Da Silva, C.V.; **“Simulação Numérica da Combustão Turbulenta de Gás Natural em Câmara Cilíndrica”**, Programa de pós-Graduação em Engenharia Mecânica UFRGS – Porto Alegre, 2005.

Dorigon, L.J.; **“Determinação de Coeficientes do Modelo da Soma-Ponderada-dos-Gases-Cinzas a Partir do Banco de Dados HITEMP 2010”**, Programa de pós-Graduação em Engenharia Mecânica UFRGS – Porto Alegre, 2011.

Garretón, D.; e Simonin, O.; **“Final results”**, First Workshop of Aerodynamics of Steady State Combustion Chambers and Furnaces, EDF-ERCOFTAC, vol. 25, pp 29-35, 1994.

Garretón, D. e Simonin, O.; **“Aerodynamics of Steady State Combustion Chambers and Furnaces”**, Report of Activities in ERCOFTAC , vol. 25, pp 29-35, 1995.

Incropera, F.P; Bergman, T.L; Dewitt, D.P.; Lavine, A.S.; **“Fundamentos de Transferência de Calor e de Massa”**, LTC, 6ª edição, 2008.

Launder, B.E.; Sharma, B.I.; **“Application of the Energy-Dissipation Model of Turbulence to the Calculation of Flow Near a Spinning Disk”**, Letters in Heat and Mass Transfer 19, pp 519-524, 1974. Citado em [Da Silva, 2005].

Nieckele, A.O.; Carneiro, J.E.; Gomes M.S.P.; Naccache, M.F. e Serfaty, R.; **“Models Evaluations of Combustion Process in a Cylindrical Furnace”**, ASME-IMECE, International Conference of Mechanical Engineering, 2001.

Patankar, S.V.; **“Numerical Heat Transfer and Fluid Flow”**, Hemisphere, 1ª edição 1980.

Ronchetti, B.; da Silva, C.V.; Vielmo, H.A.; **“Simulation of Combustion in Cylindrical Chamber”**, COBEM – Congresso Brasileiro de Engenharia Mecânica, 2005.

Siegel, R.; Howell, J.R.; **“Thermal Radiation Heat Transfer”**, Hemisphere, 2ª edição, 1981. Citado em [Nieckele et al., 2001].

Smith, T. F., Shen, Z. F. e Friedman, J. N. **“Evaluation of coefficients for the weighted sum of the gray gases model”**, Transactions of the ASME – Journal of Heat Transfer, vol. 104, pp 602-608, 1982.

Wilcox, D.C.; **“Turbulence Modeling for CFD”**. La Cañada, 2ª edição, 2000.