

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
INSTITUTO DE MATEMÁTICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM MATEMÁTICA APLICADA

**Simulação Numérica de Chama Laminar
Axisimétrica de Metano/Ar usando
REDIM**

por

Pedro Henrique de Almeida Konzen

Tese submetida como requisito parcial
para a obtenção do grau de
Doutor em Matemática Aplicada

Prof. Dr. Álvaro Luiz De Bortoli
Orientador

Porto Alegre, Dezembro de 2010.

CIP - CATALOGAÇÃO NA PUBLICAÇÃO

Konzen, Pedro Henrique de Almeida

Simulação Numérica de Chama Laminar Axisimétrica de Metano/Ar usando REDIM / Pedro Henrique de Almeida Konzen.—Porto Alegre: PPGMAp da UFRGS, 2010.

154 p.: il.

Tese (Doutorado) —Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada, Porto Alegre, 2010.

Orientador: De Bortoli, Álvaro Luiz

Tese: Matemática Aplicada

Método dos Elementos Finitos, Dinâmica dos Fluídos, Combustão, Redução Automática de Mecanismos Químicos

Simulação Numérica de Chama Laminar Axisimétrica de Metano/Ar usando REDIM

por

Pedro Henrique de Almeida Konzen

Tese submetida ao Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada do Instituto de Matemática da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, como requisito parcial para a obtenção do grau de

Doutor em Matemática Aplicada

Linha de Pesquisa: Métodos Analíticos e Numéricos em Dinâmica de Fluidos

Orientador: Prof. Dr. Álvaro Luiz De Bortoli

Banca examinadora:

Prof. Dr. Fernando Fachini Filho
INPE/LCP

Prof. Dr. Andrei Bourchtein
UFPEL/Depto. de Matemática

Prof. Dr. Nilo Sérgio Medeiros Cardozo
UFRGS/PPGEQ

Prof. Dr. Julio Cesar Ruiz Clayessem
UFRGS/PPGMAp

Tese apresentada e aprovada em
13/12/2010.

Prof. Dr. Waldir L. Roque
Coordenador

*Aos meus pais,
Mauro e Diana.*

AGRADECIMENTOS

Este trabalho é resultado de um projeto de cooperação entre o *Interdisziplinäres Zentrum für Wissenschaftliches Rechnen* (IWR) da Universidade de Heidelberg (*Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg*, Uni-HD) e o Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada da Universidade Federal do Rio Grande do Sul. O projeto de estágio de doutorado no exterior (Programa de Doutorado Sanduíche CNPQ/CAPES/DAAD) teve o suporte financeiro do *Deutscher Akademischer Austausch Dienst* (DAAD) e da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES).

Eu sou grato ao Prof. Dr. Álvaro Luiz de Bortoli pelo total incentivo e orientação dos meus estudos de doutorado. Eu sou também grato ao Prof. Dr. Uwe Riedel (atualmente professor da *Universität Stuttgart* e membro da *Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt*, DLR) por sua supervisão e total suporte a esse projeto de intercâmbio quando na Universidade de Heidelberg. Eu sou ainda grato ao Prof. Dr. Rolf Rannacher e ao Prof. Dr. Hans Georg Bock por terem aceitado minha inscrição de membro visitante da *Heidelberg Graduate School of Mathematical and Computational Methods for the Sciences* (HGS MathComp).

Em especial, eu sou muito grato ao Dr. Thomas Richter da Universidade de Heidelberg e membro do *Institute für Angewandte Mathematik* e ao Prof. Dr. Ulrich Maas do *Karlsruher Institut für Technologie* pelas muitas discussões e reuniões, as quais foram indispensáveis para o desenvolvimento deste projeto.

CONTEÚDO

LISTA DE FIGURAS	xi
LISTA DE TABELAS	xiv
RESUMO	xv
ABSTRACT	xvi
1 INTRODUÇÃO	1
2 FORMULAÇÃO MATEMÁTICA	7
2.1 Equações governantes básicas para escoamentos reativos multicomponentes	9
2.1.1 Equação da continuidade	9
2.1.2 Conservação da massa das espécies	10
2.1.3 Equação da quantidade de movimento	11
2.1.4 Balanço de energia	12
2.2 Termos fontes químicos	13
2.3 Fluxos moleculares	15
2.3.1 Transporte de massa	15
2.3.2 Transporte molecular de quantidade de movimento	16
2.3.3 Transporte de energia	17
2.3.4 Fluxo de calor radiativo	17
2.3.4.1 Submodelo radiativo	19
2.4 Coeficientes de transporte	21
2.4.1 Coeficientes de difusão	21

2.4.2	Coeficientes de difusão térmica	22
2.4.3	Coeficiente de viscosidade	23
2.4.4	Coeficiente de condutividade térmica	24
2.4.5	Números adimensionais	25
2.5	Formulação de baixo número de Mach	27
3	CINÉTICA DA COMBUSTÃO	30
3.1	Cinética da reação	30
3.1.1	Ordens da reação	31
3.1.2	Reação elementar e global	32
3.1.3	Coeficiente da taxa de reação	33
3.2	Mecanismos de combustão	35
3.2.1	Reações em cadeia	36
3.2.2	O processo de oxidação do metano	37
3.2.3	Mecanismos de reações completos	39
4	MODELOS REDUZIDOS PARA COMBUSTÃO	42
4.1	Mecanismos esqueletos	42
4.2	Fração de mistura e a hipótese de química rápida	43
4.2.1	Fração de mistura	43
4.2.2	Solução de Burke-Schumann	45
4.2.3	A equação da fração de mistura e o modelo <i>Flame Sheet</i>	47
4.3	Modelo flamelet	48
4.4	Representação da cinética química	51
4.5	A hipótese de equilíbrio parcial	55
4.6	A hipótese de estado quase-estacionário	57
4.7	<i>Intrinsic Low-Dimensional Manifolds</i>	59

5	REDIM	64
5.1	Equação REDIM	64
5.2	O gradiente das coordenadas locais	69
5.3	Algoritmo geral	70
5.4	Parametrização da variedade	72
5.5	Condições iniciais e de fronteira	74
5.6	REDIMs calculadas	76
5.6.1	1D-REDIM	76
5.6.2	2D-REDIM	77
5.7	Tabelas <i>lookup</i>	78
5.8	Projeção do sistema completo na variedade reduzida	80
6	ESQUEMA NUMÉRICO	82
6.1	Discretização	83
6.1.1	Formulação fraca e axisimetria	85
6.1.2	A formulação de Galerkin	87
6.2	Estabilização	89
6.2.1	Técnica <i>Streamline-diffusion</i>	90
6.2.2	Estabilização da pressão	92
6.2.3	Estabilização de mínimos quadrados para as equações N-S	93
6.2.4	Método de Projeção Local	95
6.3	<i>Solver</i>	96
6.3.1	Método de Newton Aplicado	96
6.3.2	O método multigrid	100
6.3.3	O operador de amortecimento	102
6.4	Adaptatividade	103

6.5	Esquema pseudo-transiente	105
7	SIMULAÇÃO NUMÉRICA USANDO REDIM	108
7.1	Definição do problema	108
7.2	Malha inicial e adaptatividade	110
7.3	1D-REDIM <i>versus</i> 2D-REDIM	113
7.4	Comparação dos resultados computacionais e experimentais	115
7.4.1	Comportamento global da chama	115
7.4.2	Perfis axiais	116
7.4.3	Perfis radiais	118
8	CONCLUSÕES	121
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	124
	APÊNDICE A FORMULAÇÃO AXISIMÉTRICA	136
A.1	Formulação fraca em coordenadas cilíndricas	138
A.1.1	Termo escalar	138
A.1.2	Derivada temporal	139
A.1.3	Divergente	139
A.1.4	Convecção escalar	140
A.1.5	Difusão escalar	141
A.1.6	Termo vetorial	141
A.1.7	Derivadas temporais da velocidade	142
A.1.8	Convecção vetorial	142
A.1.9	Difusão vetorial	143
A.1.10	Gradiente escalar	144
A.1.11	Gradiente da pressão	145

APÊNDICE B	REDIM PARA UM MODELO SIMPLIFICADO	146
B.1	O mecanismo de Jones e Lindsted	146
B.2	1D-REDIM	147
B.3	2D-REDIM	151

LISTA DE FIGURAS

Figura 1.1	Classificação das escalas de tempo em escoamentos quimicamente reativos. Figura baseada na Fig. 7.10 de [92].	2
Figura 2.1	Exemplo de valores dos coeficientes de viscosidade acessados por uma chama difusiva laminar metano/ar.	24
Figura 2.2	Exemplo de valores do coeficiente de condutividade térmica acessados por uma chama difusiva laminar metano/ar.	25
Figura 3.1	Estrutura hierárquica dos mecanismos de combustão de hidrocarbonetos alifáticos. Gráfico baseado na figura 8.8 em [92].	40
Figura 4.1	Exemplo ilustrativo da solução de Burke-Schumann para uma chama de escoamento oposto (<i>counterflow flame</i>) de metano diluído em nitrogênio com ar. Espécies estão em fração de massa e a temperatura em Kelvin.	47
Figura 4.2	Exemplo ilustrativo comparando a solução <i>Flame Sheet</i> (linha preta) com soluções flamelet (linha verde $\chi \approx 10$, linha vermelha $\chi \approx 30$) para uma chama oposta de metano diluído em nitrogênio com ar. As soluções estão projetadas no plano $\phi_{N_2} \times \phi_{CO_2}$	49
Figura 5.1	Solução de uma simulação detalhada para uma chama de metano/ar. (a) Projeção no plano $\phi_{CO_2} \times \phi_{H_2O}$. (b) Projeção no plano $\phi_{N_2} \times \phi_{H_2O}$ plane.	73
Figura 5.2	Malha comum para variedades unidimensionais para a combustão de hidrocarbonetos	73
Figura 5.3	Malha comum para variedades bidimensionais	74

Figura 5.4	Projeção da solução da chama <i>counterflow</i> (linha sólida preta) e a 1D-REDIM calculada (pontos vermelhos) no plano $N_2 \times OH$ do espaço de estados.	77
Figura 5.5	Representação das REDIMs unidimensional (linha preta) e bidimensional (linha vermelha) projetadas no espaço $N_2 \times CO_2 \times OH$. (b) Representação da 2D-REDIM com indicação das condições de fronteira projetada no plano $N_2 \times CO_2$	78
Figura 6.1	Esquema do domínio computacional.	86
Figura 6.2	Esquerda: triangularização com três nodos <i>hanging</i> . Direita: triangularização inválida, múltiplos nodos <i>hanging</i> em um mesmo lado.	88
Figura 6.3	Mapeamento T_K da célula de referência \hat{K} para uma célula computacional K	88
Figura 7.1	Representação esquemática do combustor (a) e do domínio computacional (b).	109
Figura 7.2	Malha inicial e adaptatividade.	110
Figura 7.3	Isolinhas de temperatura e de espécies selecionadas. Esquerda: 1D-REDIM. Direita: 2D-REDIM.	114
Figura 7.4	Isolinhas de temperatura e espécies selecionadas em fração molar. Esquerda: 2D-REDIM. Direita: Dados de simulação detalhada [11].	116

- Figura 7.5 Perfis axiais de temperatura e espécies selecionadas ao longo da linha de simetria. Pontos pretos indicam os dados experimentais de [11]. As linhas pretas indicam os resultados de simulação numérica detalhada reportados em [11]. As linhas azuis com quadrados indicam a solução *Flame Sheet*. As linhas verdes com triângulos indicam a solução 1D-REDIM. As linhas vermelhas com círculos fechados indicam a solução 2D-REDIM. 117
- Figura 7.6 Perfis radiais de temperatura e espécies selecionadas. Pontos são usados para indicar os dados experimentais, linhas para os dados numéricos detalhados e linhas com pontos para os resultados 2D-REDIM. (a) Experimental $z = 0.84$ cm, $\xi = 0.07$, $z_{\text{ref}} = 0.634$ cm, $z_{\text{REDIM}} = 0.643$ cm. (b) Experimental $z = 1.64$ cm, $\xi = 0.38$, $z_{\text{ref}} = 1.67$ cm, $z_{\text{REDIM}} = 1.76$ cm. (c) Experimental $z = 2.44$ cm, $\xi = 0.69$, $z_{\text{ref}} = 2.71$ cm, $z_{\text{REDIM}} = 2.88$ cm. (d) Experimental $z = 3.64$ cm, $\xi = 1.155$, $z_{\text{ref}} = 4.269$ cm, $z_{\text{REDIM}} = 4.56$ cm. . . . 120
- Figura A.1 Coordenadas cilíndricas 136

LISTA DE TABELAS

Tabela 3.1	Exemplos de reações globais.	33
Tabela 4.1	Valores típicos de ϕ e Z_{st} para combustíveis comumente usados. AR denota a mistura $0.21\%O_2 + 0.79\%N_2$	45
Tabela 7.1	Análise da adaptatividade da malha para o modelo 1D-REDIM.	112
Tabela 7.2	Análise da adaptatividade da malha para o modelo 2D-REDIM.	112
Tabela 7.3	Parâmetros usados para determinar as posições axiais de referência.	119
Tabela B.1	Dados da cinética química para a modelagem da combustão de metano/ar para o esquema de Jones e Lindsted [80]. Unidades em m,kg,s,mol,K.	147

RESUMO

Este trabalho tem por objetivo analisar a aplicação do Método *Reaction Diffusion Manifold* (REDIM) na simulação de chamas axisimétricas, difusivas e laminares. Modelos detalhados de cinética química são usualmente computacionalmente proibitivos para a simulação de fluxos reativos complexos e, portanto, modelos reduzidos são necessários. Ferramentas automáticas de redução de modelos normalmente exploram a estrutura multi-escalar natural dos sistemas de combustão. A nova técnica REDIM aplica o conceito de variedades invariantes para tratar, também, a influência dos processos de transporte no modelo reduzido. Assim, ela supera um problema fundamental na redução de modelos em negligenciar o acoplamento do transporte molecular com o processo termodinâmico. Para o estudo, considera-se como caso teste uma chama de metano/ar (65%CH₄ + 35%N₂), difusiva, laminar, axisimétrica, a pressão atmosférica para validar a metodologia aqui apresentada. Primeiramente, REDIM uni e bidimensionais são computadas e tabuladas em tabelas *lookup*. Então, o sistema completo de equações governantes é projetado na REDIM e implementado no código Gascoigne através de uma nova biblioteca *addon* para tratar as tabelas REDIM. O sistema projetado de equações governantes é discretizado pelo Método de Elementos Finitos (MEF) e resolvido por uma iteração GMRES preconditionada por um método multigrid geométrico. Refinamento de malha local, malha adaptativa e paralelismo foram aplicados para garantir eficiência e precisão. Os resultados numéricos obtidos usando a técnica REDIM mostram boa concordância com os dados de simulação numérica detalhada e dados experimentais reportados na literatura.

ABSTRACT

The goal of this work is to analyze the use of automatically reduced chemistry by the Reaction-Diffusion-Manifold (REDIM) method in simulating axisymmetric laminar coflow diffusion flames. Detailed chemical kinetic models are usually computationally prohibitive for simulating complex reacting flows and, therefore, reduced models are required. Automatic reduction models approaches usually exploit the natural multiscale structure of combustion systems. The novel REDIM approach applies the concept of invariant manifolds to treat also the influence of the transport processes on the reduced model, which overcomes a fundamental problem of model reduction in neglecting the coupling of molecular transport with thermochemical processes. We have considered a previously well studied atmospheric pressure nitrogen-diluted methane/air flame as a test case to validate the methodology presented here. First, one-dimensional and two-dimensional REDIMs were computed and tabulated in lookup tables. Then, the full set of governing equations are projected on the REDIM and implemented in the object-oriented C++ Gascoigne code with a new add-on library to deal with the REDIM-tables. The projected set of governing equations has been discretized by the Finite Element Method (FEM) and solved by a GMRES iteration preconditioned by a geometric multigrid method. Local grid refinement, adaptive mesh and parallelization are applied to ensure efficiency and precision. The numerical results obtained using the REDIM approach have shown very good agreement with detailed numerical simulations and experimental data.

1 INTRODUÇÃO

A simulação computacional de escoamentos quimicamente reativos é uma prática bastante conhecida no planejamento e na predição de performance de sistemas práticos de combustão, especialmente com respeito ao custo operacional econômico e a minimização da emissão de poluentes. Ela envolve a complexa modelagem da dinâmica de fluídos e cinética química (veja, por exemplo, [52, 78, 92] e [21, 55, 93] para um resumo da área).

Modelos de cinética química detalhada para aplicações práticas de combustão são tipicamente muito grandes (≈ 100 espécies e milhares de reações químicas para hidrocarbonetos típicos), rígidos e não lineares [76, 77, 92]. Assim, em geral, eles são computacionalmente proibitivos para a simulação de complexos escoamentos reativos, tais como, escoamentos turbulentos. Mesmo chamas laminares difusivas, as quais têm sido simuladas usando química e transporte detalhados, são computacionalmente caros e requerem um alto tempo computacional.

Como exemplo, pode-se considerar a modelagem clássica de uma chama difusiva de metano/ar em uma geometria tridimensional empregando o mecanismo químico completo GRI-3.0 [83]. Sem levar em conta possíveis efeitos turbulentos (os quais aumentam a complexidade da modelagem e os custos computacionais) este escoamento reativo pode ser modelado por um sistema rígido, não linear de equações diferenciais parciais (EDP's) de dimensão 58 (veja o Capítulo 2 para maiores detalhes). Aqui, 5 equações governam a conservação de massa, a quantidade de movimento e a energia. Estas são acopladas com outras 53 equações de balanço de massa (uma para cada espécie química), as quais descrevem as variações devidas ao transporte (como exemplo, a mistura molecular) e a reação (consumo/formação) de cada espécie presente no sistema.

Este é um exemplo típico de um modelo altamente complexo de combustão, embora seja um dos mais simples casos práticos de combustão. Mecanismos detalhados da combustão de hidrocarbonetos mais complexos (como Diesel) contém muito mais espécies químicas [36] e sistemas práticos são usualmente turbulentos [88], o que aumenta muito a complexidade e a dimensão do sistema governante. Para tais sistemas, não se conhece solução exata e aproximações numéricas para modelos detalhados requerem altíssimos custos computacionais. Assim, existe uma forte demanda por modelos simplificados que reduzam a rigidez, a dimensão e, assim, o tempo computacional e armazenamento de dados necessária para as simulações.

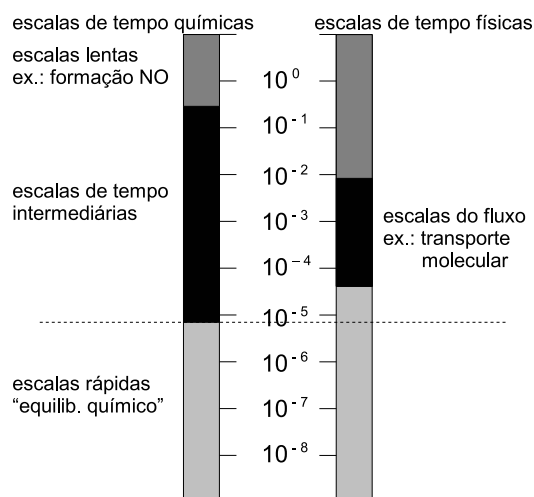


Figura 1.1: Classificação das escalas de tempo em escoamentos quimicamente reativos. Figura baseada na Fig. 7.10 de [92].

Comumente, a primeira tentativa na redução de modelos de combustão é o desenvolvimento de mecanismos esqueletos, ou *skeletal mechanisms*, (veja, por exemplo, [73, 97] para a oxidação do *n*-heptano, [75, 76] para a oxidação de metano). Tais mecanismos dependem do problema em interesse e são usualmente desenvolvidos por meio de análises de sensibilidade e/ou por técnicas automáticas (por exemplo, *chemical lumping* [97] e *direct relation graph method* [94]). Mecanismos esqueletos são, ainda, muito complexos para a maioria dos sistemas de combustão e uma maior simplificação de modelo é requerida. Idealmente, busca-se uma téc-

nica de redução de modelo que permita a modelagem dos processos físico-químicos através de apenas algumas poucas variáveis de progresso.

A maioria das ferramentas existentes de redução de modelos explora a estrutura multi-escalar dos sistemas de combustão (veja, por exemplo, [41, 71] para um resumo, e a Figura 1.1 para uma classificação esquemática). As reações químicas tipicamente cobrem um intervalo de 10^{-10} s até mais de 1 s. Mas, as escalas de tempo dos processos físicos (como transporte molecular, turbulência, etc.) cobrem um intervalo muito menor, tipicamente de 10^{-5} s a 10^{-2} s [92]. Portanto, os processos químicos rápidos (com escalas de tempo menores que 10^{-5} s) correspondem a processos de equilíbrio. A remoção dos processos rápidos implica na redução da dimensão e da rigidez do modelo matemático. A ideia básica é considerar somente os processos lentos (*rate-limiting processes*), ao invés de toda a dinâmica química. Desta forma, consegue-se aumentar consideravelmente o desempenho das simulações numéricas.

Nesta classe de métodos, as hipóteses de estado quase-estacionário (*quasi-steady state*, QSS) e de equilíbrio parcial (*partial equilibrium*) são largamente empregadas na redução de mecanismos de forma combinada. Peter e Rogg [76] publicaram uma seleção de artigos explicando o uso destas técnicas para diferentes hidrocarbonetos. A maior desvantagem destas estratégias é a dificuldade (embora seja possível) de automatizá-las. Ferramentas automáticas de redução de modelos químicos diminuem a demanda por conhecimento especializado em cinética química, pois, em geral, exploram as estruturas matemáticas dos mecanismos químicos. Métodos como o *intrinsic low-dimensional manifold* (ILDm, veja o trabalho pioneiro [62]) e o *computational singular perturbation* (CSP, [54, 53]) tem sido intensamente aplicados para a redução automática de diferentes mecanismos químicos. A maior desvantagem destes está em negligenciar o fenômeno de transporte na simplificação da cinética química.

O objetivo deste trabalho é de analisar o uso de mecanismos químicos automaticamente reduzidos pela técnica *Reaction-Diffusion Manifold* (REDIM) [22, 24] na simulação de chamas difusivas laminares axisimétricas. Diferentemente de muitos outros métodos similares, esta recente ferramenta de redução de modelos explora o conceito de variedades invariantes para tratar a influência dos processos de transporte durante a simplificação dos modelos [22]. Assim, superando um dos problemas fundamentais na redução de modelos em negligenciar o acoplamento do transporte molecular com os processos termoquímicos.

Chamas difusivas laminares são largamente estudadas com o objetivo de melhor entender os fenômenos físicos-químicos presentes em escoamentos reativos. Tais estudos têm inclusive fornecido vários *insights* para sistemas mais complexos de combustão, como chamadas turbulentas (veja, por exemplo, a modelagem flamelet para chamas turbulentas [74]). Muitos trabalhos experimentais e numéricos têm investigado a estrutura de chamas laminares de hidrocarbonetos em várias condições (veja, por exemplo, [1, 87]). Alguns estudos mostram a relação entre o comprimento da chama laminar e o número de Reynolds (veja, por exemplo, [86]). Resultados experimentais para chamas laminares (em ambientes de baixa e alta gravidade) têm fornecido *insights* sobre a relação quase linear entre a largura de chama e o número de Reynolds [57, 87]. Investigações do fenômeno de ancoragem da chama (o desacoplamento da chama do injetor de combustível, *lift-off phenomenon*) são também reportados (veja, por exemplo, [65] para chamas de metano diluído em nitrogênio e [49] para chamas de propano diluído em nitrogênio).

Com o aperfeiçoamento das técnicas de coleta experimental, medições de partículas de fuligem, da concentração das espécies maiores e da temperatura têm sido realizadas para chamas com diferentes configurações. Estas medições têm fornecido valiosos dados para o desenvolvimento de aproximações numéricas e analíticas. Por exemplo, Shaddix et al. [81, 82] mediu partículas de fuligem e os perfis de temperatura para chamas difusivas de metano, propano e etileno. Temperatura

e concentrações de espécies maiores para diferentes misturas de metano/ar são encontradas nos trabalhos [65, 91]. Concentrações de hidrocarbonetos em chamas de metano/ar são encontradas em [64]. Mesmo recentemente, Connelly et al. [33] reportou perfis de temperatura, fuligem e concentrações de NO em chamas difusivas.

Desde o trabalho pioneiro de Smooke [85], chamas laminares axisimétricas têm sido numericamente simuladas empregando cinética química e dados de transporte detalhados. Os resultados são, então, validados com dados experimentais (veja, por exemplo, [33] para investigações em chama de etileno, [11, 84] para chamas de metano/ar, [28, 90] para chama de hidrogênio, e muito outros). Estes trabalhos fornecem valiosos dados para teste de novos códigos computacionais, novos mecanismos químicos, modelos de transporte, como também, para o teste de mecanismos de reação reduzidos, o que é investigado neste trabalho.

A validação das técnicas usadas neste trabalho é realizada através da comparação de dados de simulação numérica reduzida com REDIM contra dados de simulação numérica detalhada e dados experimentais de uma chama laminar difusiva de metano diluído em nitrogênio/ar a pressão atmosférica. Este caso teste tem sido extensivamente estudado e, assim, serve bem como referência (veja, [11, 12, 65] e as referências encontradas nestes trabalhos).

REDIM uni (1D-REDIM) e bidimensionais (2D-REDIM) foram computadas para a mistura de metano diluído com nitrogênio ($35\%N_2 + 65\%CH_4$) e ar ($79\%N_2 + 21\%O_2$), as quais foram armazenadas em tabelas *lookup* (tabelas-REDIM) para a simulação do escoamento reativo. As REDIMs foram computadas usando o estratégia numérica reportada por Bykov e Maas [24] e implementadas em uma nova versão do código HOMREA [63].

As tabelas-REDIM construídas foram, então, usadas nas simulações numéricas reduzidas. Estas simulações foram realizadas pelo acoplamento das tabelas com o código em C++ Gascoigne [16] através de uma biblioteca *add-on*. As equações

governantes reduzidas em uma formulação de baixo-Mach (*low-Mach flow*) foram discretizadas pelo Método dos Elementos Finitos (MEF) e a solução permanente é calculada seguindo um eficiente *solver* GMRES, pré-condicionado por um método *multigrid* geométrico. Paralelização, refinamento de malha local e adaptatividade são aplicadas para aumentar a performance, eficiência e precisão do *solver*.

O resultados numéricos reduzidos foram validados com dados experimentais e de simulações numéricas detalhadas reportadas em [11]. Também, os resultados das simulações com 1D-REDIM e 2D-REDIM são comparados e as diferenças ressaltadas. Uma síntese completa deste trabalho é encontrada em [51].

Este trabalho está organizado como segue. No Capítulo 2, a formulação matemática aplicada a chamas difusivas laminares é apresentada. A cinética química é, então, discutida em detalhe no Capítulo 3. Uma breve revisão de ferramentas de redução de modelos é apresentada no Capítulo 4, o qual motiva a apresentação do método *Reaction-Diffusion-Manifold* no Capítulo 5. Então, o modelo reduzido é apresentado e sua discretização e a estratégia de solução é apresentada no Capítulo 6. Em seguida, no Capítulo 7, os resultados de simulação numérica usando REDIM são apresentados e discutidos. As conclusões e sugestões de trabalhos futuros são apresentadas no Capítulo 8. As principais referências e anexos fecham este trabalho.

2 FORMULAÇÃO MATEMÁTICA

Neste capítulo, é discutida a modelagem matemática de escoamentos reativos, mais especificamente, de chamas difusivas laminares. O objetivo é de apresentar a teoria básica que sustenta o modelo de baixo-Mach (*low-Mach model*) para as chamas estudadas.

Muitos dos conceitos, aqui apresentados, vêm da teoria clássica da mecânica dos fluidos (veja, por exemplo, [3, 5, 29]). Entretanto, vários conceitos específicos são requeridos para a modelagem de escoamentos reativos multicomponentes. O leitor é recomendado a literatura especializada em combustão computacional (veja, por exemplo, [52, 92, 74]).

Em chamas laminares, a velocidade do fluido é pequena quando comparada a velocidade do som no meio. Neste regime de baixo-Mach, a compressibilidade é devida muito mais as variações de temperatura do que as variações de pressão, isto é, o escoamento é hidrodinamicamente incompressível. Neste caso, discretizações das equações de Navier-Stokes na formulação compressível completa levam, em geral, a esquemas numéricos instáveis (veja, [2] no contexto do Método de Diferenças Finitas e [98] no contexto do Método dos Elementos Finitos).

Alternativamente, a aproximação de Boussinesq poderia ser aplicada para encontrar uma formulação estável. Neste caso, a variação da massa específica é considerada apenas nas forças de corpo (forças gravitacionais). Entretanto, esta aproximação é válida apenas para sistemas com baixos gradientes de temperatura (por exemplo, problemas de convecção natural [98]). Este claramente não é, em geral, o caso de processos de combustão, os quais apresentam tipicamente altos gradientes de temperatura. Portanto, a aproximação de Boussinesq não é uma alternativa viável para os objetivos deste trabalho.

Uma formulação mais apropriada é a aproximação de baixo Mach para escoamentos compressíveis. A ideia é de separar a pressão em duas partes: a pressão termodinâmica e a pressão hidrodinâmica. A pressão termodinâmica é espacialmente constante, o que é particularmente apropriado para a modelagem com REDIM, a qual será considerada. A pressão hidrodinâmica deve ser modelada. O SIMPLE e suas variantes SIMPLEC e SIMPLER [72, 2] modelam numericamente a pressão hidrodinâmica através de uma correlação implícita (veja [95] para o algoritmo SIMPLER no contexto de chamas laminares). A maior desvantagem destes métodos é a baixa taxa de convergência frequentemente observada.

Outra possibilidade é eliminar a pressão das equações governantes assumindo a formulação velocidade-vorticidade (veja, por exemplo, [37] para uma recente discussão sobre o modelo). Nesta formulação a continuidade é intrinsecamente satisfeita, o que implica num modelo reduzido no número de equações governantes. Esta formulação tem sido extensivamente usada para a modelagem de chamas laminares axisimétricas (veja, por exemplo, [85, 84, 11, 33]). Ainda neste sentido, tem-se a formulação função corrente-vorticidade, na qual a função corrente é governada por uma equação de Poisson e o campo de velocidade é o rotacional da função corrente (veja, por exemplo, [50]). A maior desvantagem desta formulação é o custo computacional em resolver sua formulação geral (por exemplo, no caso de chamas não simétricas).

Neste trabalho a formulação de baixo Mach é obtida via uma simplificação da equação de continuidade sobre hipóteses apropriadas. O modelo resultante pode ser aplicado a chamas difusivas laminares em geral e é particularmente apropriado para a modelagem com REDIM, como veremos mais adiante.

2.1 Equações governantes básicas para escoamentos reativos multicomponentes

A partir deste momento, é assumido um escoamento gasoso reativo contínuo de n_{sp} espécies químicas (componentes). No seguinte, são apresentadas as equações governantes básicas para escoamentos reativos multicomponentes [52, 92, 74].

2.1.1 Equação da continuidade

A equação da conservação de massa para um componente de uma mistura reativa lê-se:

$$\frac{\partial \rho_i}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_i \mathbf{v}_i) = \dot{r}_i, \quad (2.1)$$

onde o subscrito i denota a i -ésima espécie, ρ_i a massa específica (kg/m^3), t o tempo (s), \mathbf{v}_i o campo de velocidades (m/s) e \dot{r}_i expressa a taxa de produção/consumo da massa devida as reações químicas ($\text{kg}/\text{m}^3 \cdot \text{s}$).

A conservação de massa da mistura, também chamada de equação da continuidade, pode ser obtida somando todas as n_{sp} equações de balanço (2.1), i.e.:

$$\sum_{i=1}^{n_{\text{sp}}} \left(\frac{\partial \rho_i}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_i \mathbf{v}_i) \right) = \sum_{i=1}^{n_{\text{sp}}} \dot{r}_i. \quad (2.2)$$

Reações químicas não geram nem destroem a quantidade de massa total, isso implica:

$$\sum_{i=1}^{n_{\text{sp}}} \dot{r}_i = 0. \quad (2.3)$$

Agora, pela definição da velocidade média de massa da mistura \mathbf{u} (m/s):

$$\mathbf{u} = \frac{1}{\rho} \sum_{i=1}^{n_{\text{sp}}} \rho_i \mathbf{v}_i \quad (2.4)$$

segue que a equação da continuidade lê-se:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0. \quad (2.5)$$

A equação da continuidade (2.5) nos leva a equação da conservação da massa das espécies.

2.1.2 Conservação da massa das espécies

O fluxo difusivo de massa da i -ésima espécie é definido por:

$$\mathbf{j}_i := \rho_i \mathbf{V}_i := \rho_i (\mathbf{v}_i - \mathbf{u}) \quad (2.6)$$

onde \mathbf{V}_i é a velocidade difusiva da i -ésima espécie (m/s). Pela definição da velocidade de massa média da mistura (2.4), segue

$$\sum_{i=1}^{n_{\text{sp}}} \mathbf{j}_i = \sum_{i=1}^{n_{\text{sp}}} \rho_i \mathbf{V}_i = 0. \quad (2.7)$$

Agora, da conservação da massa das espécies (2.1), pode-se escrever

$$\frac{\partial \rho_i}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_i \mathbf{u}) = -\nabla \cdot \mathbf{j}_i + \dot{r}_i \quad (2.8)$$

Em termos das frações de massa das espécies ($w_i = \rho_i / \rho$)

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho w_i) + \nabla \cdot (\rho w_i \mathbf{u}) = -\nabla \cdot \mathbf{j}_i + \dot{r}_i. \quad (2.9)$$

Em termos do número de moles específicos ($\phi_i = w_i / M_i$)

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \phi_i) + \nabla \cdot (\rho \phi_i \mathbf{u}) = -\frac{1}{M_i} \nabla \cdot \mathbf{j}_i + \frac{1}{M_i} \dot{r}_i \quad (2.10)$$

onde, M_i denota a massa molar da i -ésima espécie (kg/mol).

2.1.3 Equação da quantidade de movimento

A conservação da quantidade de movimento para uma dada espécie i da mistura lê-se

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_i \mathbf{v}_i) + \nabla \cdot (\rho_i \mathbf{v}_i \otimes \mathbf{v}_i) = \nabla \cdot \bar{\bar{\boldsymbol{\sigma}}}_i + \rho_i \mathbf{b}_i + \dot{r}_i \mathbf{v}_i \quad (2.11)$$

onde $\rho_i \mathbf{b}_i$ é a força atuando na i -ésima espécie da mistura ($\text{kg}/\text{m}^2 \cdot \text{s}^2$), $\dot{r}_i \mathbf{v}_i$ é a taxa de geração de movimento por unidade de volume da i -ésima espécie e $\boldsymbol{\sigma}_i$ é o tensor tensão da i -ésima espécie ($\text{kg}/\text{m} \cdot \text{s}^2$). A operação binária \otimes denota o produto tensorial.

Levando em conta que a quantidade de movimento se conserva nas reações químicas, ou seja

$$\sum_{i=1}^{n_{\text{sp}}} \dot{r}_i \mathbf{v}_i = 0, \quad (2.12)$$

tem-se que a equação da conservação da quantidade de movimento para a mistura é:

$$\sum_{i=1}^{n_{\text{sp}}} \left(\frac{\partial}{\partial t}(\rho_i \mathbf{v}_i) + \nabla \cdot (\rho_i \mathbf{v}_i \otimes \mathbf{v}_i) \right) = \nabla \cdot \sum_{i=1}^{n_{\text{sp}}} \bar{\bar{\boldsymbol{\sigma}}}_i + \sum_{i=1}^{n_{\text{sp}}} \rho_i \mathbf{b}_i. \quad (2.13)$$

Agora, pela definição de $\mathbf{V}_i = \mathbf{u} - \mathbf{v}_i$ e a equação (2.7), segue

$$\sum_{i=1}^{n_{\text{sp}}} \rho_i \mathbf{v}_i \otimes \mathbf{v}_i = \sum_{i=1}^{n_{\text{sp}}} \rho_i (\mathbf{V}_i - \mathbf{u}) \otimes (\mathbf{V}_i - \mathbf{u}) \quad (2.14)$$

$$= \rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} + \sum_{i=1}^{n_{\text{sp}}} \rho_i \mathbf{V}_i \otimes \mathbf{V}_i \quad (2.15)$$

Então, a equação (2.13) pode ser reescrita como:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \mathbf{u}) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) = \nabla \cdot \sum_{i=1}^{n_{\text{sp}}} \bar{\bar{\boldsymbol{\sigma}}}_i - \nabla \cdot \left(\sum_{i=1}^{n_{\text{sp}}} \rho_i \mathbf{V}_i \otimes \mathbf{V}_i \right) + \sum_{i=1}^{n_{\text{sp}}} \rho_i \mathbf{b}_i. \quad (2.16)$$

O tensor tensão $\bar{\sigma}_i$ pode ser dividido em uma parte isotrópica devida a pressão parcial e uma parte deviatória devida ao cisalhamento

$$\sigma_i = -p_i \bar{\delta} + \bar{\tau}_i. \quad (2.17)$$

as quais têm a mesma unidade ($\text{kg}/\text{m} \cdot \text{s}^2$) e $\bar{\delta}$ é o Delta de Kronecker.

Uma vez que a pressão estática é a soma das pressões parciais (lei de Dalton), a soma das tensões das espécies individuais fornece o tensor tensão da mistura

$$\bar{\sigma} = \sum_{i=1}^{n_{\text{sp}}} \bar{\sigma}_i = p \bar{\delta} + \sum_{i=1}^{n_{\text{sp}}} \bar{\tau}_i, \quad (2.18)$$

onde a pressão p tem unidade (Pa).

Assim sendo, a equação da quantidade de movimento da mistura pode ser escrita como segue

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \mathbf{u}) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) = -\nabla p + \nabla \cdot \sum_{i=1}^{n_{\text{sp}}} \bar{\tau}_i - \nabla \cdot \sum_{i=1}^{n_{\text{sp}}} (\rho_i \mathbf{V}_i \otimes \mathbf{V}_i) + \sum_{i=1}^{n_{\text{sp}}} \rho_i \mathbf{b}_i. \quad (2.19)$$

2.1.4 Balanço de energia

O balanço de energia é comumente expressado na forma da energia cinética, energia total, e energia térmica [78, 52]. A equação de balanço para a energia cinética pode ser derivada da equação de balanço da quantidade de movimento. A equação de balanço da energia total pode ser derivada da teoria de Volume de Controle Infinitesimal. Agora, da relação entre entalpia e a energia interna, i.e.

$$u = h - \frac{p}{\rho} \quad (2.20)$$

onde, u é a energia interna da mistura (J/kg) e h é a entalpia (J/kg), pode-se derivar a equação de balanço da energia térmica. Esta é uma combinação linear entre as

equações da energia cinética e energia total. Assim, obtêm-se

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho h) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} h) = & -\nabla \cdot \sum_{i=1}^{n_{sp}} \mathbf{q}_i - \nabla \cdot \mathbf{q}^R - \nabla \cdot \sum_{i=1}^{n_{sp}} \mathbf{j}_i h_i \\ & + \sum_{i=1}^{n_{sp}} \bar{\bar{\tau}}_i : \nabla \mathbf{v}_i + \frac{\partial p}{\partial t} + \sum_{i=1}^{n_{sp}} \mathbf{v}_i \nabla p_i. \end{aligned} \quad (2.21)$$

onde, \mathbf{q}_i denota o fluxo de calor molecular da i -ésima espécie ($\text{J}/\text{m}^2 \cdot \text{s}$) e \mathbf{q}^R é o fluxo de calor por radiação ($\text{J}/\text{m}^2 \cdot \text{s}$).

Nos cálculos propostos neste trabalho vamos utilizar a equação (2.21) para o balanço da energia. A escolha de utilizar a equação na formulação da entalpia é condizente com as tabelas REDIM. Isto não é uma restrição da metodologia empregada, mas como iremos discutir mais adiante, facilita as simulações com as tabelas REDIM.

Na sequência, apresenta-se a modelagem das forças externas, dos termos de transporte e das taxas devido as reações químicas.

2.2 Termos fontes químicos

Os termos fontes químicos aparecem nas equações governantes de escoamentos reativos multicomponentes. Eles modelam a produção e o consumo das espécies químicas devido as reações químicas. A modelagem requer um entendimento mínimo de cinética química [92, 52], o que vamos discutir superficialmente nesta seção e vamos aprofundar com mais detalhes no Capítulo 3.

Uma reação química elementar descreve a troca e/ou rearranjo de átomos entre moléculas durante uma eventual colisão entre elas. A colisão pode envolver uma ou mais espécies químicas. A combustão de hidrocarbonetos envolve várias reações elementares e várias espécies químicas (como, por exemplo, a combustão do metano).

Uma reação química elementar r pode ser descrita conforme a equação química



onde, A_i denota o símbolo da i -ésima espécie, k_r o coeficiente da taxa de reação ($\text{mol}/\text{m}^3 \cdot \text{s}$), \hat{a}_{ir} e \tilde{a}_{ir} denotam os coeficientes estequiométricos da reação r para os reagentes e os produtos, respectivamente. A conservação da massa requer

$$\sum_{i=1}^{n_{\text{sp}}} M_i (\tilde{a}_{ir} - \hat{a}_{ir}) = 0, \quad (2.23)$$

onde, M_i é a massa molar da i -ésima espécie (kg/mol).

Em cada reação elementar r , no máximo três espécies estão envolvidas em cada lado da equação [92]. Portanto, no máximo três coeficientes $a_{ir} = (\tilde{a}_{ir} - \hat{a}_{ir})$ não se anulam para cada r . Muito frequentemente, a terceira espécie não é afetada pela reação, ela somente fornece energia cinética para que a reação aconteça, esta é chamada de terceiro corpo.

A taxa molar f_i de produção/consumo da espécie i é obtida pela adição de todas as n_r reações consideradas

$$f_i(T, \mathbf{w}_i) = \sum_{r=1}^{n_r} \left[(\tilde{a}_{ir} - \hat{a}_{ir}) k_r(T) \prod_{j=1}^{n_{\text{sp}}} c_j^{\hat{a}_{jr}}(\mathbf{w}) \right] \quad (2.24)$$

onde, c_j é a concentração (ou, densidade molar) da j -ésima espécie, com $c_j = M_j^{-1} \rho w_j$ (mol/m^3), T denota a temperatura (K) e $\mathbf{w} = (w_1, \dots, w_{n_{\text{sp}}})$. Os termos fontes químicos em fração de massa escrevem-se

$$\dot{r}_i(T, \mathbf{w}) = M_i f_i(T, \mathbf{w}). \quad (2.25)$$

Devido a propriedade dos coeficientes estequiométricos, os termos fontes \dot{r}_i são polinômios de grau máximo 3 com respeito a concentração das espécies. Ainda mais, de (2.23) têm-se que a soma de todos os fontes n_{sp} é nula, i.e.

$$\sum_{i=1}^{n_{\text{sp}}} \dot{r}_i = 0. \quad (2.26)$$

A dependência na temperatura é dada pela lei de Arrhenius estendida:

$$k_r(T) = \tilde{A}_r T^{\beta_r} e^{\left(\frac{-E_{ar}}{RT}\right)}, \quad (2.27)$$

onde \tilde{A}_r é o fator pré-exponencial, β_r denota o expoente da temperatura, E_{ar} a energia de ativação (J/mol) e R a constante universal dos gases ($R = 8.314 \text{ J/mol}\cdot\text{K}$).

Esta lei é empiricamente validada e as constantes \tilde{A}_r , β_r e E_{ar} são usualmente determinadas por experimentos [92].

Na sequência os fluxos moleculares são modelados.

2.3 Fluxos moleculares

Aqui, apresentamos a modelagem dos fluxos de massa \mathbf{j}_i , de quantidade de movimento $\bar{\boldsymbol{\sigma}}_i$, de calor \mathbf{q}_i e de radiação térmica \mathbf{q}^R para cada espécie i , $i = 1, \dots, n_{\text{sp}}$ [52].

2.3.1 Transporte de massa

Em uma mistura gasosa multicomponente, a difusão de massa das espécies \mathbf{j}_i , $i = 1, \dots, n_{\text{sp}}$ são associadas a três forças mecânicas e a uma força térmica [52]. Os fluxos de massa são consequência de: (i) gradientes de concentração $\mathbf{j}_{X,i}$; (ii) pressão $\mathbf{j}_{p,i}$ (por exemplo, no caso de gases em rotação formados por espécies pesadas e leves); (iii) forças externas $\mathbf{j}_{b,i}$ (por exemplo, campo elétrico agindo sobre espécies magnéticas); (iv) gradientes de temperatura $\mathbf{j}_{T,i}$. Estas contribuições são usualmente chamadas de difusão ordinária, pressão, forçada e térmica (Efeito de Soret). Portanto, \mathbf{j}_i pode ser decomposta por

$$\mathbf{j}_i = \mathbf{j}_{X,i} + \mathbf{j}_{p,i} + \mathbf{j}_{b,i} + \mathbf{j}_{T,i}. \quad (2.28)$$

Para misturas de gases ideais de baixa massa específica, estas contribuições podem ser formuladas como segue

$$\mathbf{j}_{X,i} = \frac{\rho M_i}{M^2} \sum_{j=1}^{n_{\text{sp}}} M_j D_{ij} \nabla x_j, \quad (2.29)$$

$$\mathbf{j}_{p,i} = \frac{\rho M_i}{M^2} \sum_{j=1}^{n_{\text{sp}}} M_j D_{ij} (x_j - w_j) \frac{1}{p} \nabla p, \quad (2.30)$$

$$\mathbf{j}_{b,i} = \frac{\rho M_i}{M^2} \sum_{j=1}^{n_{\text{sp}}} M_j D_{ij} \left(x_j M_j \left(\mathbf{b}_j - \sum_{k=1}^{n_{\text{sp}}} \frac{\rho_k}{\rho} \mathbf{b}_k \right) \right), \quad (2.31)$$

$$\mathbf{j}_{T,i} = -D_i^T \nabla (\ln T), \quad (2.32)$$

onde, $x_j = n_j/n$ é a fração molar da j -ésima espécie (n_j número de moles das j -ésima espécie e $n = \sum n_j$ número de moles total), D_{ij} (m^2/s) e D_i^T ($\text{kg}/\text{m} \cdot \text{s}$), $i, j = 1, \dots, n_{\text{sp}}$ são os coeficientes de difusão multicomponentes e os coeficientes de difusão térmica multicomponentes, respectivamente.

Para muitas aplicações práticas, forças magnéticas, bem como, a difusão devida a pressão e a difusão térmica são negligenciáveis. Ainda mais, para misturas que contenham nitrogênio em excesso, por exemplo, a hipótese de forte diluição pode ser aplicada e, assim, a seguinte forma simplificada

$$\mathbf{j}_i = -D_i^M \rho \frac{w_i}{x_i} \nabla x_i \quad (2.33)$$

é suficientemente acurada para modelar o fluxo de massa. Aqui, D_i^M denota o coeficiente de difusão para a espécie i nas outras espécies.

2.3.2 Transporte molecular de quantidade de movimento

Assumindo um fluido Newtoniano, o tensor tensão da mistura pode ser formulado de forma similar ao tensor tensão para uma única espécie [52], i.e.

$$\bar{\boldsymbol{\sigma}} = \sum_{i=1}^{n_{\text{sp}}} \bar{\boldsymbol{\sigma}}_i = -p \bar{\boldsymbol{\delta}} + \bar{\boldsymbol{\tau}} \quad (2.34)$$

onde, o tensor de cisalhamento para uma mistura multicomponente lê-se:

$$\bar{\bar{\tau}} = \mu (\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T) - \left(\frac{2}{3} \mu \nabla \cdot \mathbf{u} \right) \bar{\bar{\delta}}. \quad (2.35)$$

2.3.3 Transporte de energia

O transporte molecular de energia está associado a três principais contribuições: o fluxo de energia devido a gradientes de temperatura (condução), o fluxo de energia relacionado ao transporte de massa (inter-difusão) e ao efeito de Dufour (fluxo de energia devido a difusão de massa) [52]. Na maioria dos casos, o efeito de Dufour é negligenciável.

A forma empírica usualmente utilizada para o fluxo de energia é dado por:

$$\mathbf{q}^T = -\lambda \nabla T + \sum_{i=1}^{n_{\text{sp}}} \mathbf{j}_i h_i + RT \sum_{i=1}^{n_{\text{sp}}} \sum_{j=1}^{n_{\text{sp}}} \left(\frac{x_j \alpha_i}{M_i D_{ij}} \right) (\mathbf{V}_i - \mathbf{V}_j) \quad (2.36)$$

onde, α_i é o coeficiente de difusão térmico para a espécie i ($\text{kg/m} \cdot \text{s}$) e λ é a condutividade térmica ($\text{J/K} \cdot \text{m} \cdot \text{s}$).

2.3.4 Fluxo de calor radiativo

O fluxo de calor radiativo em uma dada direção pode ser obtida por meios da integração da intensidade do campo de energia radiativo sobre todos os comprimentos de onda e ângulo sólido [89], i.e.

$$\mathbf{q}^R = \int_0^\infty \int_{4\pi} I_{\lambda\omega} \mathbf{s} d\omega d\lambda, \quad (2.37)$$

onde $I_{\lambda\omega}$ é a intensidade do campo da energia radiativa ($\text{W/m}^2 \cdot \text{sr} \cdot \text{Hz}$), a qual é a solução da equação do transporte de radiação

$$\nabla \cdot I_{\lambda\omega} \mathbf{s} = \kappa_\lambda I_{b\lambda} - \kappa_\lambda I_{\lambda\omega} - \sigma_{s\lambda} I_{\lambda\omega} + \frac{\sigma_s \lambda}{4\pi} \int_{4\pi} I(\mathbf{x}, \mathbf{s}', \lambda) \Phi(\mathbf{s}', \mathbf{s}, \lambda) d\omega'. \quad (2.38)$$

Nesta equação, κ_λ e $\sigma_{s\lambda}$ são os coeficientes de absorção e espalhamento, $I_{b\lambda}$ é a intensidade de radiação do corpo negro, Φ é a função de fase, a qual fornece a porcentagem de energia recebida da direção \mathbf{s}' que é desviada para na direção \mathbf{s} .

É importante notar que as contribuições radiativas aparecem na equação da conservação da energia como o divergente do fluxo de calor radiativo. Assim, a taxa de transferência de calor devida a radiação sobre todos os comprimentos de onda e direções em um volume finito Ω limitado por uma superfície fechada S pode ser obtida diretamente pela integração do divergente, como segue

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \nabla \cdot \mathbf{q}^R d\Omega &= \int_0^\infty \int_{4\pi} \int_{\Omega} \nabla \cdot (I_{\lambda\omega} \mathbf{s}) d\Omega d\omega d\lambda \\ &= \int_0^\infty \int_{4\pi} \int_{\Omega} (\kappa_\lambda I_{b\lambda} - \kappa_\lambda I_{\lambda\omega}) d\Omega d\omega d\lambda. \end{aligned} \quad (2.39)$$

A precisão das predições da transporte radiativa é limitada pela precisão das medidas das propriedades radiativas do meio. Esta é especialmente crítica em problemas de combustão. Gases combustíveis não espalham radiação significativamente, mas algumas espécies são fortes absorvantes e emissores de energia radiativa.

De acordo com a mecânica quântica, quando uma fonte eletromagnética age sobre uma mistura gasosa, ela é absorvida somente se a quantidade de energia da onda é exatamente a quantidade de energia necessária para elevar a energia molecular de um nível baixo para um nível mais alto. Uma vez que a energia da onda é em quantidades discretas ($\tilde{h}c/\lambda$, \tilde{h} a constante de Planck e c a velocidade da onda), somente um comprimento de onda λ é afetado. A maioria das moléculas gasosas têm varias centenas ou mesmo milhares de estados de energia possíveis. Os gases de combustão (por exemplo, CO_2 e H_2O) tem entre 10^5 e 10^6 estados de energia.

Dado a alta variação dos comprimentos de onda dos coeficientes de absorção (igual ao número de coeficientes de emissão pela lei de Kirchoff), o estudo completo da equação de transporte de radiação é, no presente, além das possibilida-

des da maioria dos estudos práticos, o que inclui os estudos em combustão. Envolve a resolução de tantas equações quantos estados de energia.

2.3.4.1 Submodelo radiativo

O transporte de calor radiativo em chamas é comumente modelada pela suposição de que a quantidade de energia emitida é consideravelmente maior que a absorvida e espalhamento não ocorre. Portanto, a taxa líquida de transporte de calor por radiação depende somente da intensidade radiativa do corpo negro $I_{b\lambda}$ e não existe necessidade de resolver a equação (2.39).

Uma variante da aproximação acima é dada pelo modelo opticamente fino (*optically thin model*), o qual é tipicamente aplicado na modelagem de chamas. Este modelo assume radiação opticamente fina entre os gases quentes e as vizinhanças frias. Cada ponto de radiação tem uma visão isotrópica do meio vizinho (veja [42, 4], e as referencias neles citadas). A perda de calor radiativa por unidade de volume para um sistema de um componente é expressada por

$$\nabla \cdot \mathbf{q}^R = 4\sigma (\kappa_P T^4 - \kappa_I T_s^4) \quad (2.40)$$

onde, σ é a constante de Stefan-Boltzmann ($\sigma = 5.669 \times 10^{-8} \text{ W/m}^2 \cdot \text{K}^4$), T_s é a temperatura do meio (K), κ_P é o coeficiente de absorção média de Planck (m/N) e κ_I é o coeficiente de absorção média incidente (m/N). Supondo, ainda, $T_s \ll T$ obtemos a seguinte submodelo radiativo

$$\nabla \cdot \mathbf{q}^R = 4\sigma \kappa_P (T^4 - T_s^4). \quad (2.41)$$

Para uma mistura de gases, a absorção média de Planck é dada pela soma das pressões parciais pelos coeficientes de absorção de cada espécie

$$\kappa_P = \sum_{i=1}^{n_{\text{sp}}} p_i \kappa_{P_i}, \quad (2.42)$$

onde

$$\kappa_P(T, P) = \frac{\int_0^\infty \kappa_\lambda(\lambda, T, P) I_{b\lambda}(T) d\lambda}{\int_0^\infty I_{b\lambda}(T) d\lambda}, \quad (2.43)$$

e $I_{b\lambda}(T)$ é a função de Planck.

Para chamas de metano/ar as espécies radiativas mais importantes são CO_2 , H_2O e, em uma escala inferior, CH_4 e CO [4, 42]. Para estas espécies, os coeficientes de Planck médios são calculados dos coeficientes espectrais das espécies κ_λ , os quais são comumente preditos pelo código RADCAL.

Neste trabalho, os coeficientes médios de absorção de Planck para CO_2 , H_2O , CH_4 e CO forma expressos por polinômios da temperatura, como em [4, 70]. Por uma questão de clareza, os polinômios são aqui apresentados

$$\begin{aligned} \kappa_{\text{P}_{\text{CO}_2}} &= 18.741 - 121.31 \left(\frac{1000}{T} \right) + 273.5 \left(\frac{1000}{T} \right)^2 - 194.05 \left(\frac{1000}{T} \right)^3 \\ &+ 56.31 \left(\frac{1000}{T} \right)^4 - 5.8169 \left(\frac{1000}{T} \right)^5, \end{aligned} \quad (2.44)$$

$$\begin{aligned} \kappa_{\text{P}_{\text{H}_2\text{O}}} &= -0.23093 + 1.1239 \left(\frac{1000}{T} \right) + 9.4153 \left(\frac{1000}{T} \right)^2 - 2.9988 \left(\frac{1000}{T} \right)^3 \\ &+ 0.51382 \left(\frac{1000}{T} \right)^4 - 1.8684 \left(\frac{1000}{T} \right)^5, \end{aligned} \quad (2.45)$$

$$\begin{aligned} \kappa_{\text{P}_{\text{CH}_4}} &= 6.6334 - 0.0035686T + 1.6682 \times 10^{-8}T^2 + 2.5611 \times 10^{-10}T^3 \\ &- 2.6558 \times 10^{-14}T^4, \end{aligned} \quad (2.46)$$

e $\kappa_{\text{P}_{\text{CO}}}$ é dado por diferentes polinômios. For $300 \leq T \leq 750\text{K}$:

$$\begin{aligned} \kappa_{\text{P}_{\text{CO}}} &= 4.7869 - 0.06953T + 2.95775 \times 10^{-4}T^2 - 4.25732 \times 10^{-7}T^3 \\ &+ 2.02894 \times 10^{-10}T^4, \end{aligned} \quad (2.47)$$

e para $750 < T \leq 2500\text{K}$:

$$\begin{aligned} \kappa_{\text{P}_{\text{CO}}} &= 10.09 - 0.01183T + 4.7753 \times 10^{-6}T^2 - 5.87209 \times 10^{-10}T^3 \\ &- 2.5334 \times 10^{-14}T^4 \end{aligned} \quad (2.48)$$

Para fechar a modelagem matemática, os coeficientes de transporte precisam ser determinados.

2.4 Coeficientes de transporte

Aqui apresentamos a modelagem dos coeficientes de transporte para escoamentos reativos multicomponentes. A formulação rigorosa dos coeficientes de transporte não será considerada neste trabalho, pois esta formulação é computacionalmente proibitiva para a simulação de chamas. Alternativamente, uma formulação simplificada é derivada com base na teoria cinética de gases assumindo aproximações de primeira ordem e medidas experimentais [92].

2.4.1 Coeficientes de difusão

Predições do coeficiente de difusão (D) para um sistema com um componente supondo o modelo intermolecular de esferas rígidas, mostram que o coeficiente de difusão é proporcional ao produto da velocidade média pelo livre caminho médio, i.e.

$$D_{\text{rigid sphere}} = \frac{3}{8} \frac{\sqrt{\pi \bar{m} k T}}{\pi \bar{\sigma}^2} \frac{1}{\rho} = \frac{6}{5} \frac{\mu}{\rho} = \frac{6}{5} \nu \quad (2.49)$$

onde, k denota a constante de Boltzmann ($k = 1.3807 \times 10^{-23} \text{ m}^2 \cdot \text{kg/s}^2 \cdot \text{K}$), T a temperatura absoluta, $\bar{\sigma}$ o diâmetro da partícula e \bar{m} a massa da partícula. Um fator de correção $\Omega^{(1,1)*}$, chamado de integral de colisão reduzido, corrige o modelo das esferas rígidas:

$$D = \frac{D_{\text{rigid sphere}}}{\Omega^{(1,1)*}}. \quad (2.50)$$

Pelo potencial de Lennard-Jones-6-12, a integral de colisão reduzida $\Omega^{(1,1)*}$ é uma função da temperatura reduzida $T^* = kT/\epsilon$, onde ϵ leva em conta o potencial intermolecular.

Para uma mistura de dois componentes, a forma (2.50) é modificada pela substituição da massa pela massa reduzida $m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$, onde o subscrito representa cada componente. Os parâmetros moleculares médios σ_{12} e ϵ_{12} (os quais também definem a temperatura reduzida T_{12}^*) podem ser satisfatoriamente aproximados por parâmetros moleculares usando as seguintes formas simples

$$\sigma_{12} = \frac{\sigma_1 + \sigma_2}{2}, \quad \text{e} \quad \epsilon_{12} = \sqrt{\epsilon_1 \cdot \epsilon_2}, \quad (2.51)$$

os quais fornecem o coeficiente de difusão binário D_{12} :

$$D_{12} = \frac{3}{8} \frac{\sqrt{2\pi kT} \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}}{\pi \sigma_{12}^2 \Omega^{(1,1)*}(T_{12}^*)} \frac{1}{\rho}. \quad (2.52)$$

Agora, pelo uso da lei dos gases ideais $\rho RT = p\bar{M}$, o coeficiente de difusão binário pode ser reescrito conforme

$$D_{12} = 2.662 \times 10^{-9} \frac{\sqrt{\frac{1}{2} T^3 \frac{M_1 + M_2}{M_1 M_2}}}{p \sigma_{12}^2 \Omega^{(1,1)*}(T_{12}^*)} \quad (2.53)$$

o qual ressalta que $D \propto T^{3/2}$ e $D \propto 1/p$.

Para misturas, a forma empírica mais usada é dada por

$$D_i^M = \frac{1 - w_i}{\sum_{j=1, i \neq j}^{n_{\text{sp}}} \frac{x_j}{D_{ij}}}, \quad (2.54)$$

a qual considera a difusão de um componente i na mistura dos outros componentes M . Esta bem conhecida aproximação fornece uma boa precisão ($\approx 10\%$) quando a mistura tem um componente dominante, como mistura contendo nitrogênio em excesso.

2.4.2 Coeficientes de difusão térmica

Os coeficientes de difusão térmica são usualmente dados por

$$D_i^T = -\rho_i \frac{D_i^M \sum_i}{x_i} \nabla(\ln T) \quad (2.55)$$

onde Σ_i é dada por

$$\Sigma_i = \sum_{j=1}^{n_{\text{sp}}} \theta_{ij} x_i x_j. \quad (2.56)$$

Aqui, θ_{ij} são dados apenas para espécies químicas com massa molar menor que 5 (g/mol), para as quais os efeitos da difusão térmica são mais importantes. θ_{ij} não dependem das concentrações das espécies e são usualmente aproximados em termos de polinômios sobre a temperatura.

2.4.3 Coeficiente de viscosidade

Para um sistema de um componente a teoria cinética dos gases, usando o modelo potencial intermolecular de esferas rígidas, garante que o coeficiente da viscosidade μ é proporcional ao produto da massa específica da partícula, velocidade média, massa molecular e caminho livre, i.e.

$$\mu_{\text{rigid sphere}} = \frac{5}{16} \frac{\sqrt{\pi \bar{m} k T}}{\pi \bar{\sigma}^2}. \quad (2.57)$$

A predição é estendida para gases reais assumindo a modificação da expressão (2.57) com um fator $\Omega^{(2,2)*}$ (a integral de colisão reduzida), o que fornece:

$$\mu = \frac{\mu_{\text{rigid sphere}}}{\Omega^{(2,2)*}} = 2.6693 \times 10^{-8} \frac{\sqrt{MT}}{\bar{\sigma}^2 \Omega^{(2,2)*}}. \quad (2.58)$$

Portanto, o coeficiente de viscosidade é proporcional a raiz quadrada da temperatura ($\mu \propto T^{1/2}$).

Para misturas, a aproximação empírica comumente usada ($\approx 10\%$ de precisão) é dada por

$$\mu = \frac{1}{2} \left[\sum_{i=1}^{n_{\text{sp}}} x_i \mu_i + \left(\sum_{i=1}^{n_{\text{sp}}} \frac{x_i}{\mu_i} \right)^{-1} \right]. \quad (2.59)$$

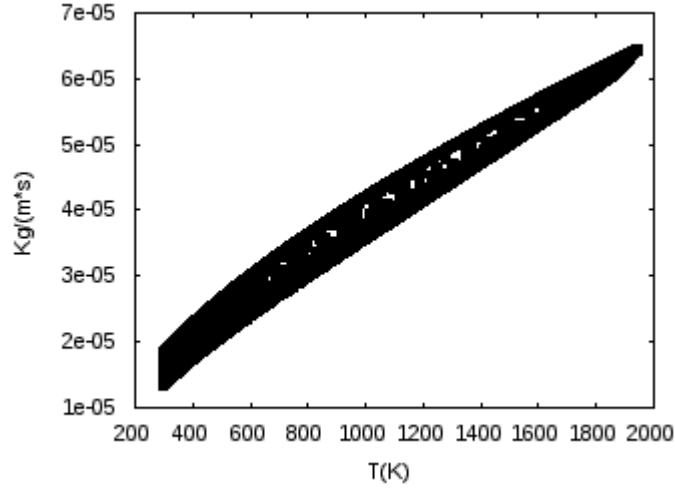


Figura 2.1: Exemplo de valores dos coeficientes de viscosidade acessados por uma chama difusiva laminar metano/ar.

Uma melhor precisão é obtida ($\approx 5\%$ de precisão) por

$$\mu = \sum_{i=1}^{n_{sp}} \frac{\mu_i}{1 + \sum_{k=1, k \neq i}^{n_{sp}} \frac{x_k}{x_i} \Phi_{ik}} \quad (2.60)$$

onde,

$$\Phi_{ik} = \frac{1}{2\sqrt{2}} \left(1 + \frac{M_i}{M_k} \right)^{-\frac{1}{2}} \cdot \left[1 + \left(\frac{\mu_i}{\mu} \right)^{\frac{1}{2}} \cdot \left(\frac{M_k}{M_i} \right)^{\frac{1}{4}} \right]^2. \quad (2.61)$$

2.4.4 Coeficiente de condutividade térmica

Para um sistema com um componente a teoria da cinética dos gases, usando o modelo do potencial intermolecular para esferas rígidas, prediz o coeficiente de condutividade λ como sendo o produto da massa específica da partícula, velocidade média, capacidade de calor molecular $c_v = C_v/N_A$ e o caminho livre médio, o que fornece

$$\lambda_{\text{rigid sphere}} = \frac{25}{32} \frac{\sqrt{\pi \bar{m} k T}}{\pi \bar{\sigma}^2} \frac{c_v}{\bar{m}}. \quad (2.62)$$

A inclusão dos gases reais é dado por

$$\lambda = \frac{\lambda_{\text{rigid sphere}}}{\Omega^{(2,2)*}} = 8.323 \times 10^4 \frac{\sqrt{T/M}}{\sigma^2 \Omega^{(2,2)*}}, \quad (2.63)$$

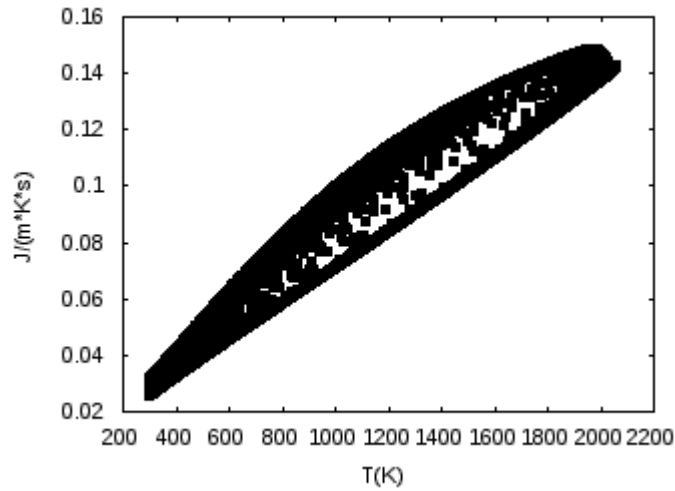


Figura 2.2: Exemplo de valores do coeficiente de condutividade térmica acessados por uma chama difusiva laminar metano/ar.

onde, aqui, T está em (K), M em (g/mol) e σ em (nm). Pode-se ver que a condutividade térmica é proporcional a raiz quadrada da temperatura ($\lambda \propto T^{1/2}$).

Para misturas, uma forma empírica para o coeficiente de condutividade térmica é dada por

$$\lambda = \frac{1}{2} \cdot \left[\sum_{i=1}^{n_{\text{sp}}} x_i \lambda_i + \left(\sum_{i=1}^{n_{\text{sp}}} \frac{x_i}{\lambda_i} \right)^{-1} \right]. \quad (2.64)$$

Uma melhor precisão ($\approx 5 - 10\%$) pode ser obtida por

$$\lambda = \sum_{i=1}^{n_{\text{sp}}} \frac{\lambda_i}{1 + 1.065 \cdot \sum_{k=1, k \neq i}^{n_{\text{sp}}} x_k \Phi_{ik}} \quad (2.65)$$

onde o fator de correção Φ_{ik} é dado pela expressão (2.61).

2.4.5 Números adimensionais

Em muitas situações, as equações governantes são escritas em variáveis adimensionais, as quais permitem que as propriedades físicas sejam relacionadas por números adimensionais [52]. Para a modelagem de combustão os números mais

importantes são: o número de Reynolds (Re), o número de Prandtl (Pr), o número de Schmidt (Sc), o número de Lewis (Le), o número de Damköhler (Da) e o número de Zel'dovich (Ze).

O número de Reynolds é a razão das forças de inercia pela viscosidade. Para chamas tipo jato, é usualmente definido em termos do diâmetro interno do injetor de combustível (d_0), ou seja

$$\text{Re} = \frac{U d_0}{\nu}, \quad (2.66)$$

onde, U é a velocidade média na saída do injetor. Para chamas laminares $\text{Re} < 2000$ e, para escoamentos com $\text{Re} \gtrsim 2000$ os efeitos da transição para um escoamento turbulento aparecem.

O número de Prandtl é definido como a razão do transporte de quantidade de movimento com o transporte de calor, ou seja

$$\text{Pr} = \frac{\mu c_p}{\lambda}. \quad (2.67)$$

Um número de Prandtl típico é 0.75 para a combustão de metano/ar.

O número de Schmidt leva em conta o transporte da quantidade de movimento com o transporte de massa. Ele é definido por

$$\text{Sc} = \frac{\mu}{\rho D_i^M}. \quad (2.68)$$

Típicos valores são: $\text{Sc}_{\text{CH}_4} = 0.714$, $\text{Sc}_{\text{C}_3\text{H}_8} = 1,403$, $\text{Sc}_{\text{C}_4\text{H}_{10}} = 1.650$, e $\text{Sc}_{\text{H}_2} = 0.202$ [27].

A razão entre o número de Schmidt pelo número de Prandtl é chamado de número de Lewis, o qual relaciona a transparência de calor com a transparência de massa. É definido por

$$\text{Le} = \frac{\text{Sc}}{\text{Pr}} = \frac{\lambda}{\rho D_i^M c_p}. \quad (2.69)$$

Para muitos gases, os quais as misturas metano/ar estão incluídas, o número de Lewis é aproximadamente 1. Portanto, a hipótese $Le = 1$ é muitas vezes adotada para chamas turbulentas, afim de diminuir o esforço computacional.

O número de Damköhler é a razão entre a escala de tempo turbulento macroscópico (τ_0) e a escala de tempo química (τ_c), i.e.

$$Da = \frac{\tau_0}{\tau_c}. \quad (2.70)$$

Se $Da < 1$, a escala de tempo necessária para uma mudança química é maior que o tempo necessário para uma mudança de movimento do fluido, o que implica em uma frente de chama larga. Por outro lado, altos Da indicam chamas com estreitas frentes de chama. Frentes estreitas é uma condição desejada para a modelagem flamelet, por exemplo.

O número de Zel'dovich é relacionado a taxa química. Ele é proporcional a razão da temperatura de ativação e a temperatura de queima, i.e.

$$Ze = \bar{\alpha} \frac{T_a}{T_b}, \quad (2.71)$$

onde, $T_a = E_{ar}/R$, $\bar{\alpha} = \frac{T_b - T_u}{T_b}$, T_u é a temperatura dos gases frios (muitas vezes a temperatura ambiente) e T_b é a temperatura dos gases quentes (para chamas adiabáticas de mistura estequiométricas T_b é definida como a temperatura de chama adiabática [92]).

2.5 Formulação de baixo número de Mach

Afim de obter um modelo numérico estável, a aproximação de baixo número de Mach é empregada. Neste caso, a massa específica varia no espaço devido a gradientes de temperatura e massa molar média. A pressão p é separada em duas partes

$$p(x, t) = P_{th}(t) + p_{hyd}(x, t), \quad (2.72)$$

uma parte térmica P_{th} , a qual é constante no espaço e uma parte hidrodinâmica p_{hyd} , a qual é em muitas ordens de magnitude menor que P_{th} . Portanto, negligenciando p_{hyd} na lei dos gases ideais, tem-se uma equação algébrica para a massa específica

$$\rho = \frac{P_{\text{th}}M}{RT} \quad (2.73)$$

ao invés de uma equação para a pressão total como na formulação compressível completa.

Agora, das equações (2.5) e (2.73) obtêm-se

$$\frac{1}{P_{\text{th}}} \frac{\partial P_{\text{th}}}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{u} + \mathcal{L}(u, T, M) = 0, \quad (2.74)$$

onde

$$\mathcal{L}(u, T, M) := \frac{1}{M} \frac{dM}{dt} - \frac{1}{T} \frac{dT}{dt}. \quad (2.75)$$

De agora em diante, a pressão hidrodinâmica será denotada simplesmente por p . Ainda mais, as seguintes hipóteses são tomadas:

- Fluido Newtoniano;
- negligenciável dissipação viscosa;
- negligenciável efeito de Soret;
- negligenciável efeito de Dufour;
- número de Lewis igual a 1;

Assim, com base nas equações (2.5), (2.10), (2.19), (2.21) e as hipóteses acima, o escoamento reativo pode ser descrito pelo seguinte sistema de equações estacionárias:

$$\nabla \cdot \mathbf{u} + \mathcal{L}(\mathbf{u}, T, M) = 0, \quad (2.76)$$

$$\rho \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} - \nabla \cdot (\mu \nabla \mathbf{u}) + \nabla p = (\rho - \rho_0) \mathbf{g}, \quad (2.77)$$

$$\rho \mathbf{u} \cdot \nabla h - \nabla \cdot \left(\frac{\lambda}{c_p} \nabla h \right) = -\nabla \cdot \mathbf{q}^R, \quad (2.78)$$

$$\rho \mathbf{u} \cdot \nabla \phi_i - \nabla \cdot \left(\frac{\lambda}{M c_p} \nabla x_i \right) = \frac{1}{M_i} \dot{r}_i, \quad i = 1, \dots, n_{\text{sp}}, \quad (2.79)$$

onde, \mathbf{u} denota o campo de velocidades (m/s), T a temperatura (K), $M = \sum_{i=1}^{n_{\text{sp}}} x_i M_i$ a massa molar média, (kg/mol), ρ a massa específica (kg/m³), μ o coeficiente da viscosidade (kg/(m · s)), p a pressão hidrodinâmica (Pa), ρ_0 a massa específica do ar a temperatura ambiente $T = 298$ K, $\mathbf{g} = (0, 0, -9.81)^T$ o vetor gravidade (m/s²), h a entalpia específica (J/kg), c_p a capacidade de calor total (J/(kg · K)), λ a condutividade térmica (J/(m · K · s)), \mathbf{q}^R é o fluxo de calor radiativo (J/(m² · s)), M_i a massa molar (kg/mol), \dot{r}_i a taxa de reação da i -ésima espécie (Kg/(m³ · s)), $\phi_i = w_i/M_i$ o número de mole específico da i -ésima espécie (mol/kg), w_i a fração de massa da i -ésima espécie e x_i a fração molar da i -ésima espécie. O modelo é fechado com a equação de estado

$$\rho = \frac{P_{th} M}{RT}, \quad (2.80)$$

e pela aproximação de baixo número de Mach

$$\mathcal{L}(\mathbf{u}, T, M) = \mathbf{u} \cdot \left(\frac{1}{M} \nabla M - \frac{1}{T} \nabla T \right), \quad (2.81)$$

Deve-se observar que a metodologia proposta neste trabalho não se restringe as hipóteses acima. Entretanto, elas são compatíveis com o modelo reduzido automaticamente pelo método *Reaction-Diffusion Manifold* (REDIM). Recentemente, a ferramenta REDIM foi estendida para transporte detalhado [61], o que pode ser incluído no modelo acima sem mudança nos conceitos. A perda de calor radiativa é dada pelo submodelo (2.41) discutido anteriormente.

Na sequência a cinética química é discutida em mais detalhe. Isso nos fornecerá as bases para discutir as ferramentas de redução de modelos para combustão.

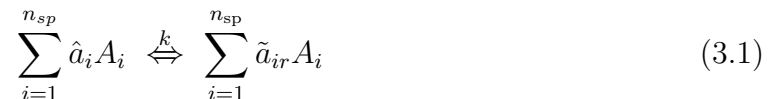
3 CINÉTICA DA COMBUSTÃO

Neste capítulo é apresentado uma pequena revisão sobre a clássica cinética da combustão (veja, por exemplo, [92, 56, 52] para uma discussão mais aprofundada sobre cinética da combustão). O objetivo é de coletar as informações necessárias para descrever os processos termoquímicos envolvidos em escoamentos reativos. Primeiro, a cinética das reações elementares é discutida. Então, mecanismos de combustão são definidos e suas aplicações na simulação da combustão é discutida.

3.1 Cinética da reação

A cinética de reações químicas é o estudo das taxas dos processos químicos. Portanto, aqui apresenta-se a notação básica e modelagem matemática básica do consumo/produção das espécies químicas devido aos processos reativos. A discussão começa pela apresentação das reações elementares e suas propriedades. Mais tarde, mecanismos (químicos) completos de combustão são introduzidos como uma coleção de reações elementares.

Como brevemente discutido no último capítulo, os processos são compostos por um número de reações reversíveis (ou, irreversíveis) que envolvem n_{sp} espécies químicas [92]. Cada uma destas reações podem ser representadas na forma geral



onde, A_i representa o símbolo químico da i -ésima espécie, \hat{a}_i e \tilde{a}_i seus coeficientes estequiométricos. O símbolo \Leftrightarrow indica que a reação ocorre tanto para frente (a esquerda os reagentes e a direita os produtos) como para trás (a direita os produtos e a esquerda os reagentes).

As reações químicas ocorrem em uma taxa definida que depende de diferentes variáveis como a concentração das espécies envolvidas, a temperatura e a pressão. Para uma dada reação, a taxa de reação é a medida quantitativa de sua evolução, ou melhor, número de moles das espécies produzidas (ou reagentes consumidos) por unidade de tempo e volume. A lei da taxa descreve uma forma empírica destas taxas de reação.

Para a equação química (3.1), a taxa molar de consumo/produção das espécies lê-se:

$$\frac{dc_i}{dt} = (\tilde{a}_i - \hat{a}_i) q \quad (3.2)$$

onde, c_i denota a concentração da i -ésima espécie e q a taxa total, definida por

$$q = k_f \prod_{i=1}^{n_{\text{sp}}} c_i^{\hat{a}_i} - k_b \prod_{j=1}^{n_{\text{sp}}} c_j^{\tilde{a}_j} \quad (3.3)$$

onde, k_f e k_b denotam os coeficientes da taxa de reação para frente e para trás, respectivamente.

Usualmente, somente os coeficientes das taxas das reações para frente são dadas na literatura [52, 92]. Os coeficientes das taxas para trás podem ser calculadas das anteriores pela definição das constantes de equilíbrio. Isto é motivado pelo fato que uma vez que o equilíbrio químico é estabelecido, i.e., $q = 0$, a seguinte relação é válida

$$\frac{k_f}{k_b} = \frac{\prod_{i=1}^{n_{\text{sp}}} c_i^{\tilde{a}_i}}{\prod_{i=1}^{n_{\text{sp}}} c_i^{\hat{a}_i}} =: K_c \quad (3.4)$$

onde K_c é chamada de constante de equilíbrio, a qual pode ser determinada pelas propriedades termodinâmicas [92].

3.1.1 Ordens da reação

Três tipos de reações elementares podem ser distinguidas: reação unimolecular, bimolecular e tri-molecular. Reações unimoleculares descrevem o rearranjo ou a dissociação de uma molécula (por exemplo, $\text{C}_2\text{H}_3 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_2 + \text{H}$), e a

taxa de reação é de primeira ordem. Isto significa que a taxa é linear com respeito a concentração da espécie reativa. Reações bi-moleculares ocorrem por colisão de duas espécies (ambas iguais ou diferentes). Estas são as mais encontradas (por exemplo, $\text{H}_2\text{O} + \text{O}_2 \rightarrow \text{HO}_2 + \text{OH}$) e elas têm taxas de reação de ordem 2. De forma similar, as reações tri-moleculares estão definidas (por exemplo, $\text{H} + \text{O}_2 + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{HO}_2 + \text{H}_2\text{O}$).

3.1.2 Reação elementar e global

Nos processos químicos, pode-se distinguir dois tipos principais de reações: reações elementares e reações globais.

Reações elementares são aquelas que ocorrem como o resultado de processos de colisão, assim como elas são escritas. Estas reações dependem das forças potenciais intermoleculares existindo no momento da colisão, dos estados quânticos das moléculas e da transferência de energia. Um exemplo de uma reação elementar é dado por



a qual é parte da base da oxidação de H_2 .

Reações globais são consequência de várias reações elementares (veja Tabela 3.1, para exemplos). Elas são normalmente aplicadas sob hipóteses bastante restritivas e não são geralmente válidas. Uma vez que são resultado de processos muito mais complexos, precisa-se de estudos experimentais e/ou modelos matemáticos para calcular suas ordens de reação. Assim, diferentemente das reações elementares, suas ordens de reação não são necessariamente condizentes com a molecularidade da reação (por exemplo, elas podem assumir mesmo valores negativos!). Isto pode ser entendido como uma primeira tentativa em simplificar a descrição da complexa cinética química (veja, Capítulo 4 para maiores detalhes sobre simplificação de mecanismos químicos).

Tabela 3.1: Exemplos de reações globais.

H ₂	+	0.5 O ₂	+	0.5 · 3.762 N ₂	→	H ₂ O	+	0.5 · 3.762 N ₂		
CH ₄	+	2.0 O ₂	+	2.0 · 3.762 N ₂	→	CO ₂	+	2.0 H ₂ O	+	2.0 · 3.762 N ₂
C ₃ H ₈	+	5.0 O ₂	+	5.0 · 3.762 N ₂	→	3.0 CO ₂	+	4.0 H ₂ O	+	5.0 · 3.762 N ₂

3.1.3 Coeficiente da taxa de reação

Os coeficientes das taxas das reações químicas dependem fortemente e de forma não-linear da temperatura. De acordo com Arrhenius (1889) esta dependência é dada pela forma empírica

$$k = A' e^{-\frac{E_a}{RT}} \quad (3.6)$$

a qual é chamada de lei de Arrhenius. Aqui, A' é chamado de fator pré-exponencial, E_a denota a energia de ativação, R a constante universal dos gases e T a temperatura. Medidas mais precisas mostram que o fator pré-exponencial também depende da temperatura para algumas reações, o que modifica a lei de Arrhenius para

$$k = AT^b e^{-\frac{E_a}{RT}} \quad (3.7)$$

onde, b é chamado o expoente da temperatura. É importante notar que geralmente A' depende fracamente da temperatura, com algumas exceções como, por exemplo, no caso da reação da dissociação de CH₃ (C₂H₃ → C₂H₂ + H).

As constantes de reação que envolvem a equação modificada de Arrhenius (3.7) são determinadas por experimentos, usualmente calculados para um intervalo finito de temperatura. A limitação da precisão dos dados experimentais motiva a aceitação comum da lei de Arrhenius [92].

Da teoria cinética, a energia de ativação é definida como a energia requerida para trazer os reagentes ao estado energético para o qual as ligações químicas podem se quebrar formando, assim, os produtos. Uma reação ocorre se diferentes moléculas de espécies químicas colidem com uma apropriada orientação e com velocidade suficiente. Do ponto de vista teórico rigoroso, os processos de colisão são

governados pela equação de Schrödinger da mecânica quântica, da qual a energia de ativação pode ser calculada. Entretanto, o cálculo através da equação de Schrödinger é extremamente difícil, o que força o emprego de procedimentos semi-empíricos para obter as constantes das taxas de reações.

Para algumas reações unimoleculares, os coeficientes das taxas dependem da pressão. Isto é uma indicação que estas reações não são de fato elementares, mas uma sequência de reações. O modelo de Lindemann estabelece que uma reação só é possível, se a energia das moléculas é suficiente para quebrar a ligação. Portanto, é necessário que antes da reação, energia seja adicionada as moléculas através da colisão com outras moléculas M (terceiro corpo ou parceiros de colisão). Então, as moléculas excitadas (moléculas com suficiente energia) podem se decompor em produtos, ou elas podem se desativar através da colisão. Portanto, dois extremos podem ser distinguidos, i.e., reação em baixa pressão e em alta pressão. Em baixa pressão a concentração do terceiro corpo M é muito pequena, o que implica em baixa ativação. Por outro lado, em alta pressão, a concentração do terceiro corpo é muito alta e a ativação é rápida. Isto motiva a fórmula de Lindemann:

$$k = \frac{k_{\text{inf}}}{1 + k_{\text{inf}}/(k_o c_M)} \quad (3.8)$$

onde, k_{inf} e k_o são os coeficientes da taxa a alta e baixa pressões, respectivamente. A concentração do terceiro corpo c_M é dada por

$$c_M = \sum_{i=1}^{n_{sp}} \alpha_i c_i \quad (3.9)$$

onde, α_i é chamada de eficiência da i -ésima espécie, a qual pode ser diferente em cada reação. Um exemplo de tal reação é a dissociação de CO_2 , dada por



a qual, para o mecanismo GRI-3.0 [83], tem $\alpha_{\text{H}_2} = 2.00$, $\alpha_{\text{O}_2} = 6.00$, $\alpha_{\text{H}_2\text{O}} = 6.00$, $\alpha_{\text{CH}_4} = 2.00$, $\alpha_{\text{CO}} = 1.50$, $\alpha_{\text{CO}_2} = 3.50$, $\alpha_{\text{C}_2\text{H}_6} = 3.00$, e $\alpha_{\text{AR}} = 0.50$.

Um tratamento mais refinado dos efeitos da pressão é obtido usando os parâmetros TROE. Neste caso, a fórmula de Lindemann é multiplicada por um fator de alargamento F , o qual é computado conforme

$$\log F = \frac{\log F_{\text{cent}}}{1 + \left[\frac{\log P_r + C}{N - 0.14(\log P_r + C)} \right]^2} \quad (3.11)$$

com $N = 0.75 - 1.27 \log F_{\text{cent}}$, e $C = -0.4 - 0.67 \log F_{\text{cent}}$. Aqui, P_r é a pressão reduzida, dada por

$$P_r = \frac{k_o c_M}{k_{\text{inf}}} \quad (3.12)$$

O parâmetro *falloff* F_{cent} é dado por

$$F_{\text{cent}} = (1 - a)e^{-\frac{T}{b}} + ae^{-\frac{T}{c}} + e^{-\frac{d}{T}}. \quad (3.13)$$

É importante notar que para um sistema a pressão constante sempre pode-se aproximar o coeficiente da taxa pela lei de Arrhenius sem muita perda de precisão. Por ser mais simples, a lei de Arrhenius é preferida para estudos teóricos.

3.2 Mecanismos de combustão

Até o momento, discutiu-se apenas reações elementares. A única tentativa de descrever reações mais complexas foi através de reações globais, as quais representam uma enorme simplificação do processo geral. Nos processos de combustão, a oxidação de um dado combustível envolve várias reações elementares, as quais são chamadas de reações em cadeia. Estas são uma série de reações elementares consecutivas, competitivas e opostas. Elas descrevem o caminho pelo qual o combustível é oxidado. O conjunto completo de reações elementares com suas respectivas constantes das taxas das reações é chamado de mecanismo da combustão ou, mais geralmente, mecanismo de reação químico.

3.2.1 Reações em cadeia

Quando várias reações estão envolvidas em um processo reativo, a contribuição de cada uma é somada para calcular a taxa molar de consumo/produção de cada espécie, i.e.

$$\dot{r}_i = \sum_{j=1}^{n_r} (\tilde{a}_{ij} - \hat{a}_{ij}) \left[k_{fj} \prod_{k=1}^{n_{sp}} c_k^{\hat{a}_{kj}} - k_{bj} \prod_{k=1}^{n_{sp}} c_k^{\tilde{a}_{kj}} \right] \quad (3.14)$$

onde, \hat{a}_{ij} e \tilde{a}_{ij} são os coeficientes estequiométricos da i -ésima espécie na reação j .

Pode-se notar, que a fórmula (3.14) somente é válida para mecanismos químicos baseados em reações elementares. Quando, reações globais são consideradas, os coeficientes estequiométricos não necessariamente concordam com as ordens das reações [76].

Entre as diferentes reações que ocorrem em um processo de combustão, quatro tipos podem ser identificados: reação de inicialização (initiating reaction), de progresso em cadeia (*chain propagating*), de ramificação em cadeia (*chain branching*) e de término (*terminating reactions*).

Reação de inicialização são aquelas responsáveis pela ignição da cadeia de reações. Espécies estáveis (por exemplo, O_2) reagem formando radicais (por exemplo, O), os quais são moléculas altamente reativas com elétrons desemparelhados. Um exemplo ilustrativo na combustão metano/ar é o ataque do oxigênio as moléculas de metano formando metil (CH_3) e hidroperóxido (HO_2):



Reação de ramificação em cadeia são aquelas que causam a quebra de espécies estáveis por radicais, implicando no aumento do número de radicais. Estas reações são as fontes mais importantes de radicais, os quais participam das reações mais importantes do mecanismos de reação. Um exemplo é dado por



Reações de propagação em cadeia também são responsáveis pela quebra de espécies estáveis por radicais, mas não implicam num aumento do número de radicais. Como resultado, outras espécies estáveis ou espécies quimicamente excitadas são formadas, por exemplo



Finalmente, o processo de oxidação termina por causa das chamadas reação de término em cadeia ou reação de quebra em cadeia (*chain breaking reactions*). Nestas, radicais reagem para formar produtos estáveis ou reagem com as paredes do meio através de colisões moleculares. Um exemplo típico é a reação elementar

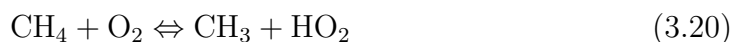


Considere a seguinte nomenclatura: S para espécies estáveis, R para espécies radicais e S* para espécies excitadas. Assim, a combustão de hidrocarbonetos pode ser resumida como segue [52]:

- inicialização: $\text{S} \rightarrow \text{R}$
- ramificação: $\text{S} + \text{R} \rightarrow \alpha\text{R} + \text{S}^*$, com $\alpha > 1$
- propagação: $\text{S} + \text{R} \rightarrow \text{S} + \text{S}^*$
- término: $\text{S} + \text{R} \rightarrow \text{S}$

3.2.2 O processo de oxidação do metano

Anteriormente, viu-se que a combustão de hidrocarbonetos segue um caminho geral de reações. A oxidação do metano é um exemplo prático. Ela começa quando a ligação do carbono no metano é quebrada para formar radicais, principalmente pelas reações de inicialização:



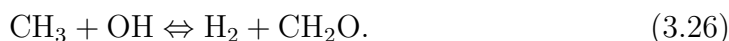
Uma vez que os radicais de hidrocarbonetos são produzidos, eles rapidamente reagem com o oxigênio por meio das reações de quebra em cadeia, cujas mais importantes são:



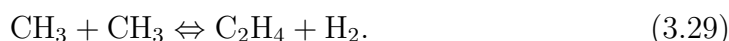
formando radicais como o CH_3O , CH_2O , OH e O . Simultaneamente, outras reações importantes de quebra ocorrem como, por exemplo:



As reações acima aumentam o número de radicais, os quais são responsáveis pelas reações de propagação:



Neste momento, várias reações rápidas de propagação ocorrem, formando e consumindo CH_3O , CH_2O e HCO . Após estas, HCO dissocia formando CO . Ainda mais, quantidades significativas de grandes hidrocarbonetos contendo 2 ou mais átomos de carbono são produzidos durante a oxidação do metano. Exemplos importantes de reações de recombinação são:



Outro grupo importante de reações envolve como reagente O_2 e tem como produto H_2 e radicais intermediários, como H , OH e O . As mais importantes

reações deste grupo são:



A oxidação do metano acaba com a oxidação de CO, comum a combustíveis orgânicos. As reações de término mais importantes para a mistura metano/ar são:



Outras reações de término menos importantes são:



3.2.3 Mecanismos de reações completos

O conjunto completo de reações que compõe o processo de combustão forma o chamado mecanismo de reações completo ou, simplesmente, mecanismo completo. Estes mecanismos são caracterizados por um grande número de espécies químicas envolvidas em um grande número de reações elementares. Mais importante, eles são considerados independentes do problema, i.e., são válidos para a combustão em diferentes pressões, temperatura inicial, entre outras condições.

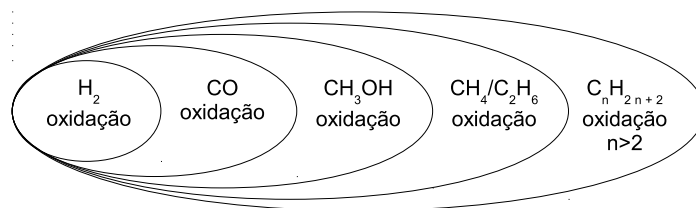


Figura 3.1: Estrutura hierárquica dos mecanismos de combustão de hidrocarbonetos alifáticos. Gráfico baseado na figura 8.8 em [92].

Mecanismos completos são independentes dos problemas, mas dependem de um combustível e oxidante específicos. Mecanismos para a oxidação de hidrocarbonetos apresentam uma importante hierarquia estrutural (veja a Figura 3.1). Todos eles têm como base os mecanismos da oxidação de H_2 e de CO . A quantidade de reações elementares aumenta conforme o número de átomos de carbonos que formam o combustível.

Um exemplo de um mecanismo completo para a combustão de metano/ar é o mecanismo GRI-Mech [83]. Sua última versão (GRI-Mech 3.0) envolve 53 espécies químicas e 325 reações elementares. Neste, as reações envolvendo carbono estão presentes em detalhe, levando em conta até hidrocarbonetos com C_2 e C_3 . Mais ainda, o mecanismo considera a formação de espécies contaminantes (como, por exemplo, NO), as quais são especialmente interessantes em questões ambientais (veja [83], para acessar o mecanismo e obter mais informações sobre ele).

A enorme complexidade dos mecanismos de combustão completos os tornam proibitivos em simulações numéricas de processos de combustão de interesse industrial. Para entender melhor a problemática, observe que com o emprego da modelagem apresentada no Capítulo 2 cada espécie química presente no mecanismo está unicamente associada a uma equação diferencial parcial não-linear. Ainda, o sistema de equações resultante é fortemente acoplado através dos termos fontes reativos e dos coeficientes de transporte. Por exemplo, a modelagem matemática rigorosa da combustão de metano/ar em três dimensões usando o GRI-Mech 3.0

requer a solução de um sistema altamente complexo com pelo menos $53 + 5 = 58$ equações. Portanto, técnicas de redução de mecanismos químicos devem ser consideradas.

4 MODELOS REDUZIDOS PARA COMBUSTÃO

Neste capítulo, discute-se algumas técnicas de simplificação/redução de mecanismos de reação comumente usadas. Com base nas vantagens e desvantagens de cada estratégia, motiva-se a apresentação do método *Reaction-Diffusion Manifold*, feito no próximo capítulo.

4.1 Mecanismos esqueléticos

Normalmente, o primeiro passo realizado para reduzir um mecanismo químico é analisar, por meio de uma análise de sensibilidade, a importância relativa de cada reação elementar sobre o conjunto completo de reações elementares. Esta análise envolve o estudo de uma coleção de experimentos e simulações numéricas detalhadas para um dado problema. Como resultado, algumas reações elementares são retiradas ou combinadas para formular o mecanismo reduzido, chamado de mecanismo esquelético (*skeletal mechanism*).

As maiores desvantagens destes mecanismos reduzidos é o fato deles serem dependentes do problema (dependem da razão de equivalência, da pressão, etc.) e de requererem um conhecimento especializado para sua construção. Por exemplo, a oxidação do metano para misturas pobres pode ser bem aproximada por mecanismos esqueléticos que consideram apenas o grupo de reações dos hidrocarbonetos C . Entretanto, experimentos confirmam que a cadeia de reação C_2 , bem como de hidrocarbonetos maiores, têm grande importância em misturas ricas.

4.2 Fração de mistura e a hipótese de química rápida

A hipótese de química rápida é talvez a mais forte suposição na modelagem em combustão. A ideia é assumir que o combustível e o oxidante reagem em uma escala de tempo muito menor que a escala de tempo dos outros processos físicos. Assim, eles nunca se encontram em uma mesma região do espaço termoquímico. Isso implica em um modelo algébrico muito simples para o processo global de combustão em chamas difusivas, a chamada aproximação de Burke-Schumann.

Para apresentar o modelo, precisa-se, primeiro, definir um escalar conservado, neste caso, define-se a fração de mistura.

4.2.1 Fração de mistura

A fração de mistura Z é um escalar conservado, i.e. ele não varia devido as reações químicas. Para definir Z assume-se um processo de combustão estequiométrico de escoamentos de dois reagentes (o escoamento do combustível, indicado por 1 e com taxa de fluxo de massa \dot{m}_1 e, o escoamento do oxidante, indicado por 2 e com taxa de fluxo de massa \dot{m}_2). A fração de massa é, então, definida por

$$Z := \frac{\dot{m}_1}{\dot{m}_1 + \dot{m}_2}, \quad (4.1)$$

e, portanto, $Z = 1$ na injeção de combustível e $Z = 0$ na injeção oxidante.

A fração de mistura pode ser dada em função das frações de massa do combustível e do oxidante. Para ver isso, considere a reação global generalizada



onde, ν'_F , ν'_O e ν''_P denotam os coeficientes estequiométricos de reação, com F , O e P representando o combustível, o oxidante e o produto. Na ausência da difusão, esta equação global garante que as variações da fração de massa do combustível dw_F e

do oxidante dw_O satisfazem:

$$\frac{dw_O}{\nu'_O M_O} = \frac{dw_F}{\nu'_F M_F}. \quad (4.3)$$

Para um sistema espacialmente homogêneo, como também, para sistema com difusividades iguais, a equação acima pode ser integrada do estado não queimado para o estado de queima, o que fornece

$$\nu w_F - w_O = \nu w_{F,u} - w_{O,u} \quad (4.4)$$

onde, ν é a razão combustível/oxidante estequiométrica

$$\nu = \frac{\nu'_O M_O}{\nu'_F M_F}, \quad (4.5)$$

e o subscrito u denota a mistura inicial não-queimada.

Uma mistura é chamada estequiométrica se a razão combustível/oxidante é tal que ambos combustível e oxidante são completamente consumidos após a combustão, i.e., eles são transformados em produtos. Uma mistura estequiométrica requer que a razão da fração molar x_i combustível/oxidante seja igual a razão dos coeficientes estequiométricos, i.e.:

$$\left. \frac{x_{O,u}}{x_{F,u}} \right|_{st} = \frac{\nu'_O}{\nu'_F}, \quad \text{ou, equivalentemente,} \quad \left. \frac{w_{O,u}}{w_{F,u}} \right|_{st} = \frac{\nu'_O M_O}{\nu'_F M_F} = \nu. \quad (4.6)$$

Agora, pela definição da fração de mistura, a fração de massa $w_{F,u}$ é relacionada a Z por

$$w_{F,u} = w_{F,1} Z, \quad (4.7)$$

onde $w_{F,1}$ denota a fração de massa do combustível na injeção do combustível. Analogamente,

$$w_{O,u} = w_{O,2}(1 - Z), \quad (4.8)$$

onde, $w_{O,2}$ representa a fração de massa do oxidante na injeção do oxidante.

Tabela 4.1: Valores típicos de ϕ e Z_{st} para combustíveis comumente usados. AR denota a mistura $0.21\%O_2 + 0.79\%N_2$.

Combustível	Oxidante	$w_{F,u}$	$w_{O,u}$	ν_F	ν_O	ν	ϕ	Z_{st}
H_2	O_2	1,0	1,00	1,0	0,5	8,00	8,00	0,111
H_2	AR	1,0	0,23	1,0	0,5	8,00	34,8	0,028
CH_4	O_2	1,0	1,00	1,0	2,0	4,00	4,00	0,200
CH_4	AR	1,0	0,23	1,0	2,0	4,00	17,4	0,054
C_3H_8	O_2	1,0	1,00	1,0	5,0	3,64	3,64	0,216
C_3H_8	AR	1,0	0,23	1,0	5,0	3,64	15,8	0,059
C_2H_4	O_2	1,0	1,00	1,0	3,0	3,43	3,43	0,226
C_2H_4	AR	1,0	0,23	1,0	3,0	3,43	14,9	0,063
C_2H_2	O_2	1,0	1,00	1,0	2,5	3,08	3,08	0,245
C_2H_2	AR	1,0	0,23	1,0	3,0	3,43	14,9	0,070

Das equações (4.4), (4.7) e (4.8), tem-se que a fração de mistura pode ser escrita como:

$$Z = \frac{\nu w_F - w_O + w_{O,2}}{\nu w_{F,1} + w_{O,2}}. \quad (4.9)$$

Para uma mistura estequiométrica, $\nu w_F - w_O = 0$, obtém-se a definição da fração de mistura estequiométrica:

$$Z_{st} = \left[1 + \frac{\nu w_{F,1}}{w_{O,2}} \right]^{-1} = \frac{1}{1 + \phi}, \quad (4.10)$$

onde, $\phi = \nu w_{F,u}/w_{O,u}$ é chamado de razão de equivalência. Valores típicos de ϕ e Z_{st} são encontrados na Tabela 4.1.

4.2.2 Solução de Burke-Schumann

A hipótese de química rápida permite que a concentração de espécies e energia sejam escritas como funções lineares por partes da fração de mistura. Assumindo a equação global (4.2) e utilizando as definições (4.9)-(4.10), pode-se derivar as seguintes relações:

$$\begin{cases} w_F(Z) = w_{F,1} \frac{Z - Z_{st}}{1 - Z_{st}} \\ w_o(Z) = 0 \end{cases}, \quad \text{for } Z > Z_{st} \quad (4.11)$$

e

$$\begin{cases} w_F(Z) = 0 \\ w_O(Z) = w_{O,2} \frac{Z_{st} - Z}{Z_{st}} \end{cases}, \quad \text{for } Z \leq Z_{st}. \quad (4.12)$$

Portanto, sobre as hipóteses de química rápida, difusividades iguais e capacidades de calor iguais, pode-se ver que as concentrações das espécies são funções lineares por partes da fração de mistura. Mais ainda, negligenciando os efeitos de Soret, Dufour e os efeitos radiativos, pode-se ver que a temperatura, bem como a entalpia, também é função linear por partes da fração de mistura. A temperatura é dada por

$$T(Z) = \begin{cases} T_u(Z) + \frac{Q w_{O,2}}{c_p \nu'_O M_O} (1 - Z) & , \quad Z > Z_{st} \\ T_u(Z) + \frac{Q w_{F,1}}{c_p \nu'_F M_F} Z & , \quad Z \leq Z_{st} \end{cases} \quad (4.13)$$

onde Q é o coeficiente de liberação de calor e $T_u(Z) = T_2 + Z(T_1 - T_2)$, com os subscritos denotando o combustível e o oxidante como anteriormente.

Para o produto, relações lineares semelhantes são obtidas:

$$\frac{dw_P}{\nu''_P M_P} = -\frac{dw_F}{\nu'_F M_F} = -\frac{dw_O}{\nu'_O M_O}, \quad (4.14)$$

as quais implicam

$$w_P(Z) = \begin{cases} \frac{\nu''_P M_P}{\nu'_F M_F} (w_{F,1} Z - w_F(Z)) & , \quad Z > Z_{st} \\ \frac{\nu''_P M_P}{\nu'_O M_O} [w_{O,2} (1 - Z) - w_O(Z)] & , \quad Z \leq Z_{st} \end{cases}. \quad (4.15)$$

A Figura 4.1 mostra um exemplo ilustrativo da solução de Burke-Schumann para uma chama de metano diluído em nitrogênio (35%N₂ + 65%CH₄) e ar. A solução é baseada na clássica equação química global para a combustão de metano/ar (veja a Tabela 3.1). A figura mostra que não existe sobra de oxidante na região rica da chama ($Z > Z_{st} \approx 0.055$) quando consideramos o modelo de Burke-Schumann, entretanto a sobra de oxidante é uma conhecida característica desta chama em condições atmosféricas.

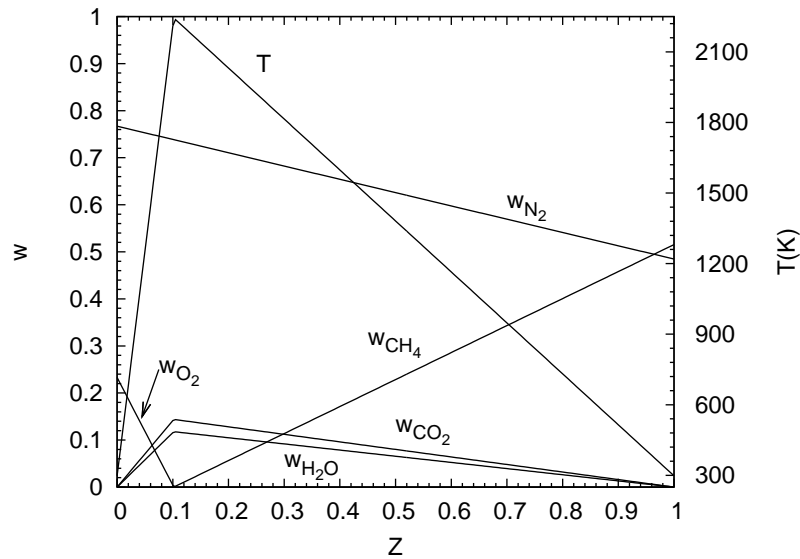


Figura 4.1: Exemplo ilustrativo da solução de Burke-Schumann para uma chama de escoamento oposto (*counterflow flame*) de metano diluído em nitrogênio com ar. Espécies estão em fração de massa e a temperatura em Kelvin.

Agora, da discussão acima, vê-se que supondo química rápida o estado químico pode ser determinado em qualquer região se a fração de mistura é conhecida. Assim, é necessário modelar a fração de mistura.

4.2.3 A equação da fração de mistura e o modelo *Flame Sheet*

A equação da fração de mistura pode ser derivada da definição (4.9) e das equações governantes do combustível e do oxidante. Novamente, as fortes hipóteses de difusividades iguais e a equação global devem ser assumidas. A equação segue:

$$\rho \frac{\partial Z}{\partial t} + \rho \mathbf{u} \cdot \nabla Z - \nabla \cdot (\rho D \nabla Z) = 0. \quad (4.16)$$

A Equação (4.16) é uma equação convectiva-difusiva sem termo fonte, pois a fração de mistura é um escalar conservado, i.e. não varia devido a reação química.

A solução de Burke-Schumann é um modelo simplificado para o processo de combustão. Também chamado de modelo *Flame Sheet*, ele permite que o escoamento reativo possa ser descrito pelo seguinte conjunto de equações governantes para baixo número de *Mach*:

$$\nabla \cdot \mathbf{u} + \mathcal{L}(\mathbf{u}, T, M) = 0, \quad (4.17)$$

$$\rho \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} - \nabla \cdot \mu \nabla \mathbf{u} + \nabla p = (\rho - \rho_0) \mathbf{g}, \quad (4.18)$$

$$\rho \mathbf{u} \cdot \nabla Z - \nabla \cdot \left(\frac{\lambda}{c_p} \nabla Z \right) = 0, \quad (4.19)$$

assumindo, $Le = 1$. Aqui, as equações (4.17) e (4.18) seguem o modelo apresentado no final do Capítulo 2.

Pela hipótese de química rápida, todas as propriedades termoquímicas são funções de um escalar conservado (aqui, a fração de mistura). Independentemente da chama laminar difusiva axisimétrica, as equações (4.17)-(4.19) formam um sistema de 4 dimensões, ao invés de $3 + n_{sp}$ na formulação original (veja o Capítulo 2). Ou seja, é assumido que todos os processos termoquímicos variam dentro de uma variedade unidimensional (chamado de espaço da fração de mistura) parametrizado pela fração de mistura.

As maiores desvantagens do modelo *Flame Sheet* são decorrência da hipótese de química rápida e da intrínseca negligência do fenômeno de transporte em construir a variedade unidimensional. Uma extensão deste conceito é dado pelo modelo flamelet.

4.3 Modelo flamelet

Aqui, é brevemente discutido o modelo flamelet para combustão não pré-misturada. A ideia é de motivar a aplicação da técnica *Reaction-Diffusion Manifold*, não de fazer um resumo sobre a teoria flamelet (veja, por exemplo, [74] para uma discussão aprofundada). Para investigações do conceito flamelet em combustão

turbulenta o leitor é recomendado aos trabalhos [26, 47, 66]. Para chamas laminares recomenda-se os trabalhos [25, 32, 34].

Assumindo uma chama laminar difusiva sobre as hipóteses usuais, vimos que a fração de mistura é governada pela Equação (4.16). A ideia do modelo flamelet vem da observação de que na vizinhança da frente da chama, definido pela superfície da mistura estequiométrica ($Z(x, t) = Z_{st}$), vale o seguinte sistema de equações:

$$\rho \frac{\partial w_i}{\partial t} = \frac{\rho}{Le_i} \frac{\chi}{2} \frac{\partial^2 w_i}{\partial Z^2} + \omega_i. \quad (4.20)$$

Nestas equações a taxa de dissipação escalar instantânea é definida por:

$$\chi = 2D |\nabla Z|^2, \quad (4.21)$$

a qual toma o valor χ_{st} para Z_{st} , e age como um parâmetro externo que é imposto a estrutura flamelet pelo campo da fração de mistura.

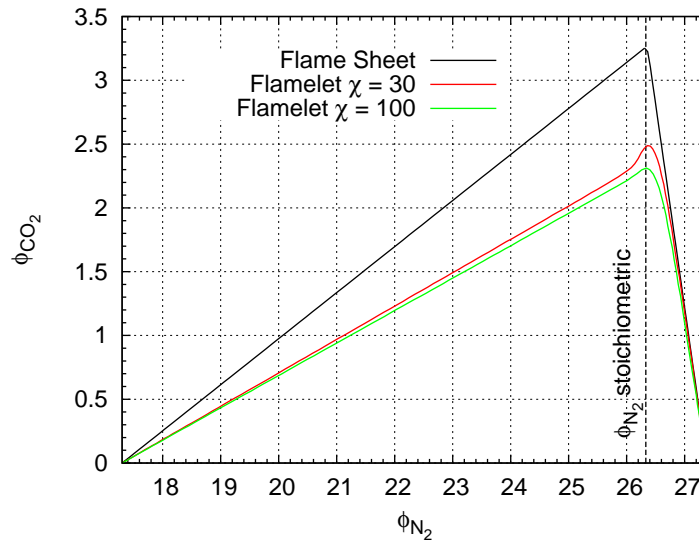


Figura 4.2: Exemplo ilustrativo comparando a solução *Flame Sheet* (linha preta) com soluções flamelet (linha verde $\chi \approx 10$, linha vermelha $\chi \approx 30$) para uma chama oposta de metano diluído em nitrogênio com ar. As soluções estão projetadas no plano $\phi_{N_2} \times \phi_{CO_2}$.

O modelo flamelet supera as desvantagens do modelo *Flame Sheet*. Primeiro, o modelo não assume qualquer hipótese sobre as taxas de reações permitindo

a utilização de mecanismos químicos completos, como também qualquer mecanismo simplificado. Segundo, não negligencia os processos de transporte na geração do espaço fração de mistura. Esse é exatamente o papel da taxa de dissipação escalar, a qual pode ser vista como uma difusividade do espaço fração de mistura.

A Figura 4.2 mostra um exemplo ilustrativo que compara a solução por *Flame Sheet* com soluções por flamelet (com taxas de dissipação constantes) para uma chama oposta de metano diluído em nitrogênio e ar. A figura mostra claramente os efeitos de transporte: a solução tende a linha de mistura quando a taxa de dissipação cresce.

Para uma dada solução estacionária (ou para um dado tempo t), as equações flamelet também definem uma variedade unidimensional no espaço de estados termodinâmico, a qual é parametrizada pela fração de mistura. Isso significa que todas as propriedades termoquímicas são funções apenas da fração de mistura. Esta é a maior desvantagem do modelo flamelet, pois isto implica que os escalares reativos são constantes ao longo das iso-superfícies da fração de mistura. Entretanto, para chamas ancoradas (*lifted flames*) e chamas triplas (*triple flames*) isso não ocorre, pois essas apresentam misturas de combustão em ignição e misturas de combustão extinguidas com valores de fração de mistura iguais. Nestes casos, várias modificações do modelo flamelet são propostas (veja, por exemplo, [26, 66]), as quais envolvem futuras hipóteses sobre a modelagem [74]).

Assim sendo, o modelo flamelet não é suficiente para descrever processos de combustão em geral. É necessário uma extensão na dimensão da variedade reduzida, afim de aumentar a informação química (veja [69] para um recente trabalho sobre a modelagem flamelet multidimensional). Outras propriedades desejadas de técnicas de redução de modelos são a automatização do procedimento (diminuindo a necessidade de um conhecimento especializado) e a generalização do procedimento (independência sobre o problema estudado). Neste sentido, o método *Intrinsic Low-*

Dimensional Manifold (ILDm) atende a essas demandas. Antes de discutirmos sobre o ILDM, apresenta-se alguns conceitos e notações básicos.

4.4 Representação da cinética química

A técnica ILDM foi, primeiramente, desenvolvida para sistemas isobáricos adiabáticos (veja, [62] para o trabalho pioneiro). Neste caso, o escoamento reativo é descrito pelo seguinte sistema $(2+n_{sp})$ -dimensional de equações diferenciais ordinárias:

$$\frac{\partial h}{\partial t} = 0, \quad (4.22)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = 0, \quad (4.23)$$

$$\frac{\partial \phi_i}{\partial t} = f_i \quad (4.24)$$

onde, h é a entalpia, p é a pressão, $\phi_i = w_i/M_i$ é o número molar específico da i -ésima espécie, w_i é a fração de massa da i -ésima espécie, M_i é a massa molar da i -ésima espécie e f_i é a fonte reativa específica (2.25).

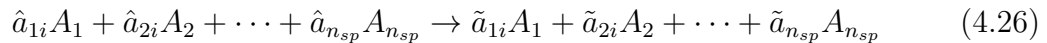
A cada tempo t o sistema homogêneo é determinado somente pelas variáveis de estado: entalpia h , pressão p e n_{sp} escalares reativos. Assim, o estado do sistema pode ser representado por um ponto no espaço de estados $(2+n_{sp})$ -dimensional Σ . Em um intervalo de tempo, a solução do sistema (4.22)-(4.24) descreve uma trajetória neste espaço. Por causa da hipótese de um sistema isobárico e adiabático, é suficiente considerar apenas o espaço de composição n_{sp} -dimensional Φ . Agora, Φ é um espaço vetorial, onde em cada tempo t a composição $\boldsymbol{\phi}(t)$ é um vetor deste espaço, o qual tem a base natural $\boldsymbol{\phi} = (\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_{n_{sp}})^T$.

Pela lei de conservação dos elementos (elementos não são produzidos nem consumidos por reações químicas), os números de moles dos n_e elementos ($\chi_i = z_i/M_i$, onde z_i é a fração de massa da elemento i) são constantes. Seja, então, μ_{ji} o número de átomos do i -ésimo elemento na j -ésima espécie. Assim, a composição

do i -ésimo elemento pode ser denotado pelo vetor $\boldsymbol{\mu}_i = (\mu_{1i}, \mu_{2i}, \dots, \mu_{n_{sp}i})$, o que implica

$$\chi_i = \sum_{k=1}^{n_{sp}} \mu_{ki} \phi_k = \boldsymbol{\mu}_i^T \boldsymbol{\phi}. \quad (4.25)$$

Similarmente, o vetor reação $\boldsymbol{\nu}_i$ é definido para cada reação química elementar i . Se A_k denota a k -ésima espécie, então a i -ésima reação pode ser denotada por



onde, \hat{a}_{ki} e \tilde{a}_{ki} são números inteiros que definem a reação. Os coeficientes estequiométricos $\nu_{ki} = \tilde{a}_{ki} - \hat{a}_{ki}$ são os componentes do vetor reação

$$\boldsymbol{\nu}_i = (\nu_{1i}, \nu_{2i}, \dots, \nu_{n_{sp}i}). \quad (4.27)$$

Da lei de conservação dos elementos, segue

$$\sum_{k=1}^{n_{sp}} \nu_{ki} \mu_{ki} = 0, \quad \text{ou, equivalentemente,} \quad \boldsymbol{\nu}_i \boldsymbol{\mu}_j = 0 \quad (4.28)$$

para todo i e j . Em outras palavras, os vetores dos elementos são ortogonais aos vetores das reações.

O subespaço \mathbf{R} é definido pelo espaço gerado pelos vetores reação $\boldsymbol{\nu}_i$. É um espaço $(n_r = n_{sp} - n_e)$ -dimensional na falta de espécies inertes na mistura. Se existirem espécies inertes, elas podem ser consideradas como elementos adicionais, com seus respectivos componentes do vetor elemento e números de moles específicos contantes. Daí, segue que os n_e vetores elemento $\boldsymbol{\mu}_i$ são linearmente independentes aos n_r vetores reação e, assim, geram o espaço composição Φ . Portanto, pode-se selecionar n_e vetores elemento linearmente independentes e n_r vetores reação linearmente independentes para formar uma base alternativa de Φ .

Finalmente, observa-se que nem todos os vetores $(2 + n_{sp})$ -dimensionais correspondem a uma composição física. Um dado vetor composição ϕ precisa satisfazer as restrições:

$$T(h, p, \phi) > 0, \quad (4.29)$$

$$p > 0, \quad (4.30)$$

$$0 \leq M_i \phi_i \leq 1, \quad (4.31)$$

$$\sum_{i=1}^{n_{sp}} w_i = \sum_{i=1}^{n_{sp}} M_i \phi_i = \sum_{i=1}^{n_{sp}} \bar{M} \chi_i = 1. \quad (4.32)$$

A última restringe o espaço composição Φ a um espaço $(n_{sp} - 1)$ -dimensional.

No estado composição Φ alguns vetores têm significado especial: um movimento na direção do vetor reação ν_i corresponde a uma reação química e um movimento na direção do vetor elemento μ_i corresponde a uma variação na composição do elemento (o que não é possível através de reações químicas). Portanto, para uma dada composição de elementos, o processo de reação global é restrito ao espaço \mathbf{R} ($n_r = n_{sp} - n_e$)-dimensional.

O espaço composição pode ser descrito em qualquer base apropriada de Φ . Por exemplo, dada uma base formada por n_{sp} vetores linearmente independentes a mudança de base é dada por:

$$\mathbf{B}\mathbf{s} = \phi, \quad (4.33)$$

onde, \mathbf{s} são novas variáveis e \mathbf{B} é a matriz transformação, a qual pode ser escrita como segue

$$\mathbf{B} = \begin{pmatrix} | & | & & | \\ \mathbf{b}_1 & \mathbf{b}_2 & \dots & \mathbf{b}_{n_{sp}} \\ | & | & & | \end{pmatrix}, \quad (4.34)$$

e sua inversa \mathbf{B}^{-1} por

$$\mathbf{B}^{-1} = \begin{pmatrix} - & \tilde{\mathbf{b}}_1 & - \\ - & \tilde{\mathbf{b}}_1 & - \\ & \vdots & \\ - & \tilde{\mathbf{b}}_{n_{sp}} & - \end{pmatrix}. \quad (4.35)$$

Assim, o sistema governante (4.22)-(4.24) é transformado da seguinte forma

$$\frac{\partial \mathbf{s}}{\partial t} = \mathbf{B}^{-1} \mathbf{F}(\mathbf{s}, h, p). \quad (4.36)$$

A base formada pelos vetores elemento e vetores reação linearmente independentes é especialmente interessante para nossa discussão. Neste caso, a matriz \mathbf{B} é dada por

$$\mathbf{B} = \begin{pmatrix} | & & | & | & & | \\ \boldsymbol{\mu}_1 & \dots & \boldsymbol{\mu}_{n_e} & \boldsymbol{\nu}_1 & \dots & \boldsymbol{\nu}_{n_r} \\ | & & | & | & & | \end{pmatrix}, \quad (4.37)$$

e o sistema transformado é dado por

$$\frac{\partial \mathbf{s}}{\partial t} = \mathbf{B}^{-1} \mathbf{F}(h, p, \mathbf{s}) = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \tilde{f}_1(h, p, \mathbf{s}) \\ \vdots \\ \tilde{f}_{n_r}(h, p, \mathbf{s}) \end{pmatrix}. \quad (4.38)$$

Escrevendo

$$\begin{pmatrix} s_1 \\ \vdots \\ s_{n_e} \\ s_{n_{e+1}} \\ \vdots \\ s_{n_{sp}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \xi_1 \\ \vdots \\ \xi_{n_e} \\ r_1 \\ \vdots \\ r_{n_r} \end{pmatrix}, \quad (4.39)$$

onde, os primeiros n_e componentes ξ_i são coordenadas no subespaço \mathbf{E} (gerado pelos vetores elemento), enquanto as outras n_r componentes r_i são coordenadas no subespaço R . Então, o sistema de equações transformado (4.38) pode ser separado como segue:

$$\frac{\partial \boldsymbol{\xi}}{\partial t} = 0 \quad (4.40)$$

$$\frac{\partial \mathbf{r}}{\partial t} = \tilde{\mathbf{F}}(h, p, \mathbf{s}). \quad (4.41)$$

Isto significa que nesta base as variáveis são automaticamente separadas em conservadas e reativas. A separação do sistema de equações (4.40)-(4.41) consiste de n_e equações algébricas que confinam as variáveis no espaço reação \mathbf{R} e n_r equações diferenciais, as quais descrevem os movimentos neste espaço devido a reações químicas.

Na sequência as hipóteses de equilíbrio parcial e estado quase-estacionário são introduzidas.

4.5 A hipótese de equilíbrio parcial

A hipótese de equilíbrio parcial aplica-se a um dado conjunto de reações, o qual é assumido em equilíbrio, i.e. iguais taxas de reação para frente e para trás são assumidas [76]. Por simplicidade, se equilíbrio parcial é assumido para a primeira

reação elementar temos, pela notação da última seção:

$$\tilde{f}_1(h, p, \mathbf{s}) = \tilde{b}_{n_e+1} \mathbf{F} = 0. \quad (4.42)$$

No espaço de estados Φ , a equação algébrica (4.42) juntamente com as equações (4.40) definem uma variedade \mathbf{P}_1 ($n_{sp} - n_e - 1$)-dimensional. De forma mais geral, se n_P reações são assumidas em equilíbrio parcial ($n_P \leq n_r$), então elas fornecem um sistema de n_P equações algébricas como (4.42), as quais em conjunto com as equações (4.40) definem uma variedade \mathbf{P}_{n_P} de ($n_{sp} - n_e - n_P$)-dimensões do espaço de estados Φ .

Portanto, assumindo equilíbrio parcial para n_P reações, o número de variáveis governadas por equações diferenciais é reduzido a ($n_{sp} - n_e - n_P$). As outras ($n_e + n_P$) variáveis são dadas como solução de um sistema de equações algébricas.

Como exemplo prático, a análise de experimentos e simulações mostra que a temperaturas elevadas ($T > 1800$ K a $p = 1$ at) as taxas de reações para frente e para trás de



podem ser assumidas em equilíbrio parcial [92]. Isto define o seguinte sistema de equações algébricas:

$$k_1 c_{\text{H}} c_{\text{O}_2} = k_2 c_{\text{OH}} c_{\text{O}}$$

$$k_3 c_{\text{O}} c_{\text{H}_2} = k_4 c_{\text{OH}} + c_{\text{H}}$$

$$k_5 c_{\text{OH}} c_{\text{H}_2} = k_6 c_{\text{H}_2\text{O}} c_{\text{H}},$$

o qual pode ser resolvido para c_H , c_O , e c_{OH} fornecendo:

$$c_H = \left(\frac{k_1 k_3 k_5^2 c_{O_2} c_{H_2}^3}{k_2 k_4 k_6^2 c_{H_2O}^2} \right)^{\frac{1}{2}}, \quad (4.46)$$

$$c_O = \frac{k_1 k_5 c_{O_2} c_{H_2}}{c_{H_2O}}, \quad (4.47)$$

$$c_{OH} = \left(\frac{k_1 k_3}{k_2 k_4} c_{O_2} c_{H_2} \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (4.48)$$

Portanto, neste caso, a hipótese de equilíbrio parcial permitiu reduzir o sistema de equações em 3 equações. Não existe, assim, a necessidade de resolver equações diferenciais para H, O e OH, uma vez que elas são dadas em função de O_2 , H_2 e H_2O .

4.6 A hipótese de estado quase-estacionário

A hipótese de estado quase-estacionário aplica-se às espécies [76]. Se a i -ésima espécie é assumida em estado quase-estacionário, então sua taxa de consumo é assumida igual à sua taxa de produção, i.e.

$$\frac{d\phi_i}{dt} = f_i = 0. \quad (4.49)$$

Isto leva a uma redução direta da dimensão do sistema de equações (4.22)-(4.24). Na notação anterior, assumindo que as primeiras n_Q espécies estão em estado quase-estacionário, tem-se

$$\mathbf{B} = \begin{pmatrix} | & & | & | & & | & | & & | \\ \boldsymbol{\mu}_1 & \dots & \boldsymbol{\mu}_{n_e} & \boldsymbol{\sigma}_1 & \dots & \boldsymbol{\sigma}_{n_Q} & \boldsymbol{\nu}_{n_Q+1} & \dots & \boldsymbol{\nu}_{n_r} \\ | & & | & | & & | & | & & | \end{pmatrix}, \quad (4.50)$$

onde, $\boldsymbol{\mu}_i$, $i = 1, \dots, n_e$ denotam os vetores elemento, $\boldsymbol{\nu}_i$, $i = n_Q+1, \dots, n_r$ denotam os vetores reação e

$$\boldsymbol{\sigma}_i = (\sigma_{1i}, \dots, \sigma_{n_{sp}i})^T \quad (4.51)$$

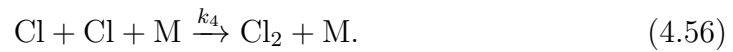
a base natural do espaço composição.

Então, a hipótese de estado quase-estacionário para as primeiras n_Q espécies fornece

$$\tilde{\mathbf{b}}_{n_e+i}\mathbf{F} = 0, \quad \text{for } i = 1, \dots, n_Q, \quad (4.52)$$

onde, $\tilde{\mathbf{b}}_i$ é a i -ésima linha da matriz inversa \mathbf{B}^{-1} . Assim, o sistema de equações (4.52) define uma variedade $(n_Q - n_r)$ -dimensional \mathbf{Q}_{n_q} em \mathbf{R} .

Um exemplo prático é dado pela combustão do hidrogênio (H_2) com (Cl_2) que segue o seguinte mecanismo



Usando a hipótese de estado quase-estacionário para as espécies intermediárias H e Cl, obtém-se

$$\frac{dc_{\text{Cl}}}{dt} = 2k_1c_{\text{Cl}_2}c_{\text{M}} - k_2c_{\text{Cl}}c_{\text{H}_2} + k_3c_{\text{H}}c_{\text{Cl}_2} - 2k_4c_{\text{Cl}}^2c_{\text{M}} \approx 0 \quad (4.57)$$

e

$$\frac{dc_{\text{H}}}{dt} = k_2c_{\text{Cl}}c_{\text{H}_2} - k_3c_{\text{H}}c_{\text{Cl}_2} \approx 0 \quad (4.58)$$

as quais implicam em

$$c_{\text{H}} = \frac{k_2}{k_3} \frac{c_{\text{Cl}}c_{\text{H}_2}}{c_{\text{Cl}_2}}. \quad (4.59)$$

Agora, pela substituição da expressão (4.59) na equação (4.57), tem-se

$$c_{\text{Cl}} = \sqrt{\frac{k_1}{k_4}} c_{\text{Cl}_2}. \quad (4.60)$$

Ambas hipóteses de equilíbrio parcial e estado quase-estacionário podem ser combinadas para produzir uma variedade reduzida ($n_m = n_{sp} - n_e - n_P - n_Q$)-dimensional. A maior desvantagem de ambas estas técnicas é sua complexidade que acaba por demandar uma pesquisa altamente especializada. Não é trivial a escolha das reações e espécies para as quais as hipóteses devem ser aplicadas. Mais ainda, a seleção é fortemente dependente do problema alvo. Isto significa que um mecanismo reduzido gerado para um dado problema é raramente apropriado para algum outro problema, para o qual um novo mecanismo reduzido precisa ser construído.

Um estudo mais aprofundado sobre a validade destas hipóteses permite o desenvolvimento de técnicas automáticas para a redução de mecanismos. Equilíbrio parcial é válido quando a reação ocorre em uma escala de tempo menor que as escalas de tempo dos outros processos físico-químicos. Similarmente, espécies podem ser consideradas em estado quase-estacionário quando elas já estão relaxadas quando outros processos ocorrem. Portanto, a chave é identificar processos que ocorram em escalas de tempo pequenas o suficiente para não acoplarem com outros processos. O método *Intrinsic Low-Dimensional Manifold* é uma alternativa neste sentido.

4.7 *Intrinsic Low-Dimensional Manifolds*

Como foi discutido acima as hipóteses de equilíbrio parcial e estado quase estacionário definem variedades de baixa dimensão, as quais restringem os processos de combustão. Estas ideias são generalizadas pelo método *Intrinsic Low-Dimensional Manifolds* [62]. O ILDM explora a estrutura multi-escalar dos escoamentos reativos para encontrar uma variedade atratora de baixa dimensão, a qual aproxima os processos reativos no espaço termoquímico.

O sistema (4.22)-(4.24) pode ser escrito na seguinte forma vetorial

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \mathbf{F}(\Psi) \quad (4.61)$$

onde $\Psi = (h, p, \phi_1, \dots, \phi_{n_{sp}})^T$ e $F = (0, 0, f_1, \dots, f_{n_{sp}})^T$.

A matriz jacobiana $(n_{sp} \times n_{sp})$ -dimensional $F_{\Psi} = (\partial F_i / \partial \Psi_j)_{ij}$ dos termos fontes químicos é usada para identificar uma decomposição do estado de estados Φ em subespaços invariantes rápido e lento. Suponha, então, que o conjunto de autovalores está decomposto em m_s autovalores com pequenas partes reais e $m_f = n_{sp} - m_s$ autovalores com grande parte real. Então, é possível decompor a matriz jacobiana como segue:

$$F_{\Psi} = (\mathbf{Z}_s \ \mathbf{Z}_f) \cdot \begin{pmatrix} \mathbf{N}_s & 0 \\ 0 & \mathbf{N}_f \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \tilde{\mathbf{Z}}_s \\ \tilde{\mathbf{Z}}_f \end{pmatrix}, \quad (4.62)$$

onde,

$$\tilde{\mathbf{Z}} = \mathbf{Z}^{-1} = (\mathbf{Z}_s \ \mathbf{Z}_f)^{-1} = \begin{pmatrix} \tilde{\mathbf{Z}}_s \\ \tilde{\mathbf{Z}}_f \end{pmatrix} \quad (4.63)$$

O subespaço invariante \mathbf{Z} é separado no subespaço invariante $(n \times m_s)$ -dimensional \mathbf{Z}_s e no subespaço invariante $(n \times m_f)$ -dimensional \mathbf{Z}_f de acordo com a decomposição dos autovalores. Esta decomposição pode ser obtida, por exemplo, pelo método de decomposição de Schur [40].

Assume-se, então, que os processos rápidos estão relaxados, o que permite que uma variedade intrínseca possa ser definida no espaço de estados. Este subespaço é composto por pontos para os quais as taxas de reações na direção dos n_f processos rápidos se anulam, i.e.

$$\tilde{\mathbf{Z}}_f(\Psi)F(\Psi) = 0. \quad (4.64)$$

A equação acima (4.64) é chamada de equação ILDM.

A equação ILDM (4.64) representa um sistema subdimensionado (m_f -equações e n_{sp} -variáveis). Portanto, m_s equações devem ser adicionadas ao sistema

para garantir unicidade de solução durante o processo de geração da ILDM. Estas equações paramétricas podem ser separadas em dois tipos:

$$\mathbf{P}_z(\Psi - \Psi_p) = \alpha_c, \quad (4.65)$$

$$\mathbf{P}_r(\Psi)(\Psi - \Psi_p) = \Delta\theta. \quad (4.66)$$

Aqui, \mathbf{P}_z denota as n_z expressões algébricas utilizadas para parametrizar as quantidades conservadas (composição dos elementos, entalpia, pressão) e \mathbf{P}_r representa as $n_r = m_s - n_z$ expressões que parametrizam os processos reativos relaxados. α é um vetor n_z -dimensional que caracteriza os parâmetros das variáveis conservadas. Por exemplo, $\alpha = 0$ para um sistema adiabático, isobárico e pré-misturado, pois todas as variáveis conservadas são mantidas constantes neste caso. $\Delta\theta$ denota o vetor n_r -dimensional que caracteriza os parâmetros para o processo reativo. O mecanismo reduzido obtido como resultado do sistema completo (4.64)-(4.66) representa o estado termoquímico restrito a um número pequeno de variáveis, denotadas por θ .

Numericamente, o mecanismo reduzido obtido pelo procedimento ILDM é um conjunto discreto de pontos pertencentes a variedade de baixa dimensão parametrizada apenas por $\theta = (\theta_1, \dots, \theta_{m_s})$. O procedimento começa por um ponto conhecido da ILDM. Deve-se observar que o ponto de equilíbrio é sempre um ponto da ILDM e, portanto, é muitas vezes utilizado como ponto inicial. Então, seguindo a notação acima, Ψ é o novo ponto procurado e Ψ_p é o ponto previamente conhecido. \mathbf{P}_z denota a matriz de parametrização ($n_z \times n$)-dimensional, a qual define o mapeamento do vetor de estados para o vetor das variáveis conservadas. Este é mantido constante durante a geração da ILDM.

Originalmente, o procedimento ILDM aplicava uma parametrização fixa (\mathbf{P}_r constante). Por exemplo, pode-se selecionar a concentração de alguma espécie (ou, uma combinação linear de um conjunto de medidas de espécies químicas) como parâmetro. Entretanto, esta não é sempre uma escolha trivial, por causa de pro-

blemas de unicidade e estabilidade numérica. O procedimento de solução pode ser apurado através de um procedimento de continuação multidimensional, o qual supera esta limitação usando uma parametrização ótima para cada ponto do espaço de estados. A parametrização ótima significa que o procedimento adapta a parametrização para cada ponto de um estado para outro. Portanto, a matriz de parametrização $(n_r \times n_{sp})$ -dimensional $\mathbf{P}_r(\Psi)$ é adaptada para cada ponto da variedade.

Desta maneira, as equações (4.64)-(4.66) são definidas localmente em uma vizinhança de Ψ , cujos pontos são funções de α_c e θ , i.e.

$$\Psi = \Psi(\alpha_c, \theta). \quad (4.67)$$

Os cálculos numéricos são feitos seguindo um procedimento predador-corretor. Começam em um ponto inicial (por exemplo, o ponto de equilíbrio), gera-se uma malha m_s -dimensional nas diferentes direções coordenadas e resolvem-se as equações (4.64)-(4.66) célula por célula nos nodos da malha. Então, o domínio m_s -dimensional da variedade é descrito por uma malha, a qual consiste de hipercubos m_s -dimensionais. Os índices da malha são chamados coordenadas generalizadas θ (os parâmetros generalizados).

Existe um procedimento simples para calcular a matriz \mathbf{P}_r generalizada. Os vetores de direção das células vizinhas

$$\Psi_{\theta_i} = \Psi_p(\theta) - \Psi_p(\theta - \delta_i), \quad \delta_i = (\delta_{i1}, \dots, \delta_{in_r})^T \quad (4.68)$$

são usados para adaptar a matriz de parametrização $\mathbf{P}_r(\Psi)$, onde $\Psi_p(\theta)$, $\Psi_p(\theta - \delta_i)$ são pontos da célula, δ_{ij} é o delta de Kronecker e $\Psi_\theta = (\Psi_{\theta_1}, \dots, \Psi_{\theta_{n_r}})$ +e uma aproximação do gradiente $(n \times n_r)$ -dimensional de Ψ com base nos vértices da célula com respeito a θ . A inserção na equação (4.66) fornece

$$\mathbf{P}_r \cdot \Psi_\theta = \mathbf{I}, \quad (4.69)$$

onde, \mathbf{I} é a matriz identidade ($m_s \times m_s$)-dimensional. Por meios da pseudo-inversa de Moore-Penrose Ψ_θ ($\Psi_\theta^+ = (\Psi_\theta^T \Psi_\theta)^{-1} \Psi_\theta^T$) a $P_r(\Psi)$ é definida como segue:

$$P_r = \Psi_\theta^+. \quad (4.70)$$

Isto implica que as direções das parametrizações são, com uma ordem de aproximação, tangentes a variedade e, portanto, as coordenadas da malha são idealmente adaptadas a ILDM, onde as direções de parametrização correspondem as direções dos autovetores relacionados aos autovalores lentos.

O estado Ψ e os subespaços invariantes $Z_s(\Psi)$, $Z_f(\Psi)$ são, então obtidos como funções de vetor m_s -dimensional de coordenadas da malha θ , i.e. $\Psi = \Psi(\theta)$.

Por sua generalidade, a ILDM tem sido extensivamente usada para gerar mecanismos de reação reduzidos para vários sistemas de combustão (veja, por exemplo, [36, 44, 67, 68, 10] e a literatura neles citada). As duas maiores desvantagens da técnica ILDM são intrínsecas ao método. Primeiro, a ILDM não existe em todas as regiões físicas. Por exemplo, em regiões de baixa temperatura, a ILDM não pode ser identificada por causa do decaimento exponencial dos termos fontes reativos. Um procedimento de extensão é então necessário. Bykov e Maas [23, 6] propuseram um método de extensão, mas o procedimento esbarra em complicações na sua implementação, o que mina a simplicidade da ILDM. Segundo, o fenômeno de transporte é negligenciado na geração da ILDM, o que é sabido provocar muitas das discrepâncias encontradas em suas aplicações.

Portanto, a chave é encontrar uma ferramenta de redução de modelo que unifique a robustez do método ILDM (no sentido de generalidade) e o modelo flamelet (que considera os efeitos de transporte). O método *Reaction-Diffusion Manifold* é uma tal alternativa, a qual discute-se no próximo capítulo.

5 REDIM

Neste capítulo é discutida a redução automática de mecanismos de reação química pelo método *Reaction-Diffusion Manifold* (REDIM) [22, 24]. Este método é baseado na estrutura multi-escalar dos escoamentos reativos [92] e a hipótese de decomposição do sistema dinâmico em modos (ou processos) rápidos e lentos [58]. Por hipótese, os modos rápidos relaxam rapidamente, deixando o sistema global ser governado apenas por modos lentos. Como resultado, somente algumas poucas variáveis (variáveis de progresso) são necessárias para descrever o sistema dinâmico. Mais ainda, a redução da dimensão do sistema através da remoção dos modos rápidos diminui a rigidez do sistema, o que facilita as simulações numéricas.

Diferentemente de muitos métodos de redução de mecanismos, o REDIM trata diretamente o acoplamento do transporte molecular com os processos termoquímicos. Esta é sua maior vantagem, a qual fornece uma aproximação apropriada para todo o espaço de estado físico. Mais ainda, se a REDIM-1D é equivalente ao método flamelet [74], REDIM permite uma extensão para dimensões maiores e, portanto, permite trabalhar com problemas onde o método flamelet falha em descrever com precisão o complexo acoplamento do transporte químico.

5.1 Equação REDIM

Pelo fato de a técnica REDIM ser recente, a derivação da equação REDIM é apresentada aqui. Este desenvolvimento é devido a Bykov e Maas [22] e ajuda a clarificar os estudos presentes. Os cálculos aqui apresentados assumem existência, unicidade e suavidade das soluções conforme necessário.

Primeiramente, é assumido que o escoamento reativo é descrito pelo típico sistema de equações escritas na notação vetorial geral:

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \mathbf{F}(\Psi) - \mathbf{u} \cdot \text{grad}(\Psi) - \frac{1}{\rho} \text{div}(\mathbf{D} \cdot \text{grad}(\Psi)) \equiv \Phi(\Psi) \quad (5.1)$$

onde, Ψ é o vetor $n = 2 + n_{sp}$ -dimensional dos escalares dados por:

$$\Psi = (h, p, \phi_1, \dots, \phi_{n_{sp}}),$$

e $\mathbf{F}(\Psi)$ é o vetor n -dimensional dos termos fontes (por exemplo, taxas das reações químicas), \mathbf{u} é um campo de velocidade média e \mathbf{D} é a matriz de difusão ($n \times n$)-dimensional e $\text{grad}(\Psi)$ é o tensor gradiente do vetor dos escalares. As condições de fronteira são assumidas conhecidas.

A dinâmica deste sistema de equações é governada por escalas de tempo em diferentes ordens de magnitude. Muitas destas escalas de tempo são tão rápidas que elas não acoplam com as escalas de tempo dos processos físicos. Portanto, se estas escalas forem desacopladas, o sistema (5.1) pode ser simplificado consideravelmente [62].

As seguintes hipóteses são assumidas verdadeiras. Existe uma decomposição da dinâmica do sistema em m_s modos lentos e $m_f = n - m_s$ modos rápidos. Ainda, os m_f processos rápidos relaxam rapidamente, isto é, após um tempo suficientemente grande, a dinâmica de (5.1) é geometricamente representada apenas por movimentos em m_s direções principais no espaço de estados. Em outras palavras, a solução do sistema pertence a uma variedade m_s -dimensional no espaço de estados após um certo tempo.

Afim de determinar esta variedade reduzida de baixa-dimensão, o conceito de variedades invariantes é aplicado. Assume-se que a variedade é definida por:

$$\mathcal{M} = \{\Psi : \Psi = \Psi(\theta), \Psi : \mathbb{R}^{m_s} \rightarrow \mathbb{R}^n\} \quad (5.2)$$

onde $\Psi(\boldsymbol{\theta})$ é uma função explícita e $\boldsymbol{\theta}$ é um vetor m_s -dimensional das coordenadas locais, as quais parametrizam a variedade.

Pela hipótese que \mathbf{M} é uma variedade invariante relacionada a $\Phi(\cdot)$, tem-se que para todo ponto $\Psi \in \mathbf{M}$, o campo vetorial $\Phi(\Psi) \in T_\Psi \mathbf{M}$ (o espaço tangente de \mathbf{M}). Segue:

$$(\Psi_\theta^\perp(\boldsymbol{\theta}))^T \cdot \Phi(\Psi) \equiv 0 \quad (5.3)$$

para todo $\boldsymbol{\theta}$. Aqui, Ψ_θ^\perp denota o espaço normal à variedade, isto é, $(\Psi_\theta^\perp)^T \cdot \Psi_\theta = 0$.

Agora, a condição (5.3) implica que

$$P_{(TM)^\perp} \Phi(\Psi) = (I - \Psi_\theta \Psi_\theta^+) \cdot \Phi(\Psi) = 0, \quad (5.4)$$

onde, $P_{(TM)^\perp} = (I - \Psi_\theta \Psi_\theta^+)$ é uma aproximação do operador projeção no espaço normal de \mathbf{M} . Ψ_θ é o gradiente local de $\Psi(\cdot)$, e Ψ_θ^+ é a pseudo-inversa de Moore-Penrose, a qual é definida por:

$$\Psi_\theta^+ := (\Psi_\theta^T \cdot \Psi_\theta)^{-1} \cdot \Psi_\theta^T \quad (5.5)$$

A pseudo-inversa (5.5) existe e é única sempre que $(\Psi_\theta^T \cdot \Psi_\theta)^{-1}$ existe, a qual pode ser garantida por uma escolha apropriada das coordenadas locais.

A equação (5.4) fornece uma aproximação da variedade procurada, isto é, poderia-se assumir que todo $\Psi(\boldsymbol{\theta}) \in \mathbb{R}^m$ que satisfaz (5.4) pertence a variedade reduzida de baixa-dimensão.

É importante observar que existem pelo menos duas dificuldades em resolver a equação (5.4). Primeiro, precisa-se determinar explicitamente a dependência de $\Psi \in \mathbf{M}$ em função das coordenadas locais $\boldsymbol{\theta}$. Segundo, $\Phi(\Psi(\boldsymbol{\theta}))$ depende dos processos de transporte, ou seja, depende dos gradientes espaciais de $\boldsymbol{\theta}$, os quais não são conhecidos *a priori*. Na sequência, discutimos estas questões.

Da observação de que, para muitos escoamentos reativos, o termo fonte $\mathbf{F}(\Psi)$ é dominante frente aos outros termos de (5.1) na maior parte do domínio de

interesse do espaço de estados, muitas técnicas de redução negligenciam os termos de transporte (veja o Capítulo 4). Tais métodos oferecem boas aproximações somente em algumas partes do domínio, noutras, aproximações pobres ou nenhuma aproximação são obtidas (veja, por exemplo, [6]). Isto se deve ao fato de que $\mathbf{F}(\Psi)$ se aproxima de zero exponencialmente para baixas temperaturas.

A ideia básica do método REDIM é usar uma aproximação (estimativa) para os gradientes espaciais de θ , o que permite resolver a equação (5.4). A solução é, portanto, uma estimativa da procurada variedade reduzida. Afim de explicar em mais detalhes, analisemos $\Phi(\Psi(\theta))$.

Assumindo que existe uma função explícita $\Psi(\theta)$, tem-se

$$\begin{aligned}\Phi(\Psi(\theta)) &= \mathbf{F}(\Psi(\theta)) - \mathbf{u} \cdot \Psi_{\theta} \cdot \text{grad}(\theta) - \frac{1}{\rho} \text{div}(\mathbf{D} \cdot \Psi_{\theta} \cdot \text{grad}(\theta)) \\ &=: A - B - C.\end{aligned}\tag{5.6}$$

O último termo C na equação (5.6) pode ser escrito como:

$$\begin{aligned}C_l &= \frac{1}{\rho} \sum_{i=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^m D_{lj} \frac{\partial \Psi_j}{\partial \theta_k} \frac{\partial \theta_k}{\partial x_i} \right) \\ &= \frac{1}{\rho} \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^m \left[\frac{\partial}{\partial x_i} \left(D_{lj} \frac{\partial \Psi_j}{\partial \theta_k} \right) \frac{\partial \theta_k}{\partial x_i} + D_{lj} \frac{\partial \Psi_j}{\partial \theta_k} \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\partial \theta_k}{\partial x_i} \right] \\ &= \frac{1}{\rho} \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^m \left[\sum_{f=1}^m \frac{\partial}{\partial \theta_f} \left(D_{lj} \frac{\partial \Psi_j}{\partial \theta_k} \right) \frac{\partial \theta_f}{\partial x_i} \frac{\partial \theta_k}{\partial x_i} + D_{lj} \frac{\partial \Psi_j}{\partial \theta_k} \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\partial \theta_k}{\partial x_i} \right] \\ &= \frac{1}{\rho} [(\mathbf{D} \cdot \Psi_{\theta})_{\theta} \circ \text{grad}(\theta) \circ \text{grad}(\theta) + (\mathbf{D} \cdot \Psi_{\theta}) \cdot \text{div}(\text{grad}(\theta))]\end{aligned}\tag{5.7}$$

onde, o l -ésimo componente de $(\mathbf{D} \cdot \Psi_{\theta})_{\theta}$ é dado por:

$$(\mathbf{D} \cdot \Psi_{\theta})_{\theta}^l = \sum_{j,g=1}^n \sum_{f,k=1}^m \left[\frac{\partial D_{lj}}{\partial \Psi_g} \frac{\partial \Psi_g}{\partial \theta_k} \frac{\partial \Psi_j}{\partial \theta_l} + D_{lj} \frac{\partial^2 \Psi_j}{\partial \theta_f \partial \theta_k} \right]\tag{5.8}$$

Agora, aplicando termo a termo o operador projeção $P_{T\mathbf{M}^{\perp}} = (I - \Psi_{\theta} \Psi_{\theta}^+)$ em $\Phi(\Psi(\theta))$, observa-se que

$$(I - \Psi_{\theta} \Psi_{\theta}^+) (\mathbf{u} \cdot \Psi_{\theta} \cdot \text{grad}(\theta)) = \mathbf{u} \cdot \Psi_{\theta} \cdot \text{grad}(\theta) - \mathbf{u} \cdot (\Psi_{\theta} \Psi_{\theta}^+ \Psi_{\theta}) \cdot \text{grad}(\theta) = 0\tag{5.9}$$

uma vez que $\Psi_\theta^+ \Psi_\theta = I$.

Então, a equação da variedade (5.4) pode ser reescrita conforme:

$$(I - \Psi_\theta \Psi_\theta^+) \cdot \Phi(\Psi) = (I - \Psi_\theta \Psi_\theta^+) \cdot \left[\mathbf{F}(\theta) - \frac{1}{\rho} \mathbf{D} \cdot \Psi_\theta \cdot \text{div}(\text{grad}(\theta)) - \frac{1}{\rho} (\mathbf{D} \cdot \Psi_\theta)_\theta \circ \text{grad}(\theta) \circ \text{grad}(\theta) \right] \quad (5.10)$$

Ainda, o segundo termo da equação (5.10) pode ser simplificado pela hipótese de difusividades iguais, isto é, $\mathbf{D} = d \cdot I$. Daí, segue

$$\begin{aligned} (I - \Psi_\theta \Psi_\theta^+) \cdot \frac{1}{\rho} \mathbf{D} \cdot \Psi_\theta \cdot \text{div}(\text{grad}(\theta)) &= \frac{1}{\rho} \cdot d \cdot (I - \Psi_\theta \Psi_\theta^+) \Psi_\theta \cdot \text{div}(\text{grad}(\theta)) \\ &= 0. \end{aligned} \quad (5.11)$$

Note que a simplificação acima vale também para difusividades diferentes, mas para uma matriz de difusão diagonal. Vale ressaltar que, esta, é uma hipótese comum em combustão computacional (veja, por exemplo, [92, 52]).

Por simplicidade, assume-se, aqui, que $\mathbf{D} = d \cdot I$. Assim, a equação da variedade (5.10) é simplificada conforme:

$$(I - \Psi_\theta \Psi_\theta^+) \cdot \Phi(\Psi) = (I - \Psi_\theta \Psi_\theta^+) \cdot \left[\mathbf{F}(\theta) - \frac{d}{\rho} \Psi_{\theta\theta} \circ \text{grad}(\theta) \circ \text{grad}(\theta) \right] \quad (5.12)$$

A equação (5.12) é a chave para o método REDIM. Assumindo que a dependência espacial de $\text{grad}(\theta)$ pode ser removida, i.e., $\text{grad}(\theta) = \mathbf{f}(\theta)$, tem-se de (5.4) que $\Psi(\theta)$ pertence a variedade reduzida se

$$(I - \Psi_\theta \Psi_\theta^+) \cdot \left[\mathbf{F}(\theta) - \frac{d}{\rho} \Psi_{\theta\theta} \circ \text{grad}(\theta) \circ \text{grad}(\theta) \right] = 0. \quad (5.13)$$

Por fim, com o objetivo de buscar uma aproximação numérica da solução de (5.13), Bykov e Maas [22] propuseram reformular essa equação como um sistema multidimensional parabólico, com condições iniciais e de fronteira apropriadas.

das. Assim, a equação REDIM [22], lê-se:

$$\begin{cases} \frac{\partial \Psi(\theta)}{\partial t} = (I - \Psi_\theta \Psi_\theta^+) \cdot \left[F(\theta) - \frac{d}{\rho} \Psi_{\theta\theta} \circ \text{grad}(\theta) \circ \text{grad}(\theta) \right] \\ \Psi^0 = \Psi^{\text{ext}}(\theta) \end{cases} \quad (5.14)$$

onde, Ψ^0 é uma condição inicial (estimativa inicial) da variedade $\Psi^{\text{est}}(\theta)$. A variedade reduzida de baixa-dimensão é definida pela solução estacionária $\Psi(\theta, \infty)$ do sistema (5.14). Para um simples exemplo, veja o Apêndice B.

Antes de discutirmos sobre as condições iniciais e de fronteira para o sistema REDIM, apresentamos alguns pontos sobre a aproximação de $\text{grad}(\theta)$.

5.2 O gradiente das coordenadas locais

No trabalho de Bykov e Maas [22] foi apresentado, primeiramente, um estudo sobre a aproximação do gradiente das coordenadas locais $\text{grad}(\theta)$ frente a determinação de uma variedade reduzida unidimensional. Neste caso, a variedade é parametrizada somente por uma coordenada local e as condições de fronteira são bem definidas pelas misturas não-queimadas.

Eles estudaram os seguintes quatro casos para $\text{grad}(\theta) = f(\theta)$:

- (a) gradientes exatos calculados de uma simulação numérica detalhada;
- (b) $f(\theta) = \max(\text{grad}_{\text{exact}}(\theta))$;
- (c) $f(\theta) = 0.1 \times \max(\text{grad}_{\text{exact}}(\theta))$;
- (d) $f(\theta) = 10 \times \max(\text{grad}_{\text{exact}}(\theta))$;

A REDIM unidimensional foi calculada resolvendo a equação REDIM (5.14). A variedade foi, então, comparada com a simulação numérica detalhada. Observou-se, como esperado, que a uso de gradientes exatos produziu o mesmo resultado que a solução detalhada. No caso (b), uma pequena diferença nos resultados

foi obtida. Nos casos (c) e (d), nos quais a estimativa do gradiente é alterada por uma ordem 10, a solução da variedade apresentou uma diferença de ordem 2 e 4, respectivamente. Daí, conclui-se:

- as variedades de baixa-dimensão não são, em geral, muito sensíveis com respeito aos gradientes das coordenadas locais ($\text{grad}(\boldsymbol{\theta})$);
- o uso de gradientes exatos é a melhor escolha para aproximar chamadas unidimensionais.

Vale ressaltar que no caso unidimensional, o uso de gradientes exatos torna a aproximação REDIM equivalente a aproximação flamelet (veja, por exemplo, Apêndice B).

É importante notar, ainda, que gradientes exatos não são geralmente aplicáveis. Singularidades em $\text{grad}(\theta)$ podem ocorrer, perturbando as aproximações numéricas. Eles não são aplicáveis, por exemplo, se a dimensão do modelo reduzido não coincide com a dimensão espacial do problema considerado.

Destas observações, Bykov e Maas [24] propuseram o seguintes algoritmo geral.

5.3 Algoritmo geral

Observando que as REDIMs não são muito sensíveis com respeito os gradientes das coordenadas locais, Bykov e Maas [24] propuseram um procedimento iterativo para superar a dependência espacial das coordenadas locais.

Uma aproximação constante $\text{grad}(\boldsymbol{\theta}) = c$ é assumida na equação (5.14) para obter-se uma primeira aproximação da variedade de baixa-dimensão $\Psi^1(\boldsymbol{\theta})$. Obtida esta, a variedade reduzida $\Psi^1(\boldsymbol{\theta})$ é utilizada para encontrar uma solução

estacionária θ^1 para o modelo reduzido, isto é, resolve-se:

$$\frac{\partial \theta(x, t)}{\partial t} = \Psi_{\theta}^{1+} \Phi(\Psi^1(\theta, t)). \quad (5.15)$$

A equação (5.15) vem de (5.1) aplicando-se a regra da cadeia e multiplicando por Ψ_{θ}^{1+} .

Então, θ^1 é usada para corrigir a aproximação do gradiente, fazendo $\text{grad}(\theta) = \bar{f}_1(\theta)$, com

$$\bar{f}_1(\theta) = \left. \frac{\partial \theta^1}{\partial x} \right|_{x=x^*} \quad (5.16)$$

Uma nova aproximação para a procurada variedade de baixa-dimensão pode ser, então, calculada resolvendo a equação (5.14) com a nova estimativa para \bar{f}_1 . O procedimento é repetido até que a convergência seja alcançada.

O algoritmo proposto pode ser resumido como segue:

1. estima-se uma solução inicial $\Psi^0(\theta)$ para a variedade reduzida e seta-se $i = 0$;
2. Estima-se o gradiente das coordenadas locais por $\text{grad}(\theta) = \bar{f}_i(\theta)$ ($\bar{f}_0(\theta) = \text{const.}$);
3. Integra-se a equação (5.14) para encontrar a solução estacionária $\Psi = \Psi^i(\theta)$;
4. Integra-se a equação (5.15) usando $\Psi^i(\theta)$;
5. Seta-se $i = i + 1$ e retorna-se ao passo 2 até que a convergência seja alcançada.

5.4 Parametrização da variedade

A escolha da parametrização da variedade é uma questão importante para o método REDIM. Ela afeta a existência e unicidade de solução para a equação (5.14), mas não da variedade em si. Isto é, a variedade independe da escolha da parametrização. Não existe motivação física geral para a escolha da parametrização, que pode ser dada pela temperatura, por números de moles específicos das espécies químicas, por números de moles específicos dos elementos, concentrações das espécies ou, ainda, qualquer combinação destes.

Neste trabalho, discute-se somente a parametrização baseada em apropriadas espécies que caracterizam o processo reativo. Isto nem sempre é possível, pois:

- existência e unicidade da parametrização pode não ser garantida;
- a parametrização pode ser mal condicionada, por exemplo, em algumas partes do espaço de estados onde as espécies escolhidas não variam significativamente, mas outras variáveis de estado variam consideravelmente.

Afim de exemplificar, a Figura 5.1 mostra as projeções da solução de uma chama de metano/ar nos planos $\phi_{\text{CO}_2} \times \phi_{\text{H}_2\text{O}}$ e $\phi_{\text{N}_2} \times \phi_{\text{H}_2\text{O}}$. A solução desta chama define uma trajetória no espaço de estados termoquímicos de alta-dimensão. Na Figura 5.1(a) vê-se que ϕ_{CO_2} não pode ser parametrizada por $\phi_{\text{H}_2\text{O}}$, pois unicidade não é garantida. Entretanto, ϕ_{N_2} é uma escolha apropriada, veja Figura 5.1(b).

Para a combustão de hidrocarbonetos (por exemplo, combustão de metano/ar), uma escolha geralmente apropriada é uma combinação de ϕ_{N_2} , ϕ_{CO_2} , e $\phi_{\text{H}_2\text{O}}$ (veja, por exemplo, [62, 36, 60]). ϕ_{N_2} está diretamente relacionada a fração de

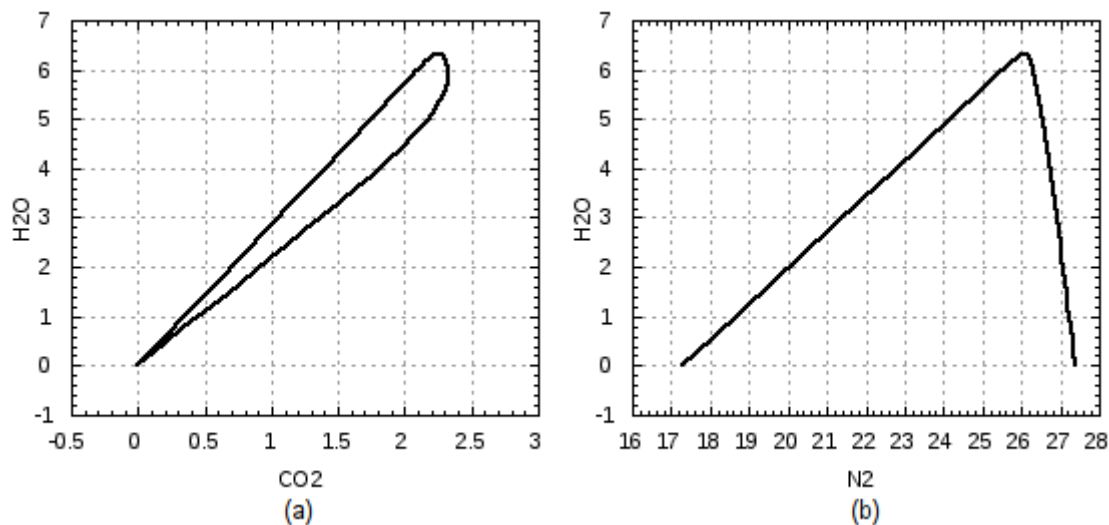


Figura 5.1: Solução de uma simulação detalhada para uma chama de metano/ar.
 (a) Projeção no plano $\phi_{\text{CO}_2} \times \phi_{\text{H}_2\text{O}}$. (b) Projeção no plano $\phi_{\text{N}_2} \times \phi_{\text{H}_2\text{O}}$ plane.

mistura, a qual caracteriza sistemas não pré-misturados, enquanto que ϕ_{CO_2} e $\phi_{\text{H}_2\text{O}}$ são geralmente os maiores produtos da reação.

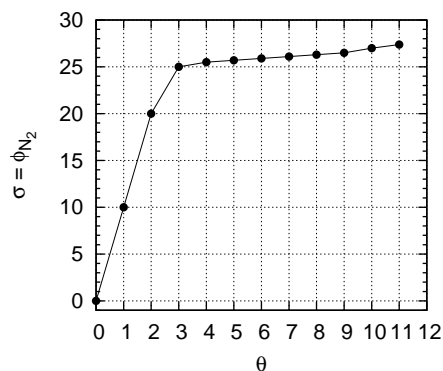


Figura 5.2: Malha comum para variedades unidimensionais para a combustão de hidrocarbonetos

Neste trabalho, as REDIMs são computadas usando uma nova versão do código HOMREA, primeiramente reportado em [63]. Este código resolve a equação 5.14, utilizando coordenadas locais generalizadas [60]. Portanto, HOMREA pode tratar vários casos para os quais uma parametrização em coordenadas fixas (baseadas em variáveis físicas) não se aplicam.

Por sorte, todas as variedades computadas neste trabalho podem ser parametrizadas por coordenadas fixas simples. Utiliza-se, aqui, simplesmente ϕ_{N_2} para 1D-REDIM e $(\phi_{N_2}, \phi_{CO_2})$ para 2D-REDIM.

Para fixar notação, σ denota coordenadas fixas, enquanto θ denota coordenadas generalizadas. A escolha inicial para uma variedade reduzida é tomada por uma relação discreta bijetora $\Psi_l^0 = \Psi^0(\sigma_l)$, com $l = 1, \dots, n_{\text{verts}}$, onde n_{verts} denota o número total de vértices. Cada vértice σ_l da variedade m -dimensional é unicamente relacionado a um vértice θ_l em uma malha m -dimensional, a qual consiste de hipercubos unitários m -dimensionais (veja Figuras 5.2 e 5.3 para o caso de $m = 1$). Assim, uma relação bijetora $\sigma_l = \sigma(\theta_l)$ é determinada e, então, $\Psi_l^0 = \Psi^0(\sigma_l) = \Psi^0(\sigma(\theta_l))$, a qual denota simplesmente por $\Psi_l^0 = \Psi^0(\theta_l)$.

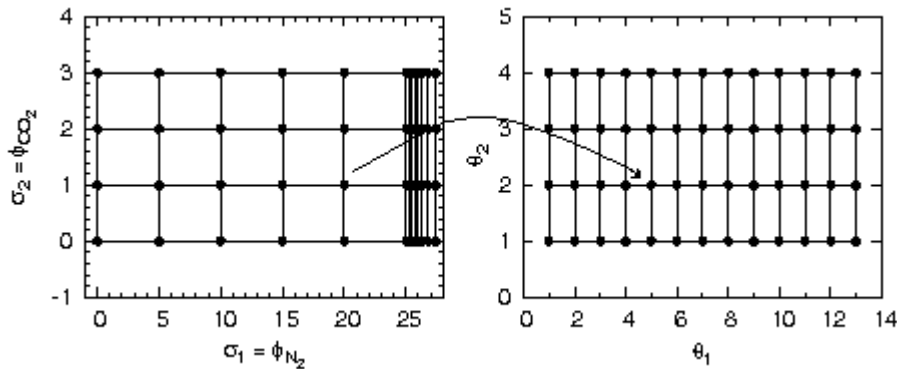


Figura 5.3: Malha comum para variedades bidimensionais

5.5 Condições iniciais e de fronteira

Até aqui, discutimos a parametrização e a estimativa do parâmetro gradiente das variedades. Nos resta, ainda, determinar as condições iniciais e de fronteira.

As variedades construídas não dependem da condição inicial. Entretanto, a equação (5.14) denota um sistema n -dimensional de equações diferenciais

parciais acopladas, as quais podem ser altamente rígidas. Portanto, condições iniciais apropriadas são requeridas para evitar instabilidades numéricas e acelerar a convergência.

Por exemplo, a ILDM estendida [6, 22] pode ser utilizada como condição inicial. Ela representa o caso limite quando o termo fonte $\mathbf{F}(\Psi)$ na equação (5.1) é dominante e o fenômeno de transporte pode ser negligenciado. Com exceção do caso unidimensional, ILDM de maiores dimensões podem ser complicadas de serem obtidas devido a problemas técnicos diversos.

Uma condição inicial mais apropriada, pelo menos para sistemas não pré-misturados, pode ser construída da simulação detalhada de chamas unidimensionais (como, por exemplo, *couterflow flames*). Geralmente, chamas unidimensionais podem ser eficientemente calculadas usando parâmetros químicos e de transporte detalhados. Estas podem ser interpretadas como *flamelets* para dadas taxas de dissipação [74]. De fato, o modelo 1D-REDIM computado para uma chama *counterflow* usando o algoritmo geral apresentado na Seção 5.3 é equivalente ao modelo flamelet laminar (veja, também, Apêndice B).

Assim sendo, para 1D-REDIM uma condição inicial apropriada é dada por um *flamelet* de mesmas condições de fronteira, as quais são definidas pelas misturas não-queimadas. Ainda mais, a melhor escolha para o parâmetro gradiente da variedade é o gradiente exato, que pode ser computado diretamente da *flamelet*.

Similarmente, uma condição inicial apropriada para 2D-REDIM pode ser construída de um conjunto de *flamelets* todas com as mesmas misturas não pré-misturadas e diferentes gradientes de pressão. O parâmetro gradiente da variedade pode ser, novamente, tomado dos gradientes exatos destas chamas. Esta é uma escolha apropriada, uma vez que Bykov e Maas [24] mostraram que quanto maior a dimensão da REDIM menor é sua dependência em relação ao gradiente das coordenadas locais (veja Seção 5.2). O problema, aqui, é em determinar as condições

de contorno da variedade, uma vez que as misturas não-queimadas não fornecem condições para todo o contorno.

Uma ideia seria tomar o *flamelet* com maior e menor taxa de dissipação como sendo os contornos. Entretanto, os *flamelets* podem não cobrir todo o domínio físico no espaço de estados. Condições mais apropriadas são construídas considerando dois casos limites. Primeiro, se nenhuma reação ocorre, a solução do sistema (5.1) corresponde a linha de mistura (trajetória linear que conecta as misturas não-queimadas no espaço de estados), o que fornece uma parte do contorno. A outra parte do contorno pode ser obtida pela ILDM estendida de uma dimensão.

5.6 REDIMs calculadas

Nesta seção são discutidas as REDIMs computadas, as quais foram aplicadas nas simulações das chamas axisimétricas, difusivas, laminares, não pré-misturadas. O combustível é metano diluído com nitrogênio (65%N₂+35%CH₄) e o oxidante é ar “regular” (79%N₂+21%O₂).

As REDIMs computadas são modelos químicos reduzidos do mecanismo GRI-3.0 [83]. O mecanismo consiste de 53 espécies e 325 reações elementares. REDIMs unidimensional (1D-REDIM) e bidimensional (2D-REDIM) foram construídas.

5.6.1 1D-REDIM

A condição inicial para a 1D-REDIM ($m = 1$) é dada pela solução detalhada da chama *counterflow* com gradiente de pressão -1.0×10^4 , a qual tem metano diluído com nitrogênio (65%N₂+35%CH₄) e ar (79%N₂+21%O₂) como condições de contorno (veja, Figura 5.4). A condição inicial foi calculada usando o código INSFLA [58].

A variedade unidimensional é parametrizada por ϕ_{N_2} . As condições de contorno da variedade são diretamente definidas pelas misturas não-queimadas. O parâmetro gradiente da variedade é dado pelos gradientes exatos das coordenadas locais, calculados do *flamelet* simulado.

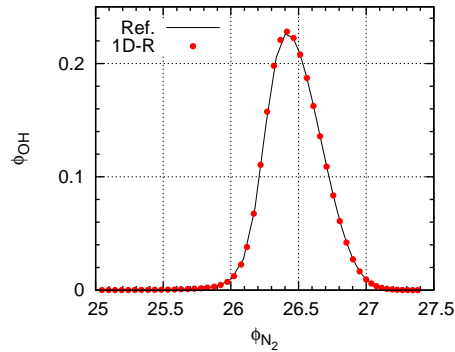


Figura 5.4: Projeção da solução da chama *counterflow* (linha sólida preta) e a 1D-REDIM calculada (pontos vermelhos) no plano $N_2 \times OH$ do espaço de estados.

A Figura 5.4 mostra a chama *counterflow* e a 1D-REDIM calculada projetadas no plano $N_2 \times OH$ do espaço de estados. Nota-se que a 1D-REDIM é uma boa aproximação para a *flamelet*. Isto se deve ao fato de que gradientes exatos das coordenadas locais foram aplicados como o parâmetro gradiente da variedade. Ainda mais, neste caso, o modelo 1D-REDIM é equivalente ao modelo flamelet laminar (veja, Apêndice B para um simples exemplo).

5.6.2 2D-REDIM

A variedade REDIM bidimensional (2D-REDIM) computada é parametrizada pelas coordenadas locais (ϕ_{N_2} , ϕ_{CO_2}). Frente a variedade unidimensional, a 2D-REDIM representa uma extensão na dimensão da variedade que permite atacar problemas para os quais os modelos flamelet podem falhar (por exemplo, propagação de chamas triplas).

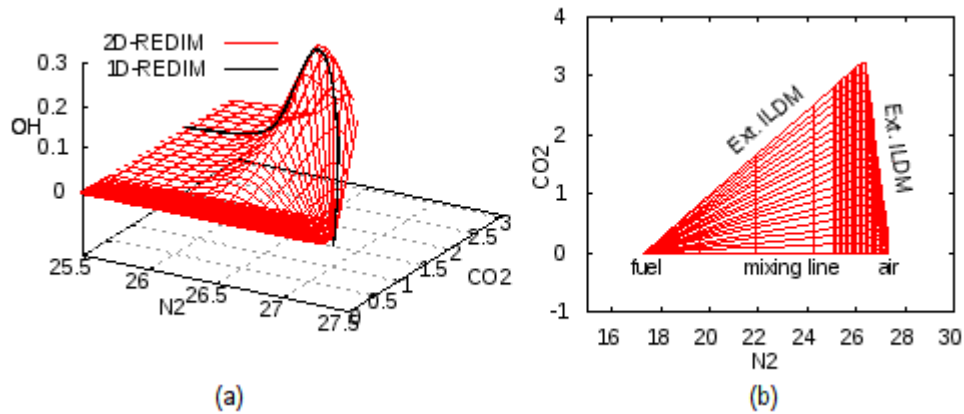


Figura 5.5: Representação das REDIMs unidimensional (linha preta) e bidimensional (linha vermelha) projetadas no espaço $N_2 \times CO_2 \times OH$. (b) Representação da 2D-REDIM com indicação das condições de fronteira projetada no plano $N_2 \times CO_2$.

Neste caso, a condição inicial definida foi construída a partir de uma coleção de *flamelets* com diferentes taxas de dissipação. As condições de contorno são formadas pela linha de mistura e pela ILDM estendida unidimensional (veja, Figura 5.5).

Determinadas as condições iniciais e de contorno para a 2D-REDIM, resta determinar o parâmetro gradiente da variedade. Como colocado anteriormente, as REDIMs não dependem fortemente da estimativa de $\text{grad}(\theta)$ e, ainda, quanto maior a dimensão da variedade, menor é esta dependência. Neste trabalho, fez-se a escolha razoável de tomar $\text{grad}(\theta)$ igual aos gradientes exatos calculados a partir da condição inicial (o conjunto de *flamelets* detalhadamente simulados).

5.7 Tabelas *lookup*

Uma vez computadas as REDIMs, pode-se parametrizar todos os parâmetros termoquímicos pelas coordenadas locais. Assim, a ideia é construir uma tabela *lookup*, a qual contenha todos os parâmetros necessários para os cálculos de

chamas laminares (por exemplo, coeficientes de transporte, viscosidade, etc.) para cada ponto calculado da variedade.

No código HOMREA, as REDIMs são inicialmente computadas em coordenadas generalizadas. Simulação de chamas usando coordenadas generalizadas têm pelo menos duas desvantagens:

- as variáveis não tem significado físico, o que dificulta a interpretação das soluções;
- a matriz projeção $\Psi(\boldsymbol{\theta})_{\boldsymbol{\theta}}^+$ não é constante e pode ter singularidades.

Portanto, uma vez calculadas as REDIMs, um pós-processamento constrói novas tabelas REDIM *lookup* parametrizadas em coordenadas fixas contendo:

- as coordenadas fixas das variáveis locais em $\boldsymbol{\theta}_l$, $l = 1, \dots, n_{\text{vert}}$. Nos casos, aqui, calculados ϕ_{N_2} para 1D-REDIM e $(\phi_{\text{N}_2}, \phi_{\text{CO}_2})$ para 2D-REDIM;
- os valores das variáveis do espaço de estados em cada coordenada calculada $\Psi_l = \Psi(\boldsymbol{\theta})$ e suas taxas;
- as demais propriedades necessárias: $T_l = T(\boldsymbol{\theta})_l$, $M_l = M(\boldsymbol{\theta}_l)$, $\rho_l = \rho(\boldsymbol{\theta}_l)$, $\mu_l = \mu(\boldsymbol{\theta}_l)$, $\Pi_l = \Pi(\boldsymbol{\theta}_l)$, $\Xi_l = \Xi(\boldsymbol{\theta}_l)$ e $\mathcal{S}_l = \mathcal{S}(\boldsymbol{\theta}_l)$, para $l = 1, \dots, n_{\text{vert}}$ (veja, próxima Seção 5.8).

Até aqui, as coordenadas fixas formam uma malha não-estruturada nas variáveis de progresso (veja Figura 5.5). Para acelerar a busca por pontos nas tabelas, um pós-processamento adicional é realizado para interpolar as tabelas em uma malha uniforme. Interpolação linear simples é empregada para tabelas unidimensionais. No caso de tabelas bidimensionais, os dados são linearmente interpolados com base em uma triangulação do domínio.

5.8 Projção do sistema completo na variedade reduzida

Assume-se que o sistema reativo considerado está relaxado em uma dada REDIM. Uma vez conhecida a REDIM, todos os estados termodinâmicos são, por definição, elementos da variedade [22]. As reações químicas e o fenômeno de transporte não representam movimentos para fora da variedade [62, 59]. Assim, o sistema completo (2.76)-(2.81) pode ser projetado na variedade.

A projeção do sistema completo de equações segue Bauer et al. [6]. Primeiro, as equações (2.78) e (2.79) são reescritas conforme:

$$\rho \mathbf{u} \cdot \nabla \Psi - \nabla \cdot (\mathbf{D} \nabla \Psi) = \mathbf{F}(\Psi), \quad (5.17)$$

onde, Ψ é o vetor $n = 2 + n_{\text{sp}}$ -dimensional $(h, p, \phi_1, \dots, \phi_{n_{\text{sp}}})^T$, $\mathbf{F}(\Psi)$ é o vetor n -dimensional $(0, 0, \dot{r}_1, \dots, \dot{r}_{n_{\text{sp}}})$ e \mathbf{D} é a matriz de difusão $(n \times n)$ -dimensional

$$\mathbf{D} = \begin{pmatrix} \frac{\lambda}{c_p} & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\lambda}{Mc_p} \frac{\partial x_1}{\partial \phi_1} & \dots & \frac{\lambda}{Mc_p} \frac{\partial x_1}{\partial \phi_{n_{\text{sp}}}} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \frac{\lambda}{Mc_p} \frac{\partial x_{n_{\text{sp}}}}{\partial \phi_1} & \dots & \frac{\lambda}{Mc_p} \frac{\partial x_{n_{\text{sp}}}}{\partial \phi_{n_{\text{sp}}}} \end{pmatrix}. \quad (5.18)$$

Observe que, por simplicidade, o transporte de calor por radiação foi negligenciada. Ainda mais, a matriz de difusão \mathbf{D} é dada para o caso especial de $Le = 1$. A extensão para o caso geral de transporte detalhado é possível e tem sido recentemente apresentado por Bykov e Maas [61]. Agora, assumindo que a REDIM é parametrizada pelas variáveis de progresso $\boldsymbol{\theta} = (\theta_1, \dots, \theta_{m_s})^T$, i.e. $\Psi = \Psi(\boldsymbol{\theta})$, tem-se que a equação (5.17) se escreve conforme:

$$\rho \mathbf{u} \cdot \Psi_{\boldsymbol{\theta}} \cdot \nabla \boldsymbol{\theta} - \nabla \cdot (\mathbf{D} \cdot \Psi_{\boldsymbol{\theta}} \cdot \nabla \boldsymbol{\theta}) = \mathbf{F}(\Psi(\boldsymbol{\theta})), \quad (5.19)$$

onde, $\Psi_{\boldsymbol{\theta}}$ é a matriz gradiente $(n \times m_s)$ -dimensional de $\boldsymbol{\theta}$.

De formas a obter o sistema de equações governantes em termos das variáveis reduzidas $\boldsymbol{\theta}$, a equação (5.19) pode ser multiplicada pela matriz pseudo-inversa $(m_s \times n)$ -dimensional $\boldsymbol{\Psi}_\theta^+$, definida por

$$\boldsymbol{\Psi}_\theta^+ = (\boldsymbol{\Psi}_\theta^T \cdot \boldsymbol{\Psi}_\theta)^{-1} \cdot \boldsymbol{\Psi}_\theta^T. \quad (5.20)$$

O que resulta em:

$$\rho \mathbf{u} \cdot \nabla \boldsymbol{\theta} - \boldsymbol{\Psi}_\theta^+ \nabla \cdot (\mathbf{D} \cdot \boldsymbol{\Psi}_\theta \nabla \boldsymbol{\theta}) = \boldsymbol{\Psi}_\theta^+ \mathbf{F}(\boldsymbol{\Psi}). \quad (5.21)$$

Note que a existência de $\boldsymbol{\Psi}_\theta^+$ é garantida, uma vez que os vetores colunas de $\boldsymbol{\Psi}_\theta$ correspondem as direções de parametrização no estado de espaços, as quais tem de ser linearmente independentes [22].

Então, da discussão acima, segue que o sistema reduzido de equações governantes é dado por:

$$\nabla \cdot \mathbf{u} + \mathbf{u} \cdot \left(\frac{1}{M} \nabla M - \frac{1}{T} \nabla T \right) = 0, \quad (5.22)$$

$$\rho \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} - \nabla \cdot (\mu \nabla \mathbf{u}) + \nabla p - (\rho - \rho_0) \mathbf{g} = 0, \quad (5.23)$$

$$\rho \mathbf{u} \cdot \nabla \boldsymbol{\theta} - \Pi(\boldsymbol{\theta}) \nabla \cdot (\boldsymbol{\Xi}(\boldsymbol{\theta}) \nabla \boldsymbol{\theta}) - \mathbf{S}(\boldsymbol{\theta}) = 0, \quad (5.24)$$

onde,

$$\Pi(\boldsymbol{\theta}) = \boldsymbol{\Psi}_\theta^+(\boldsymbol{\theta}), \quad (5.25)$$

$$\boldsymbol{\Xi}(\boldsymbol{\theta}) = \mathbf{D}(\boldsymbol{\Psi}(\boldsymbol{\theta})) \cdot \boldsymbol{\Psi}_\theta(\boldsymbol{\theta}), \quad (5.26)$$

$$\mathbf{S}(\boldsymbol{\theta}) = \boldsymbol{\Psi}_\theta^+(\boldsymbol{\theta}) \cdot \mathbf{F}(\boldsymbol{\Psi}(\boldsymbol{\theta})). \quad (5.27)$$

Portanto, o sistema completo de equações (2.76)-(2.81), o qual consiste de 58 equações neste trabalho, é aproximado por um sistema reduzido de apenas $5 + m_s$ equações, onde m_s é a dimensão da REDIM. Uma vez que espera-se que 2D-REDIM seja uma boa aproximação do sistema [22], um fator de redução $58 : 7$ é obtido no número de equações. Ainda mais, a estratégia de redução seguida neste trabalho pode ser facilmente adaptada para escoamentos reativos mais complexos como, por exemplo, escoamentos turbulentos.

6 ESQUEMA NUMÉRICO

Neste capítulo, é discutido o esquema numérico usado para resolver (5.22)-(5.24) e as condições de contorno empregadas. As equações governantes reduzidas na formulação de baixo-Mach são discretizadas pelo Método dos Elementos Finitos (MEF) e a solução estacionária é encontrada por um método de Newton similar. O sistema linear que surge em cada passo Newton é resolvido por um eficiente *solver* GMRES, preconditionado por um método geométrico multigrid. Paralelização, refinamento local de malha e malha adaptativa são aplicadas para aumentar a performance, eficiência e precisão.

A estratégia numérica segue as ideias originais apresentadas por Braack et al. [14, 15, 13, 8]. Novas estratégias e melhoria destas são reportadas em muitos trabalhos como, por exemplo, [17, 19, 18].

Aqui, algumas notações da teoria de espaços de funções são introduzidas (veja, por exemplo, [35, 96, 38] para uma discussão detalhada sobre análise de funções). Para um domínio $\Omega \subset \mathbb{R}^d$, o espaço de Lebesgue das funções quadráticas-integráveis em Ω é denotado por $L^2(\Omega)$. $L^2(\Omega)$ é um espaço de Hilbert com o produto escalar:

$$(u, v)_\Omega = \int_\Omega uv dx, \quad (6.1)$$

e norma:

$$\|u\|_\Omega = (u, u)_\Omega^{\frac{1}{2}}. \quad (6.2)$$

O produto escalar e a norma são usualmente denotadas por (\cdot, \cdot) e $\|\cdot\|$, respectivamente, se o domínio de referência Ω está claro.

Analogamente, $L^2(\partial\Omega)$ descreve o espaço das funções quadráticas-integráveis na fronteira de Ω equipadas com um produto escalar e norma apropriadas. O espaço

de Sobolev $H^m(\Omega)$ consiste das funções $v \in L^2(\Omega)$ as quais possuem derivadas parciais fracas $\nabla^m v \in L^2(\Omega)^{d \times \dots \times d}$ até ordem m . Ainda, existe um operador contínuo de traço $\gamma : H^1(\Omega) \rightarrow L^2(\Omega)$ com $v|_{\partial\Omega} := \gamma(v)$. Assim, o espaço das funções H_0^1 pode ser definido por $H_0^1 = \{v \in H^1(\Omega) : v|_{\partial\Omega} = 0\}$.

6.1 Discretização

Para a discretização, as equações (5.22)-(5.24) são, primeiramente, reescritas em uma formulação fraca geral em coordenadas cartesianas em \mathbb{R}^3 . Então, elas são simplificadas quando são reescritas em coordenadas cilíndricas assumindo-se axisimetria. Esta formulação final é, então, discretizada seguindo o Método dos Elementos Finitos.

Antes de discutirmos em detalhe a discretização, uma pequena introdução do Método dos Elementos Finitos (MEF) é apresentada (veja, por exemplo, [31, 46] para uma aprofundada introdução ou [98, 45] para questões de implementações). De forma geral, o problema de interesse pode ser formulado como segue: encontrar a solução u de

$$\mathcal{A}u = f \quad \text{in } \Omega, \quad (6.3)$$

$$\mathcal{B}u = g \quad \text{in } \partial\Omega, \quad (6.4)$$

onde, $\Omega \subset \mathbb{R}^d$, $f : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^n$ é uma fonte dada, \mathcal{A} é um operador diferencial não-linear de segunda ordem e \mathcal{B} é um operador de fronteira dado pelas condições usuais de fronteira.

Como usual, a discretização por elementos finitos é construída sobre a formulação fraca de (6.3)-(6.4) (veja, por exemplo, [43, 38] para uma introdução sobre formulações variacionais de EDPs). Isto significa, que a solução u é buscada no espaço de Hilbert V e satisfaz

$$a(u)(\varphi) = f(\varphi), \quad \forall \varphi \in V, \quad (6.5)$$

onde, $a(\cdot)(\cdot)$ é uma forma semi-linear relacionada ao problema original (6.3)-(6.4). Aqui, condições de fronteira homogêneas de Dirichlet são assumidas (o caso geral é facilmente obtido).

A discretização por elementos finitos depende da triangularização do domínio Ω . Assumindo uma fronteira poligonal, Ω é usualmente particionado em triângulos abertos K (ou, retângulos como utilizados neste trabalho). Cada partição K é chamada célula. Para o caso de fronteiras não poligonais, o leitor é indicado a literatura clássica [31, 46, 98, 45]. A triangularização é uma cobertura sem sobreposição denotada por $\mathcal{T}_h = \{K\}$, onde h é o parâmetro da malha tal que $h|_K = h_K$ é o diâmetro da K -ésima célula. A interseção do fecho de duas células adjacentes é chamada de face e a inserção de duas faces adjacentes é chamada nodo.

Uma malha é chamada regular se ela satisfaz as seguintes condições [31, 30]:

$$\text{R1 } \bar{\Omega} = \bigcup_{K \in \mathcal{T}_h} \bar{K};$$

$$\text{R2 } K_1 \cap K_2 = \emptyset, \quad \forall K_1, K_2 \in \mathcal{T}_h \quad \text{com } K_1 \neq K_2;$$

R3 Qualquer face de qualquer célula $K_1 \in \mathcal{T}_h$ é um subconjunto da fronteira $\partial\Omega$, ou uma face de outra célula $K_2 \in \mathcal{T}_h$.

Para permitir o refinamento local e adaptativo de malha *hanging nodes* são introduzidos. Assim, uma condição mais fraca de (R3) é assumida: células são permitidas ter nodos que são pontos médios de faces ou bordas de células vizinhas. No máximo um nodo *hanging* é permitido, como é explicado mais tarde.

Espaços contínuos de elementos finitos $V_h \subset V$ são construídos por:

$$V_h = \{v \in V : v|_K \in Q(K), K \in \mathcal{T}_h\}, \quad (6.6)$$

onde, $Q(K)$ denota um espaço apropriado de funções polinomiais na célula $K \in \mathcal{T}_h$ (veja, por exemplo, [31, 48] para vários exemplos clássicos). Os espaços polinomiais

são definidos sobre uma célula de referência \hat{K} , e mapeados para a célula computacional K por alguma transformação $T_K : \hat{K} \rightarrow K$. O espaço polinomial baseado na célula de referência $\hat{Q}(\hat{K})$ é, então, definido conforme:

$$\hat{Q}^p(\hat{K}) = \left\{ \prod_{i=1}^d x_i^{\alpha_i}, \alpha_i \in \{0, \dots, p\} \right\}. \quad (6.7)$$

Pelas definições acima, o problema discreto em elementos finitos (a discretização clássica de Galerkin) é associado ao problema original (6.3)-(6.4) lê-se: encontrar u_h no espaço de elementos finitos $V_h \subset V$ tal que

$$a(u_h)(\varphi_h) = f(\varphi_h), \quad \forall \varphi_h \in V_h. \quad (6.8)$$

Na sequencia, apresenta-se a formulação fraca de (5.22)-(5.24) e as simplificações obtidas pela hipótese de axisimetria.

6.1.1 Formulação fraca e axisimetria

Seja $\tilde{\Omega} \subset \mathbb{R}^3$ um domínio aberto. De acordo com a Figura 6.1, a fronteira Γ pode ser dividida em várias partes. Os escoamentos de entrada de combustível e oxidante são dados por condições de contorno de Dirichlet sobre Γ_{fuel} e Γ_{oxidizer} . Condições de Dirichlet homogêneas são assumidas em Γ_{wall} , a parede do injetor de combustível, e Γ_{dead} , a zona morta de fronteira, bem como, em Γ_{outer} , a fronteira radial externa. A fronteira de saída Γ_{out} é deixada aberta, i.e. condição de Neumann é assumida.

Então, a velocidade \mathbf{u} é assumida pertencer ao espaço de Sobolev $H_0^1(\tilde{\Omega}, \tilde{\Gamma}_{\mathbf{D}_{\mathbf{u}}})$, onde $\tilde{\Gamma}_{\mathbf{D}_{\mathbf{u}}}$ é a união de todas as fronteiras de Dirichlet. As variáveis de progresso são assumidas pertencerem ao espaço análogo $H_0^1(\tilde{\Omega}, \tilde{\Gamma}_{\mathbf{D}_{\theta}})$ e a pressão é procurada em $L^2(\tilde{\Omega})$:

$$\mathbf{u} \in \tilde{V} := H_0^1(\tilde{\Omega}, \tilde{\Gamma}_{\mathbf{D}_{\mathbf{u}}}), \quad \theta \in \tilde{W} := H_0^1(\tilde{\Omega}, \tilde{\Gamma}_{\mathbf{D}_{\theta}}), \quad p \in \tilde{L} := L^2(\tilde{\Omega}). \quad (6.9)$$

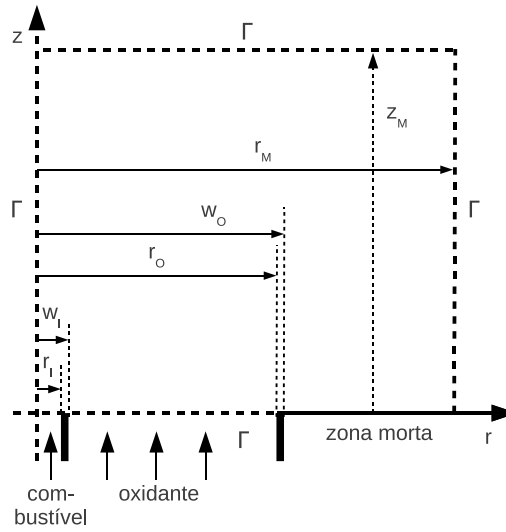


Figura 6.1: Esquema do domínio computacional.

Multiplicando as equações (5.22)-(5.24) pelas funções teste $(\tilde{\phi}, \tilde{\psi}, \tilde{\xi}) \in \tilde{V} \times \tilde{W} \times \tilde{L}$ e integrando por partes, a seguinte formulação fraca é encontrada:

$$\left(\nabla \cdot \mathbf{u}, \tilde{\xi} \right) + \left(\mathbf{u} \cdot \left(\frac{1}{M(\boldsymbol{\theta})} \nabla M(\boldsymbol{\theta}) - \frac{1}{T(\boldsymbol{\theta})} \nabla T(\boldsymbol{\theta}) \right), \tilde{\xi} \right) = 0 \quad (6.10)$$

$$\left(\rho \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}, \tilde{\phi} \right) + \left(\mu \nabla \mathbf{u}, \nabla \tilde{\phi} \right) - \left(p, \nabla \tilde{\phi} \right) - \left((\rho - \rho_0), \mathbf{g}, \tilde{\phi} \right) = 0 \quad (6.11)$$

$$\left(\rho \mathbf{u} \cdot \nabla \boldsymbol{\theta}, \tilde{\psi} \right) + \left(\boldsymbol{\Pi}(\boldsymbol{\theta}) \nabla \cdot (\boldsymbol{\Xi}(\boldsymbol{\theta}) \cdot \nabla \boldsymbol{\theta}), \tilde{\psi} \right) - \left(\mathbf{S}(\boldsymbol{\theta}), \tilde{\psi} \right) = 0, \quad (6.12)$$

Note que $\boldsymbol{\Pi}(\boldsymbol{\theta})$ é uma matriz constante, uma vez que as REDIMs são, aqui, parametrizadas em coordenadas fixas. Na fronteira de saída, onde os espaços de teste não tem traço zero, as condições de fronteira de Neumann são naturalmente incluídas devido a integração por partes. Assim, a condição de fronteira de saída é

$$\int_{\Gamma_{\text{outflow}}} \mu(\boldsymbol{\eta} \cdot \nabla) \mathbf{u} - p \cdot \boldsymbol{\eta} \, ds = 0.$$

Agora, a formulação fraca (6.10)-(6.12) é transformada em coordenadas cilíndricas e a hipótese de axisimetria é levada em conta (veja, Apêndice A, para maiores detalhes). Isto permite que o problema seja formulado no domínio aberto

$\Omega \subset \mathbb{R}^2$ com fronteira Γ . Na fronteira de simetria Γ_{symmetry} (veja o esquema a direita na Figura 6.1) a condição de simetria $\eta \cdot v = 0$ é usada.

Então, em coordenadas cilíndricas e axisimétricas, a velocidade é dada por $\mathbf{u} = (u^z, u^r)$, com $u^i \in V^i := H_0^1(\Omega, \Gamma_{D_{u^i}})$, $i = z, r$, $\boldsymbol{\theta} \in W := H_0^1(\Omega, \Gamma_{D_{\boldsymbol{\theta}}})$ e $p \in L := L^2(\Omega)$. Considerando as funções teste $\phi = (\phi^z, \phi^r) \in V := V^z \times V^r$, $\psi \in W$ e $\xi \in L$, pode-se escrever a seguinte formulação fraca:

$$\begin{aligned} & \left(r \left(\frac{\partial u^z}{\partial z} + \frac{\partial u^r}{\partial r} + \frac{1}{r} u^r \right), \xi \right) \\ & + \sum_i \left(r \mathcal{L}(\boldsymbol{\theta})_i \left(u^z \frac{\partial \theta_i}{\partial z} + u^r \frac{\partial \theta_i}{\partial r} \right), \xi \right) = 0 \end{aligned} \quad (6.13)$$

$$\begin{aligned} & \left(r \rho \left(u^z \frac{\partial u^z}{\partial z} + u^r \frac{\partial u^z}{\partial r} \right), \phi^z \right) + \left(r \mu \frac{\partial u^z}{\partial z}, \frac{\partial \phi^z}{\partial z} \right) + \left(r \mu \frac{\partial u^z}{\partial r}, \frac{\partial \phi^z}{\partial r} \right) \\ & - \left(r p, \frac{\partial \phi^z}{\partial z} \right) - (r(\rho - \rho_0) g^z, \phi^z) = 0 \end{aligned} \quad (6.14)$$

$$\begin{aligned} & \left(r \rho \left(u^z \frac{\partial u^r}{\partial z} + u^r \frac{\partial u^r}{\partial r} \right), \phi^r \right) + \left(r \mu \frac{\partial u^r}{\partial z}, \frac{\partial \phi^r}{\partial z} \right) + \left(r \mu \frac{\partial u^r}{\partial r}, \frac{\partial \phi^r}{\partial r} \right) \\ & + \left(\frac{1}{r} \mu u^r, \phi^r \right) - \left(r p, \frac{\partial \phi^r}{\partial r} \right) - (p, \phi^r) = 0 \end{aligned} \quad (6.15)$$

$$\begin{aligned} & \left(r \rho \left(u^z \frac{\partial \boldsymbol{\theta}}{\partial z} + u^r \frac{\partial \boldsymbol{\theta}}{\partial r} \right), \boldsymbol{\psi} \right) + \left(r \boldsymbol{\Pi} \boldsymbol{\Xi} \frac{\partial \boldsymbol{\theta}}{\partial z}, \frac{\partial \boldsymbol{\psi}}{\partial z} \right) + \left(r \boldsymbol{\Pi} \boldsymbol{\Xi} \frac{\partial \boldsymbol{\theta}}{\partial r}, \frac{\partial \boldsymbol{\psi}}{\partial r} \right) \\ & - (r \rho \boldsymbol{S}, \boldsymbol{\psi}) = 0 \end{aligned} \quad (6.16)$$

Agora, esta formulação fraca (6.13)-(6.16) pode ser reescrita na seguinte forma compacta:

$$A(\mathbf{U})(\Phi) = 0 \quad \forall \Phi \in V \times W \times L \quad (6.17)$$

onde A é a forma semi-linear associada a (6.13)-(6.16), $\mathbf{U} := \{\mathbf{u}, \boldsymbol{\theta}, p\} \in V \times W \times L$ e $\Phi := \{\phi, \boldsymbol{\psi}, \xi\} \in V \times W \times L$.

6.1.2 A formulação de Galerkin

Para a discretização do domínio, Ω é particionado em uma malha de elementos finitos Ω_h consistindo de quadriláteros abertos, os quais satisfazem a con-

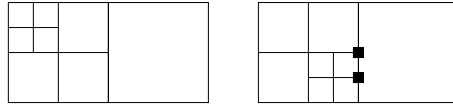


Figura 6.2: Esquerda: triangularização com três nodos *hanging*. Direita: triangularização inválida, múltiplos nodos *hanging* em um mesmo lado.

dição de regularidade, de forma que todos os ângulos internos são limitados entre 0 e π . Ainda mais, grandes razões de proporção entre células não são permitidas.

Refinamento de malha local é possível através da introdução de nodos *hanging*. Somente um nodo *hanging* por borda é permitido (veja a Figura 6.2 para exemplos de malhas válidas e inválidas com nodos *hanging*). Os graus de liberdade destes nodos *hanging* não são realmente graus de liberdade do sistema, ao invés, eles são calculados pela interpolação dos valores adjacentes. Todo elemento da malha $\kappa \in \Omega_h$ é criado pelo mapeamento bilinear do elemento referência $T_\kappa : \hat{\kappa} := (0, 1)^2 \rightarrow \kappa$ (veja, Figura 6.3). Então, o espaço contínuo por partes dos polinômios de r -ésima ordem em Ω_h é definido como

$$Q_h^{(r)} := \{\phi \in C(\Omega) : \phi|_\kappa \circ T_\kappa^{-1} \in \text{span}\{x^i y^j, 0 \leq i, j \leq r\}\}.$$

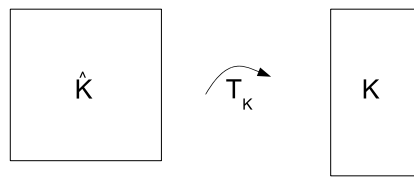


Figura 6.3: Mapeamento T_K da célula de referência \hat{K} para uma célula computacional K .

A formulação de Galerkin do problema (6.13)-(6.16) é, aqui, obtida usando elementos de mesma ordem para velocidade, variáveis de progresso e pressão, isto é:

$$\mathbf{u}_h \in V_h := [Q_h^{(r)}]^2 \subset V, \quad \boldsymbol{\theta}_h \in W_h := [Q_h^{(r)}]^{m_s} \subset W, \quad p_h \in L_h := Q_h^{(r)} \subset L.$$

o que leva as seguintes equações discretas:

$$\begin{aligned} & \left(r \left(\frac{\partial u_h^z}{\partial z} + \frac{\partial u_h^r}{\partial r} + \frac{1}{r} u_h^r \right), \xi_h \right) \\ & + \sum_i \left(r \mathcal{L}(\boldsymbol{\theta}_h)_i \left(u_h^z \frac{\partial \theta_{hi}}{\partial z} + u_h^r \frac{\partial \theta_{hi}}{\partial r} \right), \xi_h \right) = 0 \end{aligned} \quad (6.18)$$

$$\begin{aligned} & \left(r \rho \left(u_h^z \frac{\partial u_h^z}{\partial z} + u_h^r \frac{\partial u_h^z}{\partial r} \right), \phi_h^z \right) + \left(r \mu \frac{\partial u_h^z}{\partial z}, \frac{\partial \phi_h^z}{\partial z} \right) + \left(r \mu \frac{\partial u_h^z}{\partial r}, \frac{\partial \phi_h^z}{\partial r} \right) \\ & - \left(r p_h, \frac{\partial \phi_h^z}{\partial z} \right) - (r(\rho - \rho_0) g^z, \phi_h^z) = 0 \end{aligned} \quad (6.19)$$

$$\begin{aligned} & \left(r \rho \left(u_h^z \frac{\partial u_h^r}{\partial z} + u_h^r \frac{\partial u_h^r}{\partial r} \right), \phi_h^r \right) + \left(r \mu \frac{\partial u_h^r}{\partial z}, \frac{\partial \phi_h^r}{\partial z} \right) + \left(r \mu \frac{\partial u_h^r}{\partial r}, \frac{\partial \phi_h^r}{\partial r} \right) \\ & + \left(\frac{1}{r} \mu u_h^r, \phi_h^r \right) - \left(r p_h, \frac{\partial \phi_h^r}{\partial r} \right) - (p_h, \phi_h^r) = 0 \end{aligned} \quad (6.20)$$

$$\begin{aligned} & \left(r \rho \left(u_h^z \frac{\partial \boldsymbol{\theta}_h}{\partial z} + u_h^r \frac{\partial \boldsymbol{\theta}_h}{\partial r} \right), \boldsymbol{\psi}_h \right) + \left(r \boldsymbol{\Pi} \boldsymbol{\Xi} \frac{\partial \boldsymbol{\theta}_h}{\partial z}, \frac{\partial \boldsymbol{\psi}_h}{\partial z} \right) \\ & + \left(r \boldsymbol{\Pi} \boldsymbol{\Xi} \frac{\partial \boldsymbol{\theta}_h}{\partial r}, \frac{\partial \boldsymbol{\psi}_h}{\partial r} \right) - (r \rho \boldsymbol{S}(\boldsymbol{\theta}_h), \boldsymbol{\psi}_h) = 0 \end{aligned} \quad (6.21)$$

onde, $(\xi_h, \boldsymbol{\phi}_h, \boldsymbol{\psi}_h) \in L_h \times V_h \times W_h$. De forma compactada, tem-se:

$$A(\mathbf{U}_h)(\Phi_h) = 0, \quad \forall \Phi_h \in V_h \times W_h \times L_h. \quad (6.22)$$

Uma vez que elementos de mesma ordem não garante a condição *inf-sup* (veja [39]), a formulação discreta (6.18)-(6.21) é esperada ser instável. Para superar as instabilidades, pode-se adicionar termos estabilizadores à forma semi-linear (6.17). Ainda mais, os termos convectivos das equações da quantidade de movimento e das variáveis de progresso podem gerar oscilações espúrias se a malha não é suficientemente refinada. Na sequencia, discutimos e apresentamos soluções para tratar destas instabilidades.

6.2 Estabilização

Instabilidades numéricas podem ocorrer para número de Reynolds elevado. O operador $\boldsymbol{\beta} \cdot \nabla u$ é de primeira ordem, e a discretização de Galerkin corres-

pondente torna-se instável. Em volumes finitos e técnicas de diferenças finitas, estes termos são muitas vezes diferenciados por esquemas *upwind* (veja, por exemplo, [2, 72]). A técnica padrão de estabilização em elementos finitos é a *Streamline-diffusion* [98].

6.2.1 Técnica *Streamline-diffusion*

Por simplicidade, a técnica *streamline-diffusion* é, aqui, introduzida para a equação convectiva-difusiva:

$$\mathbf{a} \cdot \nabla u - \bar{\nu} \Delta u = f \quad (6.23)$$

com condições de fronteira de Neumann. A aproximação clássica de Galerkin para esta equação é dada por:

$$(\mathbf{a} \cdot \nabla u^h, \phi^h) + (\bar{\nu} \nabla u^h, \nabla \phi^h) = (f, \phi^h), \quad \forall \phi^h \in \mathcal{V}^h. \quad (6.24)$$

Esta formulação é instável para altos números de Péclet [98], o qual é definido por:

$$Pe = \frac{hU}{2\bar{\nu}} \quad (6.25)$$

onde, U é a velocidade de referência do sistema.

A ideia mais simples para superar este problema, é refinar a malha até que um Pe apropriado seja alcançado. Entretanto, para problemas de convecção dominante (por exemplo, problemas com altos números de Reynolds), uma malha muito refinada é requerida, o que aumenta consideravelmente os custos computacionais. Por exemplo, assume-se que $Pe < 1$ é necessário para obter-se uma formulação estável para (6.24) em um domínio bidimensional $\Omega = (0, 1) \times (0, 1)$, então as células devem satisfazer $h < 2\bar{\nu}/U$. Para $\bar{\nu} = 10^{-5}$ e $U > 1$, o que é muito provável para problemas realísticos, h deveria ser escolhido menor que 2×10^{-5} , por exemplo,

$h < \sqrt{2} \times 10^{-5}$. Neste caso, a malha uniforme bidimensional teria em torno de 10 bilhões de nodos, o que é inviável mesmo para problemas simples .

Outra possibilidade mais apropriada é de introduzir uma dissipação artificial $\delta\Delta u$, conforme:

$$(\mathbf{a} \cdot \nabla u^h, \phi^h) + ((\delta + \bar{\nu}) \nabla u^h, \nabla \phi^h) = (f, \phi^h), \quad \forall \phi^h \in \mathcal{V}^h. \quad (6.26)$$

onde, o parâmetro de estabilização δ deve ser escolhido apropriadamente.

O termo dissipativo $\delta\Delta u$, embora possa levar a uma formulação estável, introduz um erro de ordem h ($O(h)$), muito alto para muitos problemas como, por exemplo, cálculos de chamadas. Outra desvantagem desta formulação é que a difusão artificial é adicionada igualmente em todas as direções. Entretanto, observações têm mostrado que, para f suficientemente suave, dissipação artificial é necessária somente na direção do escoamento. i.e. na direção \mathbf{a} (veja, por exemplo, [98]). Reformulando (6.26) da seguinte forma:

$$(\mathbf{a} \cdot \nabla u^h, \phi^h) + (\bar{\nu} \nabla u^h, \nabla \phi^h) + (\bar{\nu} \mathbf{a} \cdot \nabla u^h, \mathbf{a} \cdot \nabla \phi^h) = (f, \phi^h), \quad \forall \phi^h \in \mathcal{V}^h \quad (6.27)$$

dissipação artificial é adicionada na direção do escoamento. Esta formulação é chamada de *streamline-upwind* (SU).

A formulação anterior introduz menos difusão *cross-wind* que a difusão artificial clássica (6.26), mas continua sendo uma perturbação de ordem h do problema original. Uma perturbação de menor ordem é obtida pelo método *streamline-diffusion*. Este método produz uma estabilização consistente com a formulação pela introdução de funções testes adicionais da forma $\delta \mathbf{a} \cdot \nabla \phi$. Para a equação (6.23) tem-se:

$$\begin{aligned} (\mathbf{a} \cdot \nabla u^h, \nabla \phi^h) + (\bar{\nu} \nabla u^h, \phi^h) + \sum_K \delta_K (\mathbf{a} \cdot \nabla u^h - \bar{\nu} \Delta u^h, \mathbf{a} \cdot \nabla \phi^h)_K \\ = (f, \phi^h) + \sum_K \delta_K (f, \mathbf{a} \cdot \nabla \phi^h), \quad \forall \phi^h \in \mathcal{V}^h \end{aligned} \quad (6.28)$$

onde, K denota o índice de cada elemento da discretização.

A dependência do parâmetro δ_K em relação ao tamanho h da célula é usualmente dada por:

$$\delta_K \propto \left(\frac{\|\mathbf{a}\|}{h} + \frac{\|\bar{\nu}\|}{h^2} \right)^{-1}, \quad (6.29)$$

a qual é motivada pela definição do número de Péclet. Ainda mais, esta formulação é consistente no sentido de que a solução forte da equação (6.23) satisfaz a equação discreta (6.28).

6.2.2 Estabilização da pressão

Instabilidade numérica pode ocorrer devido ao acoplamento velocidade-pressão das equações de Navier-Stokes. Para explicar o mecanismo principal de estabilização, a formulação fraca da equação de Stokes é, aqui, considerada:

$$\begin{aligned} (\nabla \cdot u, \nabla q) &= 0 \quad \forall q \in \mathcal{Q} \\ (\nabla u, \nabla v) - (p, \nabla \cdot v) &= (f, v) \quad \forall v \in \mathcal{V}. \end{aligned} \quad (6.30)$$

É bem conhecido que a discretização desta equação deve satisfazer a condição de Brezzi-Babuska (ou, inf-sup) [39] para ser estável, i.e.:

$$\inf_{p^h \in \mathcal{Q}^h} \sup_{\phi^h \in \mathcal{V}^h} \frac{(p^h, \nabla \cdot \phi^h)}{\|p^h\| \cdot \|\nabla \phi^h\|} \geq \gamma > 0 \quad (6.31)$$

ou, equivalentemente:

$$\forall p \in \mathcal{Q}^h \exists \phi \in \mathcal{V}^h : (p, \nabla \cdot \phi) \geq \gamma \|p\|^2 \text{ e } \|\nabla \phi\| \leq \|p\|. \quad (6.32)$$

Esta é uma condição de compatibilidade para o acoplamento velocidade-pressão. Em métodos de diferenças finitas esta condição é válida para malhas escalonadas. Em métodos de elementos finitos, alguns elementos especiais e/ou a combinação deles produzem uma formulação estável. Entretanto, para diminuir os custos computacionais, normalmente é preferível o uso de elementos simples (como, elementos quadriláteros) para os quais a condição “inf-sup” não é satisfeita.

Para superar esta dificuldade, a forma discreta bilinear pode ser modificada [98] pela adição de termos de mínimos quadrados em cada elemento. A formulação modificada lê-se:

$$(\nabla \cdot u^h, q) + c(p^h, u^h; q) = \sum_{\kappa \in \mathcal{T}} \alpha_\kappa (f, \nabla q)_\kappa \quad \forall q \in \mathcal{Q}^h, \quad (6.33)$$

com o termo de estabilização da pressão dado por:

$$c(p^h, u^h; q) = \sum_{\kappa \in \mathcal{T}} \alpha_\kappa (\Delta u^h + \nabla p^h, \nabla q)_\kappa \quad (6.34)$$

onde, $\alpha_K \propto h^2$. A condição modificada "inf-sup" para esta forma lê-se:

$$\inf_{p^h \in \mathcal{Q}^h} \sup_{\phi^h \in \mathcal{V}^h} \left\{ \frac{(p^h, \nabla \cdot \phi^h)}{\|p^h\| \cdot \|\nabla \phi^h\|} + \frac{c(p^h, u^h; q)}{\|p^h\|^2} \right\} \geq \gamma^2 > 0. \quad (6.35)$$

Esta forma leva a uma discretização estável para elementos isotrópicos.

6.2.3 Estabilização de mínimos quadrados para as equações N-S

Aqui, as equações incompressíveis de Navier-Stokes (N-S):

$$-\mu \Delta u + u \cdot \nabla u + \nabla p = f \quad (6.36)$$

$$\nabla \cdot u = 0 \quad (6.37)$$

em um domínio aberto Ω são consideradas. A bem conhecida aproximação de Galerkin para (6.36)-(6.37) lê-se:

$$a(v_h)(\Phi_h) = F(\Phi_h), \quad \Phi_h \in X_h \quad (6.38)$$

onde, $v_h = (u_h, p_h) \in X_h := V_h \times L_h$ e a forma semi-linear respectiva é dada por:

$$a(v_h)(\Phi_h) = (\mu \nabla u_h, \nabla \phi_h) + (u_h \cdot \nabla u_h, \phi_h) - (p_h, \nabla \cdot \phi_h) + (\nabla \cdot u_h, \xi), \quad (6.39)$$

onde, o funcional $F(\cdot)$ é dado por:

$$F(\Phi) := (f, \phi_h), \quad (6.40)$$

com $\Phi_h = (\phi_h, \xi_h) \in V_h \times L_h$.

Novamente, espaços de elementos finitos de mesma ordem podem levar a discretizações instáveis para as equações de N-S (6.36)-(6.37), devidas a convecção e o acoplamento da pressão. Unindo ambas as técnicas de estabilização discutidas acima, o método de estabilização dos mínimos quadrados de Galerkin (GLS, do termo inglês *Galerkin Least Square*) é obtido. Ou seja, uma formulação estável pode ser escrita modificando a equação discreta (6.38) como segue:

$$a(v_h)(\Phi_h) + s_{GLS}(v_h, \Phi_h) = F(\Phi_h) + F_{GLS}(\Phi_h) \quad (6.41)$$

onde,

$$\begin{aligned} s_{GLS}(v_h, \Phi_h) &= \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \delta_K (-\Delta u_h + u_h \cdot \nabla u_h + \nabla p_h, \\ &\quad - \Delta \phi_h + \phi_h \cdot \nabla \phi_h + \nabla \xi_h), \end{aligned} \quad (6.42)$$

$$F_{GLS}(\Phi_h) = \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \delta_K (f, -\Delta \phi_h + \phi_h \cdot \nabla \phi_h + \nabla \xi_h) \quad (6.43)$$

com $\delta_K \approx h_K^2$.

Esta discretização é totalmente consistente no sentido de que se v é a solução forte, então o termo adicional $f_{GLS}(\Phi) - s_{GLS}(v, \Phi)$ se anula para todo Φ . Embora estável, esta formulação tem muitas desvantagens. Ela introduz camadas limites nas soluções numéricas, as quais diminuem a precisão próxima as fronteiras. Ainda, derivadas de segunda ordem estão presentes nos termos de estabilização, o que aumenta os custos computacionais. Por fim, acoplamentos artificiais entre pressão e velocidade são introduzidos. A complexidade desta formulação aumenta ainda mais quando sistemas multicomponentes reativos são considerados. Neste caso, a formulação GLS introduz acoplamentos artificiais entre todas as espécies e o fluxo.

Na próxima seção, o Método de Projeção Local (*Local Projection Method*) é apresentado. Esta formulação é utilizada nas simulações realizadas neste trabalho.

6.2.4 Método de Projeção Local

Os problemas de estabilização, neste trabalho, são tratados pelo Método de Projeção Local (LPS, do inglês *Local Projection Method*) conforme proposto por Becker e Braack [7]. A maior vantagem desta técnica de estabilização sobre o clássico método SUPG proposto por Brooks e Hughes [20] é que essa é diagonal no sentido de que nenhum acoplamento entre diferentes componentes do sistema é adicionado ao conjunto de equações.

Definindo o operador π_h como o operador de flutuação dado por $\pi_h := \text{id} - i_{2h}$, onde $i_{2h} : Q_h^{(r)} \rightarrow Q_{2h}^{(r)}$ é a interpolação na malha grossa, a estabilização LPS para (6.22) é dada pela adição dos seguintes termos:

$$\begin{aligned} S_h(\mathbf{U}_h)(\Phi_h) &= \sum_{\kappa \in \Omega_h} (\alpha_\kappa \nabla \pi_h p_h, \nabla \pi_h \xi_h)_\kappa + \sum_{\kappa \in \Omega_h} (\delta_\kappa \mathbf{u}_h \cdot \nabla \pi_h \mathbf{u}_h, \mathbf{u}_h \cdot \nabla \pi_h \phi_h)_\kappa \\ &+ \sum_{\kappa \in \Omega_h} (\tau_\kappa \mathbf{u}_h \cdot \nabla \pi_h \boldsymbol{\theta}_h, \mathbf{u}_h \cdot \nabla \pi_h \psi_h)_\kappa. \end{aligned}$$

Os parâmetros α_κ , δ_κ e τ_κ dependem do número local de Péclet e são dados por:

$$\alpha_\kappa = \delta_\kappa = \tau_\kappa = \alpha_0 \left(\frac{\mu}{h_\kappa^2} + \frac{|\mathbf{u}_h|_{\kappa, \infty}}{h_\kappa} \right)^{-1}, \quad \alpha_0 \sim \frac{1}{2}.$$

O método LPS controla as flutuações da solução com respeito a malha grossa. Para maiores detalhes deste método no contexto de simulações de escoamentos reativos, o leitor é recomendado a [19]. A solução discreta $\mathbf{U}_h \in V_h \times W_h \times L_h$ é dada pelo problema variacional:

$$A(\mathbf{U}_h)(\Phi_h) + S_h(\mathbf{U}_h)(\Phi_h) = 0 \quad \forall \Phi_h \in V_h \times W_h \times L_h. \quad (6.44)$$

Deve-se notar que a estrutura do termo de estabilização S_h é muito simples. Somente acoplamentos (diagonais) das variáveis com suas respectivas funções testes são introduzidas, i.e., a estabilização não introduz acoplamentos entre variáveis. Em adição, nenhum termo de derivada elevada é introduzido. Embora, o

esquema LPS não seja totalmente consistente, o erro adicional é da mesma ordem do da discretização.

Neste ponto, tem-se construído a formulação discreta das equações governantes projetadas (5.22)-(5.24). Na sequência, o *solver* numérico utilizado é explicado.

6.3 *Solver*

A solução estacionária da formulação discreta estabilizada (6.44) é buscada aplicando-se um método de Newton similar. O sistema linear que surge a cada passo Newton é resolvido por um eficiente *solver* GMRES, condicionado por um método multigrid geométrico. Paralelização, refinamento de malha local e adaptatividade são aplicados para aumentar a performance, eficiência e precisão.

6.3.1 Método de Newton Aplicado

O sistema não-linear de equações é resolvido por uma iteração quase-Newton. A matriz de iteração deve ser uma boa aproximação para a Jacobiana do sistema e, ao mesmo tempo, deve ser computacionalmente barata com respeito a sua montagem e armazenamento.

O número de equações é $n_{\text{eq}} = 3 + m_s$ e as variáveis discretas são nomeadas, conforme: p^h , \mathbf{u}^h e $\boldsymbol{\theta}^h$. Elas são expandidas nas funções bases $\phi_i \in \mathcal{V}^h$, de maneira usual:

$$p^h = \sum_i \hat{p}_i \phi_i, \quad \mathbf{u}^h = \sum_i \hat{\mathbf{u}}_i \phi_i, \quad \boldsymbol{\theta}^h = \sum_i \hat{\boldsymbol{\theta}}_i \phi_i \quad (6.45)$$

onde, \hat{p}_i , $\hat{\mathbf{u}}_i$ e $\hat{\boldsymbol{\theta}}_i$ denotam os graus de liberdade da pressão, velocidade e das coordenadas da tabela (as variáveis de progresso), respectivamente.

Seja A a matriz Jacobiana do sistema não-linear. O sistema linear correspondente, o qual deve ser resolvido durante a iteração Newton, têm a forma $Ax = b$, onde b denota o resíduo não-linear e x a correção.

Seja $A = (A_{ij})$, onde cada A_{ij} denota um bloco de $n \times n$ entradas. O vetor de todas as variáveis $x = [\hat{p}_i, \hat{u}_i, \hat{\theta}_i]$ é armazenado por nodos. A estrutura da matriz $A_{i,j}$ é como segue:

$$A_{i,j} = \begin{bmatrix} B_{pp} & B_{pu_z} & B_{pu_r} & B_{p\theta_1} & \cdots & B_{p\theta_{m_s}} \\ B_{u_z p} & B_{u_z u_z} & B_{u_z u_r} & B_{u_z \theta_1} & \cdots & B_{u_z \theta_{m_s}} \\ B_{u_r p} & B_{u_r u_z} & B_{u_r u_r} & B_{u_r \theta_1} & \cdots & B_{u_r \theta_{m_s}} \\ 0 & B_{\theta_1 u_z} & B_{\theta_2 u_r} & B_{\theta_1 \theta_1} & \cdots & B_{\theta_1 \theta_{m_s}} \end{bmatrix}.$$

Seja ϕ e ψ as funções de teste. O bloco B_{pp} tem apenas a contribuição do termo de estabilização:

$$B_{pp} = \sum_K \delta_K \left[\left(\frac{\partial \pi \phi}{\partial z}, \frac{\partial \pi \psi}{\partial z} \right)_K + \left(\frac{\partial \pi \phi}{\partial r}, \frac{\partial \pi \psi}{\partial r} \right)_K \right].$$

O bloco $B_{pu_z} = D_{pu_z} + K_{pu_r}$ é a soma do operador divergente D e das influências das variações da massa específica K , definidas por:

$$D_{pu_z} = \left(\frac{\partial \phi}{\partial z}, \psi \right),$$

$$K_{pu_r} = \left(\phi \sum_j^{m_s} \mathcal{L}_j(\boldsymbol{\theta}) \frac{\partial \theta_j}{z}, \psi \right),$$

e, pouco diferente para o bloco $B_{pu_r} = D_{pu_r} + K_{pu_r}$:

$$D_{pu_r} = \left(\frac{\partial \phi}{\partial r} + \frac{1}{r} \phi, \psi \right),$$

$$K_{pu_r} = \left(\phi \sum_j^{m_s} \mathcal{L}_j(\boldsymbol{\theta}) \frac{\partial \theta_j}{\partial r}, \psi \right).$$

Variações de pressão devida as variações da massa específica são levadas em conta pelo bloco $B_{p\theta_j} = D_j + N_j$, o qual pode ser dividido em seus componentes

diagonais D_j e não-diagonais N_j :

$$D_j = \left(\mathcal{L}_j(\boldsymbol{\theta}) \left(u_z \frac{\partial \phi}{\partial z} + u_r \frac{\partial \phi}{\partial r} \right), \psi \right)$$

$$N_j = \sum_i^{m_s} \left(\frac{\partial \mathcal{L}_j(\boldsymbol{\theta})}{\partial \theta_i} \left(u_z \frac{\partial \theta_j}{\partial z} + u_r \frac{\partial \theta_j}{\partial r} \right), \psi \right)$$

O gradiente de pressão hidrodinâmico está presente na equação do componente de velocidade u_z , gerando o bloco correspondente:

$$B_{u_z p} = - \left(r \phi, \frac{\partial \psi}{\partial z} \right).$$

O bloco $B_{u_z u_z} = C_{u_z u_z} + D_{u_z u_z}$, onde:

$$C_{u_z u_z} = \left(r \rho \left(\phi \frac{\partial u_z}{\partial z} + u_z \frac{\partial \phi}{\partial z} + u_r \frac{\partial \phi}{\partial r} \right), \psi \right)$$

$$D_{u_z u_z} = \left(r \mu \frac{\partial \phi}{\partial z}, \frac{\partial \psi}{\partial z} \right) + \left(r \mu \frac{\partial \phi}{\partial r}, \frac{\partial \psi}{\partial r} \right).$$

O bloco $B_{u_z u_r}$ fornece a contribuição devida a convecção:

$$B_{u_z u_r} = \left(r \rho \phi \frac{\partial u_z}{\partial r}, \psi \right).$$

A equação da componente da velocidade u_z está acoplada com os processos químicos pela massa específica e variações da viscosidade, as quais são propriedades da REDIM, i.e. $\rho = \rho(\boldsymbol{\theta})$ e $\mu = \mu(\boldsymbol{\theta})$. Portanto, o bloco $B_{u_z \theta_j} = C_{u_z \theta_j} + D_{u_z \theta_j} + G_{u_z \theta_j}$ com:

$$C_{u_z \theta_j} = \left(r \frac{\partial \rho}{\partial \theta_j} \phi \left(u_z \frac{\partial u_z}{\partial z} + u_r \frac{\partial u_z}{\partial r} \right), \psi \right)$$

$$D_{u_z \theta_j} = \left(r \frac{\partial \mu}{\partial \theta_j} \phi \frac{\partial u_z}{\partial z}, \frac{\partial \psi}{\partial z} \right) + \left(r \frac{\partial \mu}{\partial \theta_j} \phi \frac{\partial u_z}{\partial r}, \frac{\partial \psi}{\partial r} \right)$$

$$G_{u_z \theta_j} = - \left(r \frac{\partial \rho}{\partial \theta_j} \phi g_z, \psi \right)$$

Blocos similares são encontrados para a equação da componente da velocidade u_r com algumas diferenças devida a hipótese de axisimetria. A contribuição

da pressão fornece:

$$B_{u_r p} = - \left(r\phi, \frac{\partial\psi}{\partial r} \right) - (p, \psi).$$

Na formulação fraca (6.13)-(6.16), $B_{u_r u_z}$ tem contribuição do termo convectivo, i.e.:

$$B_{u_r u_z} = \left(r\rho\phi \frac{\partial u_r}{\partial z}, \psi \right).$$

O bloco diagonal $B_{u_r u_r}$ pode ser dividido de maneira que $B_{u_r u_r} = C_{u_z u_z} + D_{u_r u_r}$, onde:

$$\begin{aligned} C_{u_r u_r} &= \left(r\rho \left(u_z \frac{\partial\phi}{\partial z} + \phi \frac{\partial u_r}{\partial r} + u_r \frac{\partial\phi}{\partial r} \right), \psi \right) \\ D_{u_r u_r} &= \left(r\mu \frac{\partial\phi}{\partial z}, \frac{\partial\psi}{\partial z} \right) + \left(r\mu \frac{\partial\phi}{\partial r}, \frac{\partial\psi}{\partial r} \right) + \left(\frac{1}{r}\mu\phi, \psi \right). \end{aligned}$$

E, novamente, os fenômenos de mistura e reação alteram a quantidade de movimento, o que é dado pelo bloco $B_{u_r \theta_j} = C_{u_r \theta_j} + D_{u_r \theta_j}$, onde:

$$\begin{aligned} C_{u_r \theta_j} &= \left(r \frac{\partial\rho}{\partial\theta_j} \phi \left(u_z \frac{\partial u_r}{\partial z} + u_r \frac{\partial u_r}{\partial r} \right), \psi \right) \\ D_{u_r \theta_j} &= \left(r \frac{\partial\mu}{\partial\theta_j} \phi \frac{\partial u_r}{\partial z}, \frac{\partial\psi}{\partial z} \right) + \left(r \frac{\partial\mu}{\partial\theta_j} \phi \frac{\partial u_r}{\partial r}, \frac{\partial\psi}{\partial r} \right) + \left(\frac{1}{r} \frac{\partial\mu}{\partial\theta_j} \phi u_r, \psi \right). \end{aligned}$$

As últimas linhas de blocos da matriz Jacobiana A são devidas as equações das variáveis de progresso da REDIM. Não existe um acoplamento direto com a pressão e, assim, $B_{\theta_j p} = 0$. Dos termos convectivos, tem-se:

$$\begin{aligned} B_{\theta_j u_z} &= \left(r\rho\phi \frac{\partial\theta_j}{\partial z}, \psi \right) \\ B_{\theta_j u_r} &= \left(r\rho\phi \frac{\partial\theta_j}{\partial r}, \psi \right). \end{aligned}$$

O bloco mais complexo da matriz Jacobiana é $B_{\theta_j \theta_i} = C_{\theta_j \theta_i} + D_{\theta_j \theta_i} + S_{\theta_j \theta_i}$, o qual pode ser melhor explicado observando dois casos. Primeiro, se $j = i$,

então:

$$\begin{aligned}
C_{\theta_j\theta_j} &= \left(r \frac{\partial \rho}{\partial \theta_j} \phi \left(u_z \frac{\partial \theta_j}{\partial z} + u_r \frac{\partial \theta_j}{\partial r} \right), \psi \right) + \left(r \rho \left(u_z \frac{\partial \phi}{\partial z} + u_r \frac{\partial \phi}{\partial r} \right), \psi \right) \\
D_{\theta_j\theta_j} &= \left(r \frac{\partial}{\partial \theta_j} (\Pi \Xi) \phi \frac{\partial \theta}{\partial z}, \frac{\partial \psi}{\partial z} \right) + \left(r \frac{\partial}{\partial \theta_j} (\Pi \Xi) \phi \frac{\partial \theta}{\partial r}, \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) \\
&\quad + \left(r \Pi \Xi \frac{\partial \theta}{\partial \theta_j} \frac{\partial \phi}{\partial z}, \frac{\partial \psi}{\partial z} \right) + \left(r \Pi \Xi \frac{\partial \theta}{\partial \theta_j} \frac{\partial \phi}{\partial r}, \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) \\
S_{\theta_j\theta_j} &= - \left(r \frac{\partial \rho}{\partial \theta_j} \phi S, \psi \right) - \left(r \rho \frac{\partial S_j}{\partial \theta_j} \phi, \psi \right).
\end{aligned}$$

Os blocos não-diagonais $B_{\theta_j\theta_i} = C_{\theta_j\theta_i} + D_{\theta_j\theta_i} + S_{\theta_j\theta_i}$ com $i \neq j$ são dados por:

$$\begin{aligned}
C_{\theta_j\theta_i} &= \left(r \frac{\partial \rho}{\partial \theta_i} \phi \left(u_z \frac{\partial \theta_j}{\partial z} + u_r \frac{\partial \theta_j}{\partial r} \right), \psi \right) \\
D_{\theta_j\theta_i} &= \left(r \frac{\partial}{\partial \theta_i} (\Pi \Xi) \frac{\partial \theta}{\partial \theta_i} \phi \frac{\partial \theta}{\partial z}, \frac{\partial \psi}{\partial z} \right) + \left(r \frac{\partial}{\partial \theta_i} (\Pi \Xi) \phi \frac{\partial \theta}{\partial r}, \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) \\
&\quad + \left(r \Pi \Xi \frac{\partial \theta}{\partial \theta_i} \frac{\partial \phi}{\partial z}, \frac{\partial \psi}{\partial z} \right) + \left(r \Pi \Xi \frac{\partial \theta}{\partial \theta_i} \frac{\partial \phi}{\partial r}, \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) \\
S_{\theta_j\theta_i} &= \left(r \frac{\partial \rho}{\partial \theta_i} \phi S_j, \psi \right) + \left(r \rho \frac{\partial S_j}{\partial \theta_i} \phi, \psi \right).
\end{aligned}$$

6.3.2 O método multigrid

A ideia principal da iteração multigrid é de reduzir rapidamente os erros de alta frequência através de uma técnica de arnotecimento (do inglês, *smoothing*) nas malhas finas e reduzir os erros de baixa frequência nas malhas grossas (*coarse-grid correction*).

Sejam V um espaço vetorial de dimensão finita, $A : V \rightarrow V$ a matriz do problema linear $Ax = b$, $b \in V$ e B a ação do multigrid. Da teoria, sabe-se que os métodos multigrid como pré-condicionadores requerem menos hipóteses restritivas que como *solvers*. No primeiro caso, é suficiente que BA seja limitada superiormente, enquanto que no segundo caso, os autovalores da matriz $M = I - BA$ devem ser uniformemente limitados por uma constante $C < 1$.

Portanto, o código Gascoigne usa métodos multigrid como pré-condicionadores para construir um robusto esquema numérico. Como *solver* o Método Generalizado de Mínimo Resíduo (GMRES, do inglês *Generalized Minimal Residual Method*) é usado para resolver o sistema pré-condicionado:

$$BAx = Bb \quad (6.46)$$

até uma precisão desejada.

Seja S_l o operador de amortecimento no nível l . A iteração multigrid $MG(l, z_0, b)$ neste nível com solução inicial z_0 e com m_1 passos de pré-amortecimento e m_2 passos de pós-amortecimento é recursivamente definido como segue:

- se $l = 1$ resolve o problema exato: $MG(l, z_0, b) := A^{-1}b$
- senão, resolve o problema aproximado:
 1. pré-amortecer m_1 vezes: $z_1 := S_l^{m_1} z_0$
 2. calcula o resíduo no nível l : $r_l := b - A_k z_1$
 3. restringe o resíduo a malha grossa: $r_{l-1} := R_l r_l$
 4. faz a correção na malha grossa com a solução inicial $q_0 = 0$:

$$q := MG(l-1, q_0, r_{l-1}) \quad (6.47)$$

5. prolonga: $z_2 := z_1 + P_{l-1} q$
6. pós-amortecer m_2 vezes: $MG(l, z_0, b) := S_l^{m_2} z_2$

O operador $R_l : V_l \rightarrow V_{l-1}$ denota o operador de restrição do nível l para o nível $l-1$ e, $P_{l-1} V_{l-1} \rightarrow V_l$ o operador de prolongamento. Estes operadores são naturalmente definidos nas malhas de elementos finitos com refinamento local. $P_{l-1} P_{l-1}$ é a injeção $V_{l-1} \subset V_l$ e R_l a projeção L^2 .

6.3.3 O operador de amortecimento

O esquema de amortecimento S_l (operador de amortecimento) deve ser escolhido de forma apropriada a obter-se um algoritmo multigrid robusto e eficiente. A idéia não é de reduzir o erro global, mas de amortecer suficientemente o erro de maneira a tornar possível uma aproximação precisa na malha grossa.

A decomposição bloco-LU incompleta é usada, aqui, como técnica de amortecimento do erro no algoritmo multigrid. A bloco-ILU tem sido reportada ser mais robusta que a clássica ILU, a qual tem sido eficientemente utilizada em problemas de dinâmica de fluídos.

Seja A a matriz Jacobiana computada. A idéia é computar uma fatoração da forma:

$$A = LU + R, \quad (6.48)$$

onde, L é uma matriz triangular inferior e U uma matriz triangular superior. Enquanto, uma decomposição LU completa produz, em geral, matrizes L e U densas, a versão incompleta produz matrizes L e U com a mesma estrutura de A . Portanto, uma matriz resto R aparece, a qual é negligenciada nas computações.

Ainda, ao invés de computar uma aproximação da matriz inversa de A , é calculada a decomposição incompleta LU de $A_w = A + wD$ para um valor real $w \in \mathbb{R}$. A matriz $D = (d_i)$ é uma matriz diagonal com blocos d_i . Estes blocos também tem estrutura diagonal com n componentes. A componente c do bloco é definida por:

$$(d_i)_c = \sum_{j \neq i} |(a_{ij})_{cc}|, \quad \text{for } i = 1, \dots, n, \quad (6.49)$$

onde, $(a_{ij})_{cc}$ é a componente c no bloco (i, j) de A na diagonal. Nos testes numéricos, a escolha $0.1 \leq w \leq 0.2$ tem levado a um procedimento robusto. Especialmente para

a equação da pressão, esta modificação é essencial para estabilizar a decomposição, A escolha $w > 0$ corresponde a uma sobre-relaxação da diagonal.

6.4 Adaptatividade

A maior parte da dinâmica do sistema ocorre na fina frente de chama. Assim, uma malha muito refinada nesta zona é necessária para refletir corretamente o comportamento da chama, enquanto que longe da frente da chama a discretização não precisa ser tão acurada. Muitas vezes, uma solução estacionária não é encontrada se a malha não for suficientemente refinada. O emprego de malhas estruturadas e globalmente refinadas levam a altos custos computacionais.

Uma alternativa é o uso de malhas adaptativas baseadas na norma da energia, o que é apropriado para capturar a frente da chama. O processo de adaptação deve ser iterativo por estimativas de erro *a posteriori*, uma vez que a posição da frente da chama não é conhecido *a priori*.

Muitas vezes, está-se interessado em algum funcional específico da solução. Por exemplo, a média das concentrações de algumas espécies ao longo de uma linha da chama, como obtido por medidas experimentais em espectroscopia a *laser*. Outro exemplo é a altura de acoplagem (*lift-off height*) da chama, i.e. a distância da chama ao injetor no caso das chamas não acopladas.

Aqui, o método do peso residual dual (DWR, do inglês *dual weighted residual method*) como proposto por Becker e Rannacher [9] é utilizado para gerar malhas eficientes. Este método pode ser resumido da seguinte forma: seja $J(\cdot)$ um dado funcional, por exemplo

$$J(\mathbf{U}_h) = \int_S c_{\text{species}} ds.$$

Então, uma representação do erro $J(\mathbf{U}) - J(\mathbf{U}_h)$ é obtida em termos das expressões residuais (veja [9]):

$$J(\mathbf{U}) - J(\mathbf{U}_h) \sim \frac{1}{2}\rho(\mathbf{U}_h)(\mathbf{Z} - i_h\mathbf{Z}) + \frac{1}{2}\rho^*(\mathbf{U}_h, \mathbf{Z}_h)(\mathbf{U} - i_h\mathbf{U}), \quad (6.50)$$

onde, ρ e ρ^* são os resíduos da equação e do problema adjunto:

$$\begin{aligned} \rho(\mathbf{U}_h)(\Phi) &= F(\Phi) - A(\mathbf{U}_h)(\Phi) - S_h(\mathbf{U}_h)(\Phi) \\ \rho^*(\mathbf{U}_h, \mathbf{Z}_h)(\Phi) &= J'(\mathbf{U}_h)(\Phi) - A'(\mathbf{U}_h)(\Phi, \mathbf{Z}_h). \end{aligned}$$

A solução adjunta $\mathbf{Z}_h \in V_h \times W_h \times L_h$ é solução da equação linear adjunta:

$$A'(\mathbf{U}_h)(\Phi, \mathbf{Z}_h) = J'(\mathbf{U}_h)(\Phi) \quad \forall \Phi \in V_h \times W_h \times L_h. \quad (6.51)$$

A solução adjunta \mathbf{Z}_h de (6.51) pode ser interpretada como sensibilidades da solução \mathbf{U}_h com respeito ao funcional $J(\cdot)$. Usada como pesos na estimativa de erro (6.50), ela revela áreas de influência do erro. Enquanto, estimativas baseadas na norma da energia produzem malhas refinadas na frente da chama, o método DWR é capaz de encontrar malhas mais eficientes com menos pontos computacionais.

O algoritmo adaptativo segue: dada uma triangularização inicial do domínio Ω_h , tem-se a iteração:

1. Resolver o problema

$$A(\mathbf{U}_h)(\Phi) + S_h(\mathbf{U}_h)(\Phi) = F(\Phi) \quad \forall \Phi \in V_h \times W_h \times L_h$$

2. Resolver o problema adjunto linear

$$A'(\mathbf{U}_h)(\Phi, \mathbf{Z}_h) = J'(\Phi) \quad \forall \Phi \in V_h \times W_h \times L_h$$

3. Estimar o erro

$$\eta_h = \frac{1}{2}\rho(\mathbf{U}_h)(\mathbf{Z} - i_h\mathbf{Z}) + \frac{1}{2}\rho^*(\mathbf{U}_h, \mathbf{Z}_h)(\mathbf{U} - i_h\mathbf{U})$$

4. Adaptar a malha usando a estimativa de erro

$$\Omega_h \xrightarrow{m_h} \Omega_{h'}$$

5. Continuar com $\Omega_{h'}$

No passo 4., aproximadamente 30% das células associadas as maiores estimativas do erro são refinadas. Note, que o esforço adicional de resolver o problema adjunto é pequeno, uma vez este problema é sempre linear e a matriz do sistema é apenas a transposta da matriz do sistema de equações original. Aqui, usa-se a última Jacobiana que já esta computada, o que reduz o tempo computacional.

6.5 Esquema pseudo-transiente

Neste trabalho, busca-se a solução estacionária. A aproximação numérica de tal solução é usualmente difícil de ser obtida diretamente. Isto se deve principalmente ao fato de não se conhecer *a priori* a localização da frente da chama, o qual deve ser apropriadamente calculado para se obter uma boa estimativa da solução. Ou seja, sem se conhecer a solução do sistema, não se pode gerar uma malha apropriada de discretização. Para se tratar deste dilema, usualmente se aplicam esquemas de passos temporais, os quais permitem calcular estimativas iniciais da solução. Assim, ao invés do sistema (6.44), busca-se resolver, primeiramente, a iteração $\mathbf{U}_h^n := (\mathbf{u}_h^n, \boldsymbol{\theta}_h^n, p_h^n)$, com $n \geq 1$ e

$$\frac{1}{\delta_n}(\mathbf{u}_h^n - \mathbf{u}_h^{n-1}, \phi) + \frac{1}{\delta_n}(\boldsymbol{\theta}_h^n - \boldsymbol{\theta}_h^{n-1}, \psi) + A(\mathbf{U}_h^n)(\Phi) + S_h(\mathbf{U}_h^n)(\Phi) = 0 \quad \forall \Phi \in V_h \times W_h \times L_h.$$

Aqui, $\delta_n > 0$ é o tamanho do pseudo-passo temporal. Por simplicidade, o subscrito n é negligenciado, uma vez que o problema é estacionário. Simplesmente, denota-se por \mathbf{U}_h a solução no tempo t_n e por $\bar{\mathbf{U}}_h$ a solução obtida no tempo t_{n-1} . O passo de tempo é denotado por δ . A equação não-linear é resolvida pelo método

quase-Newton descrito anteriormente com a solução inicial $\mathbf{U}_h^{(0)}$. Assim, com $\delta\mathbf{U}_h := \mathbf{U}_h^{(i)} - \mathbf{U}_h^{(i-1)}$ resolve-se

$$\begin{aligned} \frac{1}{\delta}(\delta\mathbf{u}_h, \phi) + \frac{1}{\delta}(\delta\boldsymbol{\theta}_h, \phi) + A'(\mathbf{U}_h^{(i-1)})(\delta\mathbf{U}_h, \Phi) + S_h(\delta\mathbf{U}_h)(\Phi) &= \frac{1}{\delta}(\bar{\mathbf{u}}_h, \phi) + \frac{1}{\delta}(\bar{\boldsymbol{\theta}}_h, \phi) \\ - \frac{1}{\delta}(\mathbf{u}_h^{(i-1)}, \phi) - \frac{1}{\delta}(\boldsymbol{\theta}_h^{(i-1)}, \phi) - A(\mathbf{U}_h^{(i-1)})(\Phi) - S_h(\mathbf{U}_h^{(i-1)})(\Phi) &\quad \forall \Phi. \end{aligned}$$

Aqui, $A'(\cdot)(\cdot, \cdot)$ é a derivada direcional da forma semi-linear $A(\cdot)(\cdot)$, a qual é definida por:

$$A'(\mathbf{U}_h)(\delta\mathbf{U}_h, \Phi) := \left. \frac{d}{ds} A(\mathbf{U}_h + s\delta\mathbf{U}_h)(\Phi) \right|_{s=0}.$$

Isso mostra, que as partes não-lineares dos termos de estabilização $S_h(\cdot)(\cdot)$ podem ser negligenciados na Jacobiana do sistema sem alterar significativamente a taxa de convergência das iterações de Newton. Todas estas derivadas são calculadas analiticamente.

Resolver os problemas lineares é frequentemente a tarefa numérica mais difícil. A característica de ponto de sela das equações de Navie-Stokes juntamente com o transporte difusão-reação do sistema reativo gera um problema rígido. Devido a fina frente da chama, o problema contém altas diferenças de escala. Isto ressalta a importância do pré-condicionamento multigrid. Ainda, uma vez que elementos finitos de mesma ordem são utilizados para todas as componentes do sistema (velocidade, pressão e variáveis de progresso), todos os graus de liberdade estão situados nos nodos da malha $\xi_i \in \Omega_h$. Então, pode-se eficientemente armazenar os dados no sentido de blocos locais, conforme:

$$\mathbf{U}_h := \underbrace{(p_1 \mathbf{u}_1 \boldsymbol{\theta}_1)}_{x_1} \underbrace{p_2 \mathbf{u}_2 \boldsymbol{\theta}_2}_{x_2} \dots \underbrace{p_N \mathbf{u}_N \boldsymbol{\theta}_N}_{x_N}.$$

Logo, se N é o número de variáveis em cada componente, este é também o número de nodos da malha. Então, a matriz do sistema \mathbf{A} é vista como uma matriz de blocos:

$$\mathbf{A} := (a_{ij})_{i,j=1}^N, \quad a_{ij} \in \mathbb{R}^{(3+m_s) \times (3+m_s)}.$$

Para acelerar a solução do sistema, todos os métodos são calculados em paralelo usando sistemas de memória compartilhada. Veja [79] para mais detalhes sobre a paralelização. A triangularização em elementos finitos e todos os dados numéricos são distribuídos de maneira a obter a mínima sobreposição possível entre os processadores. O esquema de solução implementado gera uma taxa de convergência independente da malha e mostra boa eficiência de paralelização dos problemas considerados.

7 SIMULAÇÃO NUMÉRICA USANDO REDIM

Os resultados numéricos são, agora, discutidos afim de analisar a modelagem de chamas difusivas laminares usando química reduzida automaticamente pela técnica REDIM. As diferenças entre 1D-REDIM e 2D-REDIM são discutidas e os resultados são comparados com dados experimentais e de simulação numérica detalhada, os quais foram apresentados previamente em [11].

A estratégia numérica de solução foi de, primeiramente, encontrar a solução estacionária da chama laminar axisimétrica usando 1D-REDIM. Aqui, refinamento de malha local é requerida para se construir uma malha inicial apropriada. Esta solução foi, então, utilizada como solução inicial do modelo 2D-REDIM. Finalmente, a precisão da solução foi aumentada por sucessivos refinamentos adaptativos de malha.

A adaptatividade de malha serviu, assim, dois propósitos: adicionar estabilidade ao processo numérico de forma eficiente, permitindo encontrar uma solução estacionária em malhas “grossas” e adicionar precisão a solução melhorando a resolução da malha nas regiões de interesse.

7.1 Definição do problema

A chama considerada é uma chama laminar, com escoamento não pré-misturado de metano diluído com nitrogênio e ar, a pressão atmosférica, do tipo Bunsen axisimétrica. Dois tubos concêntricos e uma zona morta configuram o combustor, o qual produz a chama não-confinada. O escoamento de metano misturado com nitrogênio (65% CH₄ + 35% N₂) é injetado por um tubo interno (*primary inlet*),

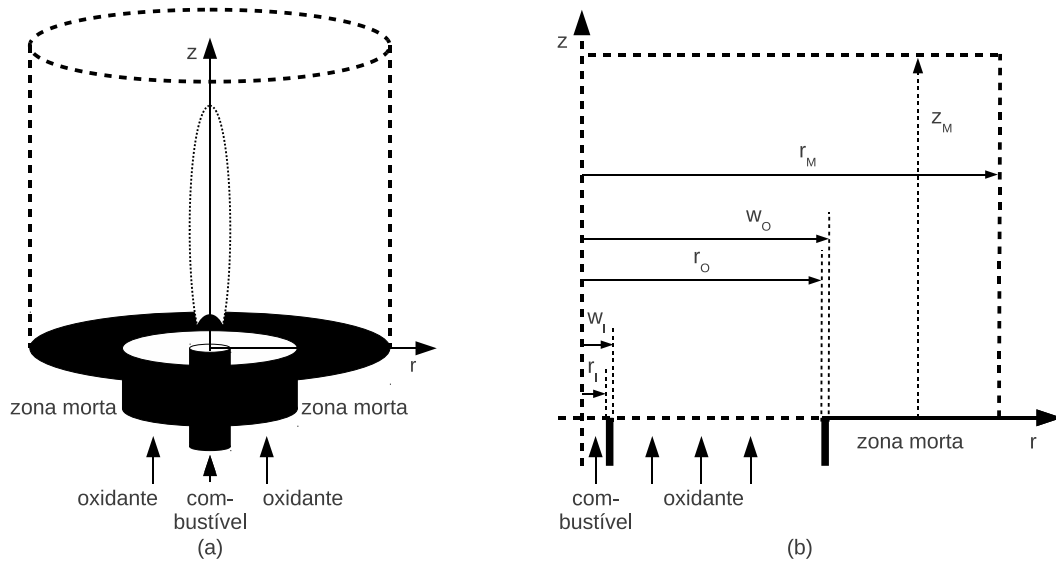


Figura 7.1: Representação esquemática do combustor (a) e do domínio computacional (b).

enquanto o escoamento de ar (21% O_2 + 79% N_2) é injetado por um tubo externo concêntrico (*secondary inlet*).

Os estudos numéricos foram realizados considerando as características do combustor definidas em [11]. Outros dados experimentais e estudos numéricos podem ser encontrados para este combustor (veja, por exemplo, [12, 65]), o que torna este um apropriado caso de teste. Aqui, uma breve descrição do combustor é apresentada (veja Figure 7.1 para uma representação esquemática).

Combustível flui de um tubo não-resfriado de raio interno $r_I = 0.2$ cm (espessura da parede $w_I = 0.038$ cm) e ar é injetado através da região anular definida por este tubo e um cilíndrico concêntrico de raio $r_O = 2.5$ cm. Uma zona morta com ar em repouso estende-se de $r = r_O$ a $r_M = 5$ cm. O escoamento de combustível interno é considerado completamente desenvolvido com velocidade axial média de $\bar{v}_{z,I} = 35$ cm/s e taxa de fluxo igual a 4.44 cm³/s. Nas paredes do jato interior, todas as velocidades são nulas. Um perfil uniforme é assumido para o fluxo de entrada de ar com velocidade $v_{z,O} = 35$ cm/s e taxa de fluxo igual a 693 cm³/s. A configuração

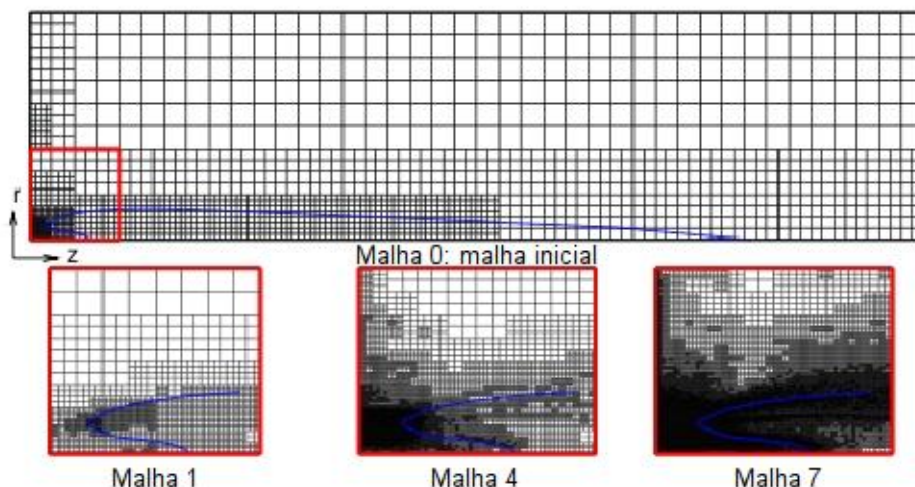


Figura 7.2: Malha inicial e adaptatividade.

plug-flow é garantida nos estudos experimentais pelo uso de uma placa perfurada do tipo *honeycomb* (tamanho da célula de 0.8–mm) colocada na saída do oxidante. Nas paredes externas e na zona morta velocidades nulas são assumidas.

O mecanismo químico GRI versão 3.0 [83] foi utilizado. Ele compreende de 53 espécies e 325 reações reversíveis. Todas as propriedades termodinâmicas, químicas e de transporte detalhado foram calculados usando o código HOMREA [63].

7.2 Malha inicial e adaptatividade

A malha inicial é uma malha localmente refinada que consiste de 2007 pontos (veja Figura 7.2). A menor célula está localizada na interface entre a saída de combustível e de oxidante e tem dimensões $\Delta z = \Delta r = 1.5625 \times 10^{-2}$ cm. A maior célula está localizada na fronteira de saída e tem dimensões $\Delta z = \Delta r = 5.0 \times 10^{-1}$ cm. O uso de tal malha localmente refinada evita anisotropia, a qual pode gerar instabilidades numéricas.

A malha inicial foi utilizada para se encontrar uma primeira aproximação da solução estacionária da chama laminar usando o modelo 1D-REDIM. Então, sucessivas malhas adaptativas construídas usando o método DWR com o funcional:

$$J_{N_2}(U) = \int_{\Omega} \phi_{N_2} dx \quad (7.1)$$

foram utilizadas para aumentar a precisão. Este funcional é uma escolha natural, pois ϕ_{N_2} é a única coordenada local da 1D-REDIM.

Uma vez que o modelo 1D-REDIM não foi capaz de descrever o conhecido fenômeno de ancoragem da chama (*lift-off phenomenon*, veja a Subseção 7.3 para maiores detalhes), a malha adaptativa gerada na solução do modelo 1D-REDIM não se mostrou apropriada para o modelo 2D-REDIM. Assim, escolheu-se utilizar a solução estacionária do 1D-REDIM na malha inicial como solução inicial para o modelo 2D-REDIM.

Aqui, não foi possível encontrar uma solução estacionária na malha inicial. Isso se deve, principalmente, pelo fato de que o modelo 2D-REDIM aumenta consideravelmente a dinâmica química, o que aumenta a rigidez do problema. Ainda mais, a menor célula nesta malha tem um diâmetro de 2.21×10^{-1} mm, a qual é maior que a espessura típica das chamas de metano/ar (aproximadamente de 1.75×10^{-1} mm [74]). Agora, observou-se que após alguns pseudo-passos temporais a chama desacopla dos injetores. Assim, quando a zona de ancoragem se mostrou clara, o processo de adaptatividade da malha foi iniciado. Diferentemente do caso unidimensional, o esquema de adaptatividade foi baseado no funcional:

$$J_{CO_2}(U) = \int_{\Omega} \phi_{CO_2} dx. \quad (7.2)$$

Este funcional mostrou-se ser mais apropriado, pois ϕ_{CO_2} identifica melhor a frente de chama e a altura de ancoragem (veja Figura 7.2). A altura de ancoragem é definida como a menor coordenada z , na qual a temperatura é maior ou igual a 1000 K.

Tabela 7.1: Análise da adaptatividade da malha para o modelo 1D-REDIM.

Malha	Pontos	Altura da Chama		Funcional	Estimativa do Erro
		$H_f(\text{cm})$	T(K)		
0	2007	2.87	1954	0.273056	2.030530×10^{-5}
1	3533	2.87	1954	0.273054	7.767141×10^{-6}
2	7167	2.87	1953	0.273054	3.999893×10^{-6}
3	15481	2.87	1953	0.273054	2.326193×10^{-6}
4	31563	2.84	1954	0.273054	1.555891×10^{-6}
5	71813	2.84	1954	0.273055	1.157581×10^{-6}
6	171631	2.84	1954	0.273055	9.653424×10^{-7}

^a $\|\cdot\|_1$ denota a norma L_1 .

Tabela 7.2: Análise da adaptatividade da malha para o modelo 2D-REDIM.

Malha	Pontos	Altura de Ancoragem		Funcional	Estimativa do Erro
		$z_{liftoff}(\text{cm})$	$r_{liftoff}$		
0	7783	0.40	0.32	0.00174025	4.278085×10^{-5}
1	12397	0.39	0.32	0.00173769	1.846430×10^{-5}
2	21261	0.39	0.33	0.00173712	9.981509×10^{-6}
3	41481	0.39	0.32	0.00173605	7.455514×10^{-6}
4	80749	0.39	0.31	0.00173578	5.152937×10^{-6}
5	168209	0.39	0.32	0.00173553	4.322579×10^{-6}
6	337669	0.39	0.32	0.00173534	3.920879×10^{-6}

^a $\|\cdot\|_1$ denota a norma L_1 .

Das Tabelas 7.1 e 7.2 observa-se que as malhas adaptativas com aproximadamente 170,000 pontos são suficientes para resolver os problemas de forma acurada. Na Tabela 7.1, vê-se que a estimativa do erro da Malha-6 é de menos uma ordem menor que da malha inicial (Malha-0). Ainda, a altura da chama e o valor do funcional convergiram. A altura da chama é definida como a localização z na linha de simetria axial onde a temperatura atinge seu valor máximo.

Similarmente, observando-se a Tabela 7.2, a estimativa do erro na Malha-6 é quase uma ordem menor que a da malha inicial. E, a altura de ancoragem não varia frente a da Malha-5, enquanto que o valor do funcional tem uma pequena alteração. Uma vez que refinamentos posteriores não alteraram o resultado numérico, argumenta-se que a solução é convergente com respeito a malha.

As Tabelas 7.1 e 7.2 mostram que malhas com aproximadamente 170000 pontos foram suficientes para resolver o problema de forma acurada. Uma vez que refinamentos futuros não trazem alterações nos cálculos da chama, pode-se argumentar que a solução é convergente na malha.

Afim de melhor explicar as soluções adaptativas, discute-se com mais detalhe a Tabela 7.2. A menor célula na malha inicial (Malha-0) tem diâmetro de 1.11×10^{-1} mm, o qual é da mesma ordem que a espessura da frente da chama. Portanto, uma malha mais refinada é necessária para predizer de forma mais acurada a posição da chama.

Assumindo que células com diâmetro aproximado de 1.0×10^{-2} mm são suficientes para descrever a frente da chama, tem-se que a Malha-3 da Tabela 7.2, a qual contém 41481 pontos, seria apropriada, uma vez que o diâmetro da menor célula da malha é de 1.38×10^{-2} mm. Entretanto, o refinamento adaptativo da malha não é uniforme ao longo da frente da chama (é mais refinado próximo a $(z_{\text{liftoff}}, r_{\text{liftoff}})$, veja Figura 7.2), o que explica por que mais refinamento foi necessário.

Deve-se observar que se refinamento de malha uniforme fosse aplicado, precisaria-se de milhões de pontos (≈ 67 millions) para se obter células com diâmetros da ordem de 1.0×10^{-2} mm. Isto não é viável para cálculos de chamas e é muito além do número máximo de pontos aqui utilizados (337669 pontos). Portanto, a estratégia de refinamento adaptativo empregada tem-se mostrada ser muito eficiente, salvando considerável tempo computacional. Proporcionou, ainda, o aumento global da estabilidade numérica e da precisão local.

7.3 1D-REDIM *versus* 2D-REDIM

Nesta seção, as diferenças entre as soluções dos modelos 1D-REDIM e 2D-REDIM são discutidas. Do ponto de vista hierárquico, o modelo 1D-REDIM é

um enorme aprimoramento do modelo *Flame Sheet* [52], uma vez que ele recupera toda a dinâmica estacionária do sistema governada pela cinética química e transporte molecular, incluindo o modelo flamelet como caso limite [24]. Aumentando a dimensão da variedade, menores escalas de tempo químicas são levadas em consideração. Portanto, mais informação química está a disposição, o que aumenta a informação de toda a dinâmica.

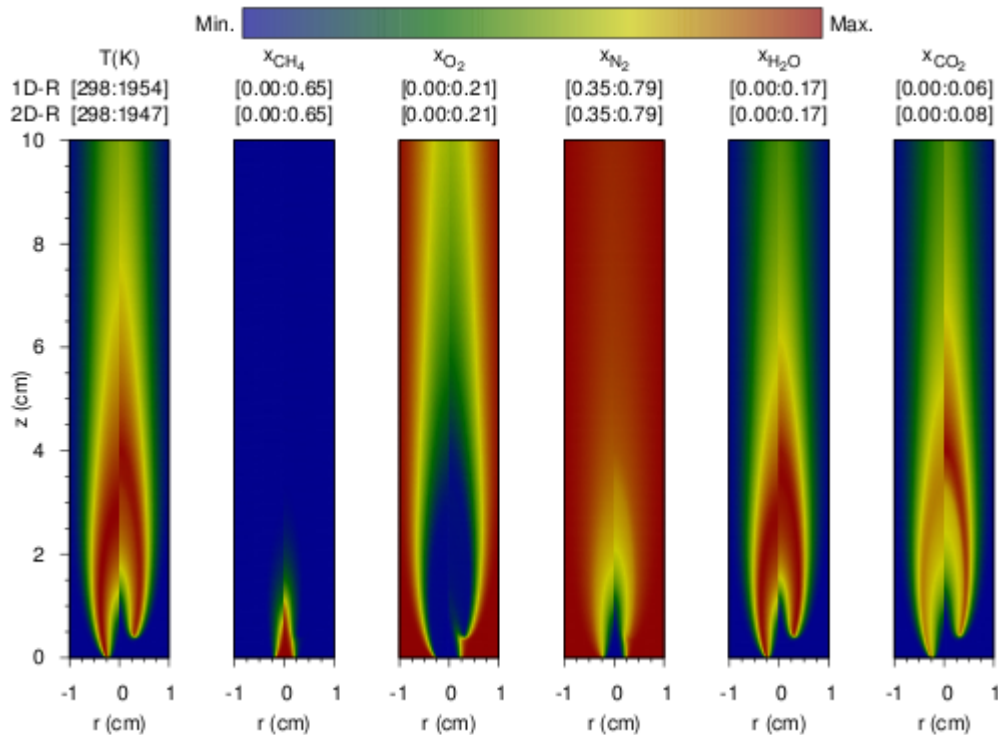


Figura 7.3: Isolinhas de temperatura e de espécies selecionadas. Esquerda: 1D-REDIM. Direita: 2D-REDIM.

A Figura 7.3 mostra isolinhas de temperatura e de algumas espécies selecionadas das soluções dos modelos 1D-REDIM e 2D-REDIM. Como pode-se observar, o 1D-REDIM não é capaz de descrever o conhecido fenômeno de ancoragem (*lift-off phenomenon*) da chama considerada. Este caso teste também mostra uma enorme discrepância na altura das chamas encontradas, enquanto o modelo 1D-REDIM fornece uma solução que pouco tem em comum com a chama experimental. Isto se deve, principalmente, ao fato de que o modelo 1D-REDIM representa somente

um caminho possível no espaço de estado que conecta as misturas não-queimadas. Este caminho, obviamente superestima a velocidade da reação. Entretanto, a solução do modelo 2D-REDIM é uma chama ancorada, a qual apresenta o perfil da chama experimental.

7.4 Comparação dos resultados computacionais e experimentais

A validação da modelagem REDIM é feita através da comparação dos resultados experimentais e de simulação numérica detalhada prévios, os quais são reportados em [11]. Outros estudos prévios do problema são encontrados em [12, 65] e nas referências indicadas nestes.

7.4.1 Comportamento global da chama

A Figura 7.4 mostra isolinhas de temperatura e de algumas espécies selecionadas da solução do modelo 2D-REDIM e de resultados de simulação detalhada reportados em [11]. Observa-se que a 2D-REDIM descreve bem o fenômeno de acoplagem e apresenta uma boa aproximação para a temperatura e frações molares das maiores espécies, quando comparada com os dados computacionais detalhados. As estruturas das soluções concordam muito bem. As principais diferenças ocorrem por deslocamento e escala devido a pequenas discrepâncias na altura da chama e de ancoragem.

A temperatura apresenta o típico perfil *wishbone* das chamas laminares. O combustível CH_4 tem maior concentração (35%) no injetor de combustível e ele reage rapidamente com os radicais OH, O e H. Isto explica a negligenciável concentração de OH na região rica da chama. Os maiores produtos H_2O e CO_2 têm maiores concentrações na região de alta temperatura da chama. A estrutura e o

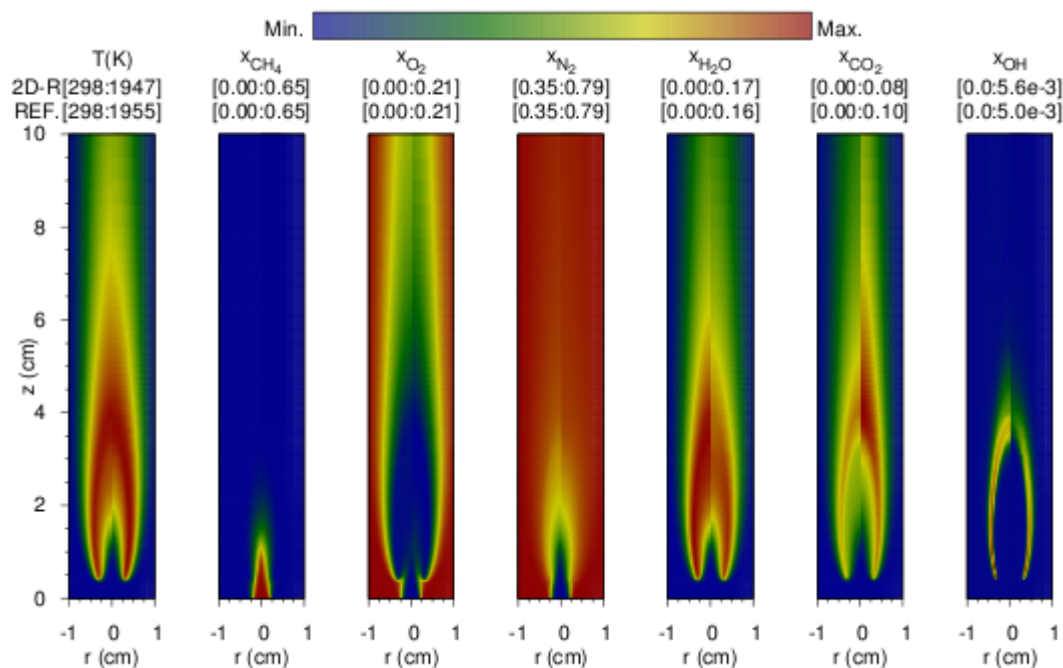


Figura 7.4: Isolinhas de temperatura e espécies selecionadas em fração molar. Esquerda: 2D-REDIM. Direita: Dados de simulação detalhada [11].

intervalo de H_2O concordam bem com o conjunto de dados, enquanto que o pico de CO_2 apresenta maior discrepância. As diferenças de CO_2 podem ser explicadas pela limitação da modelagem do mecanismo reduzido REDIM e pelas diferenças das hipóteses físicas assumidas. Mais provavelmente, esta discrepância é causada pela hipótese de Lewis igual a 1 na construção das REDIMs. A concentração máxima de O_2 ocorre no injetor de oxidante e uma pequena quantidade de O_2 está presente na região rica da chama.

7.4.2 Perfis axiais

A Figura 7.5 mostra os perfis de temperatura e espécies maiores ao longo da linha de simetria axial. Aqui, a solução *Flame Sheet* também é apresentada e serve como caso limite da solução. A usual equação química global metano/ar ($CH_4 + 2O_2 + 2 \times 3.762N_2 \rightarrow CO_2 + 2H_2O + 2 \times 3.762N_2$) com a temperatura

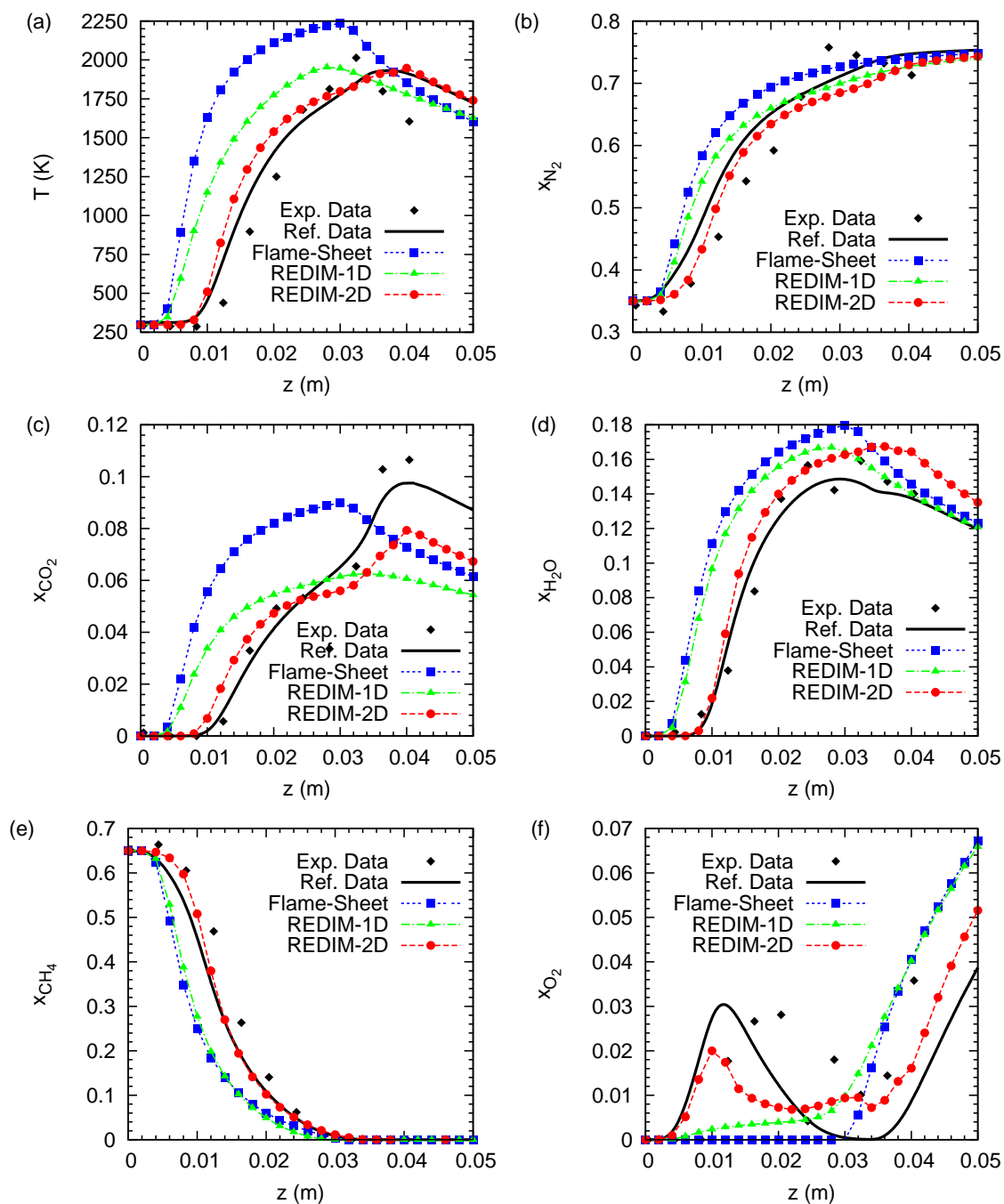


Figura 7.5: Perfis axiais de temperatura e espécies selecionadas ao longo da linha de simetria. Pontos pretos indicam os dados experimentais de [11]. As linhas pretas indicam os resultados de simulação numérica detalhada reportados em [11]. As linhas azuis com quadrados indicam a solução *Flame Sheet*. As linhas verdes com triângulos indicam a solução 1D-REDIM. As linhas vermelhas com círculos fechados indicam a solução 2D-REDIM.

estequiométrica ($T_{st} = 2233$ K) foi utilizada na construção deste modelo simplificado (veja, por exemplo, [92, 52] para maiores detalhes).

Verifica-se que os perfis de temperatura, nitrogênio e metano são muito bem descritos pelo modelo 2D-REDIM quando comparados ao conjunto de dados. Diferenças são da ordem dos erros experimentais. A 2D-REDIM também apresenta bons resultados para CO_2 e H_2O na parte rica da chama. Uma maior discrepância é encontrada na parte pobre da chama. Aqui, os dados experimentais e de simulação detalha, encontrados na literatura, apresentam frações molares de CO_2 maiores que o modelo *Flame Sheet*. Nenhuma espécie é esperada ter fração molar maior que aquelas obtidas pelo modelo *Flame Sheet* (o caso limite).

O perfil de oxigênio obtido pelo modelo 2D-REDIM não se aproxima bem dos resultados computacionais detalhados. Entretanto, mesmo as simulações detalhadas não apresentam bons resultados quando comparados com os dados experimentais para O_2 . Portanto, não se pode argumentar que o modelo reduzido apresenta pobres resultados para O_2 .

7.4.3 Perfis radiais

Uma vez que a altura de ancoragem e a altura da chama diferem dos dados experimentais, numéricos detalhados e dos resultados do modelo 2D-REDIM, não faz sentido comprar os perfis radiais (r) nas mesmas coordenadas axiais z . Como proposto em [11], melhores conclusões podem ser encontradas comparando-se os resultados em uma dada coordenada axial adimensional, a qual varia de 0 em $z = z_{\text{liftoff}}$ até 1 em $z = z_{\text{length}}$. Esta, é dada por:

$$\xi = \frac{z - z_{\text{liftoff}}}{z_{\text{length}} - z_{\text{liftoff}}}. \quad (7.3)$$

A idéia é determinar ξ usando os dados experimentais z_{liftoff} e z_{length} , então determinar a respectiva localização z para os dados numéricos detalhados e

Tabela 7.3: Parâmetros usados para determinar as posições axiais de referência.

	Exp. Data	Ref. Data	REDIM-2D
z_{liftoff} (cm)	0.66	0.40	0.39
z_{length} (cm)	3.24	3.75	4.00

para os resultados do modelo 2D – REDIM usando os respectivos parâmetros. A Tabela 7.3 contém os parâmetros z_{liftoff} e z_{length} conforme requeridos.

A Figura 7.6 mostra alguns perfis radiais para a temperatura e espécies selecionadas para os resultados experimentais, de simulação detalhada e do modelo reduzido 2D-REDIM. Os perfis radiais do modelo 2D-REDIM apresentam bons resultados quando comparados com os dados reportados na literatura. Isto indica, que as discrepâncias observadas anteriormente estão fortemente associadas a pequenas diferenças nas condições de contorno, esquema de discretização (que gera uma diferente aproximação ao longo da linha de simetria) e hipóteses de modelagem (como, por exemplo, $Le = 1$ e a aproximação de baixo-Mach). Portanto, nem todas as diferenças são devidas a modelagem REDIM.

Em particular, os perfis radiais de temperatura, N_2 , CH_4 e O_2 obtidos pela modelagem 2D-REDIM concordam muito bem com os dados numéricos detalhados e experimentais. A Figura 7.6(a) mostra claramente que o modelo 2D-REDIM foi bem sucedido em descrever as pequenas quantidades de O_2 que aparecem na região rica da chama. A “sobra” de oxigênio é uma importante característica das chamas ancoradas (*lift-off flames*), que ocorre por causa da existência de regiões pré-misturadas. Diferenças nos perfis radiais de H_2O e CO_2 são na maioria da ordem dos erros experimentais.

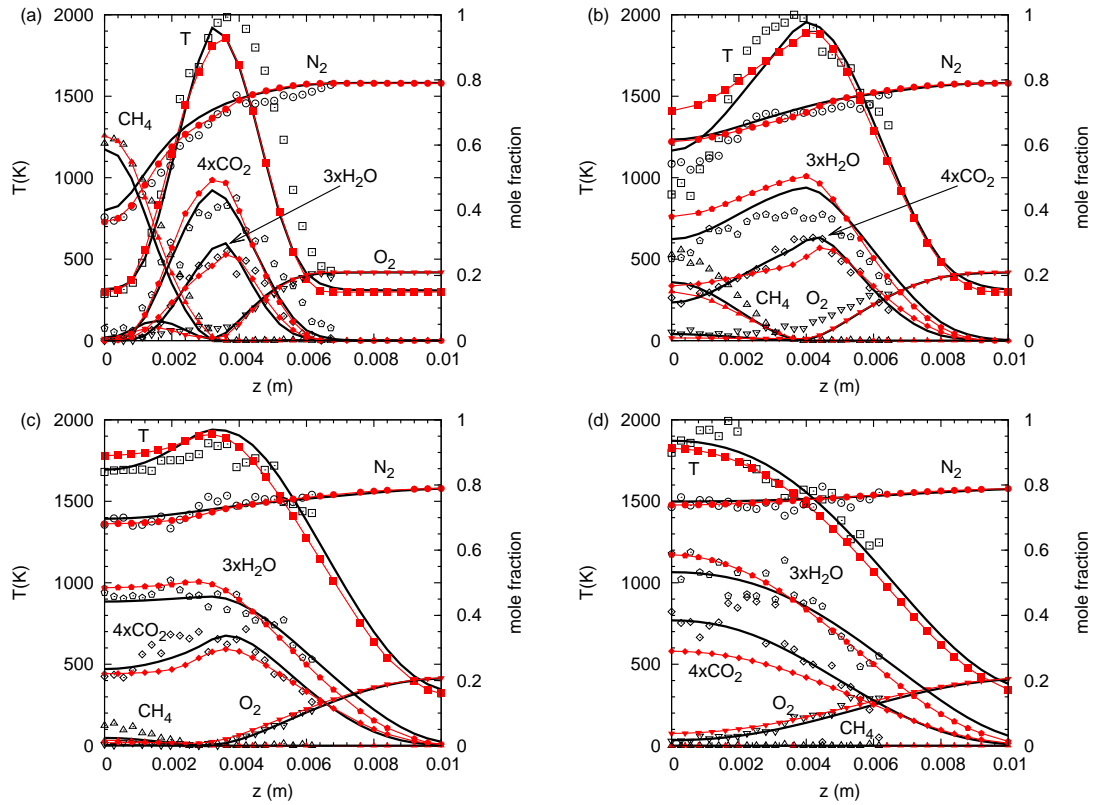


Figura 7.6: Perfis radiais de temperatura e espécies selecionadas. Pontos são usados para indicar os dados experimentais, linhas para os dados numéricos detalhados e linhas com pontos para os resultados 2D-REDIM. (a) Experimental $z = 0.84$ cm, $\xi = 0.07$, $z_{\text{ref}} = 0.634$ cm, $z_{\text{REDIM}} = 0.643$ cm. (b) Experimental $z = 1.64$ cm, $\xi = 0.38$, $z_{\text{ref}} = 1.67$ cm, $z_{\text{REDIM}} = 1.76$ cm. (c) Experimental $z = 2.44$ cm, $\xi = 0.69$, $z_{\text{ref}} = 2.71$ cm, $z_{\text{REDIM}} = 2.88$ cm. (d) Experimental $z = 3.64$ cm, $\xi = 1.155$, $z_{\text{ref}} = 4.269$ cm, $z_{\text{REDIM}} = 4.56$ cm.

8 CONCLUSÕES

Neste trabalho, o uso de química reduzida automaticamente pelo método *Reaction-Diffusion-Manifold* (REDIM) na simulação de chamas difusivas laminares axisimétricas de metano/ar foi investigado. Para este propósito, muitas técnicas no estado da arte de modelagem de escoamentos reativos e métodos numéricos foram aplicadas. No ponto de vista de modelagem, aplicou-se a recente técnica REDIM para a redução automática do popular mecanismo químico GRI-Mech 3.0. Do ponto de vista numérico, um eficiente *solver* foi aplicado, o qual utiliza técnicas de multigrid, refinamento local adaptativo de malha e paralelização. O conjunto destas ferramentas proporcionou a construção de uma metodologia barata, eficiente e robusta para a investigação de chamas difusivas laminares. Ainda mais, a modelagem aplicada pode ser utilizada como uma ferramenta de teste para tabelas-REDIM (para uma futura implementação em cálculos mais complexos, como simulações de chamas turbulentas). Também é apropriada para ser usada hierarquicamente como condição inicial em simulações numéricas detalhadas.

Os mecanismos químicos reduzidos 1D-REDIM e 2D-REDIM para uma mistura de metano diluído com nitrogênio e ar foram construídos e armazenados em tabelas *lookup* (tabelas-REDIM) para o cálculo de escoamentos reativos. Estes foram realizados através do acoplamento das tabelas-REDIM no código C++ orientado-a-objeto Gascoigne por uma nova biblioteca *add-on*. As equações governantes reduzidas na formulação de baixo-Mach foram discretizadas pelo Método dos Elementos Finitos (MEF) e a solução estacionária foi buscada aplicando-se um método quase-Newton. O sistema linear que aparece em cada passo Newton é resolvido pelo eficiente *solver* GMRES, pré-condicionado por um método multigrid geométrico. Paralelização, refinamento de malha local e adaptatividade foram aplicadas para aumentar a performance, eficiência e precisão.

O modelo numérico reduzido foi validado contra dados numéricos detalhados e de experimentos. As comparações mostraram que boa concordância entre ambos os dados foi obtida, o que permite concluir que as tabelas-REDIM são uma eficiente alternativa na redução de mecanismos químicos reativos. Ainda mais, a comparação dos dados ajudou a melhor entender as diferenças entre as variedades reduzidas unidimensional e bidimensional.

Mostrou-se que o modelo 2D-REDIM é capaz de descrever o fenômeno de ancoragem da chama estudada, enquanto o modelo 1D-REDIM não é bem sucedido. Isto se deve ao fato de que a chama *lift-off* é caracterizada por uma zona de pré-mistura, a qual corresponde a áreas de extinção da chama (ou, de não ignição) no espaço de estados. O modelo 1D-REDIM corresponde apenas a um caminho possível já em ignição entre as misturas não queimadas, enquanto que o modelo 2D-REDIM aproxima muitos outros possíveis caminhos, incluindo caminhos de extinção da chama. Isto indica que o modelo 2D-REDIM é também apropriado para a combustão parcialmente pré-misturada, o que é uma importante vantagem frente outros modelos de redução de mecanismos.

Este trabalho, apresentando estudos originais na análise de química reduzida via REDIM na simulação de chamas difusivas laminares axisimétricas. Da mesma maneira que estes estudos ajudaram a responder muitas questões, eles abrem espaço para novas investigações. A hipótese de $Le = 1$ mostrou-se bastante restritiva e a investigação da recente extensão da técnica REDIM para transporte detalhado faz-se necessária. Na mesma direção, os efeitos radioativos de perda de calor foram negligenciados durante a construção das REDIMs, sendo feita a correção necessária somente para a temperatura. Entretanto, o acoplamento da temperatura no processo reativo é esperado alterar a REDIM globalmente e, portanto, uma modificação da ferramenta REDIM acoplando-se sub-modelos de radiação é desejada. Por fim, as grandes diferenças entre as soluções 1D e 2D-REDIM instigam o teste com 3D-

REDIM. Estes pontos demandam futuros desenvolvimentos técnicos na geração das REDIMs e serão alvo de estudos futuros.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] AALBURG, C.; DIEZ, F. J.; FAETH, G. M.; SUNDERLAND, P. B.; URBAN, D.; YUAN, Z.-G. Shapes of nonbuoyant round hydrocarbon-fueled laminar-jet diffusion flames in still air. *Combustion and Flame* 142 (2005), 1–16.
- [2] ANDERSON, J. D. *Computational Fluid Dynamics - The basics with applications*. McGraw-Hill, Inc., New York, 1995.
- [3] ARIS, R. *Vectors, Tensors, and the Basic Equations of Fluid Mechanics*. Dover Publications, New Jersey, 1989.
- [4] BARLOW, R.; KARPETIS, A.; FRANK, J. Scalar profiles and NO formation in laminar opposed-flow partially premixed methane/air flames. *Combustion and Flame* 127 (2001), 2102–2118.
- [5] BATCHELOR, G. K. *An introduction to Fluid Dynamics*. Cambridge University Press, London, 2002.
- [6] BAUER, J.; BYKOV, V.; MAAS, U. Implementation of ILDMs based on a representation in generalized coordinates. In *European Conference on Computational Fluid Dynamics (ECCOMAS CFD)* (2006).
- [7] BECKER, R.; BRAACK, M. A two-level stabilization scheme for the Navier-Stokes equations. In *Numerical Mathematics and Advanced Applications, ENUMATH 2003* (Prague, 2004), M. Feistauer, et. al., Springer, pp. 123–130.
- [8] BECKER, R.; BRAACK, M.; RANNACHER, R. Numerical simulation of laminar flames at low Mach number by adaptive finite elements. *Combustion Theory and Modelling* 3 (1999), 503–534.

- [9] BECKER, R.; RANNACHER, R. An optimal control approach to a posteriori error estimation in finite element methods. In *Acta Numerica 2001*, vol. 37. A. Iserles, Cambridge University Press, New York, 2001, pp. 1–225.
- [10] BENDER, R.; BLASENBREY, T.; MAAS, U. Coupling of detailed and ILDM-reduced chemistry with turbulent mixing. *Proceedings of the Combustion Institute 28* (2000), 101–106.
- [11] BENNETT, B. A. V.; CHENG, Z.; PITZ, R. W.; SMOOKE, M. D. Computational and experimental study of oxygen-enhanced axisymmetric laminar methane flames. *Combustion Theory and Modelling 12*, 3 (2008), 497–527.
- [12] BENNETT, B. A. V.; SMOOKE, M. D. Local rectangular refinement with application to axisymmetric laminar flames. *Combustion Theory and Modelling 2*, 3 (1998), 221–258.
- [13] BRAACK, M. *An Adaptive Finite Element Method for Reactive-Flow Problems*. Tese, Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg, 1998.
- [14] BRAACK, M.; BECKER, R.; RANNACHER, R.; WARNATZ, J. An adaptive finite element method for combustion problems - part I. *Proceeding of the third summer conference of Numerical Modelling in Continuum Mechanics* (1997).
- [15] BRAACK, M.; BECKER, R.; RANNACHER, R.; WARNATZ, J. An adaptive finite element method for combustion problems - part II. *Proceeding of ENUMATH* (1997).
- [16] BRAACK, M.; BECKER, R.; RICHTER, T.; VEXLER, B. Gascoigne 3D - high performance adaptive finite element toolkit. Site: www.gascoigne.de. acessado em 16.04.2010.

- [17] BRAACK, M.; RICHTER, T. Stabilized finite elements for 3-D reactive flows. *Int. J. Numer. Meth. Fluids* (2005).
- [18] BRAACK, M.; RICHTER, T. Solutions of 3D Navier-Stokes benchmark problems with adaptive finite elements. *Computers and Fluids* 35, 4 (2006), 372–392.
- [19] BRAACK, M.; RICHTER, T. Stabilized finite elements for 3D reactive flows. *International Journal for Numerical Methods in Fluids* 51 (2006), 981–999.
- [20] BROOKS, A.; HUGHES, T. Streamline upwind Petrov-Galerkin formulation for convection dominated flows with particular emphasis on the incompressible Navier-Stokes equations. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 32 (1982), 199–259.
- [21] BUCKMASTER, J.; CLAVIN, P.; LIÑÁN, A.; MATALON, M.; PETERS, N.; SIVASHINSKY, G.; WILLIAMS, F. Combustion theory and modeling. *Proceedings of the Combustion Institute* 30 (2005), 1–19.
- [22] BYKOV, V.; MAAS, U. The extension of the ILDM concept to reaction-diffusion manifolds. *Combustion Theory and Modelling* 11, 6 (2007), 839–862.
- [23] BYKOV, V.; MAAS, U. Extension of the ILDM method to the domain of slow chemistry. *Proceedings of the Combustion Institute* 31 (2007), 465–472.
- [24] BYKOV, V.; MAAS, U. Problem adapted reduced models based on reaction-diffusion manifolds (REDIMs). *Proceedings of the Combustion Institute* 32 (2009), 561–568.

- [25] CARBONELL, D.; PEREZ-SEGARRA, C.; COELHO, P.; OLIVA, A. Flamelet mathematical models for non-premixed laminar combustion. *Combustion and Flame* 156 (2009), 334–247.
- [26] CHEN, M.; HERRMANN, M.; PETERS, N. Flamelet modeling of lifted turbulent methane/air and propane/air jet diffusion flames. *Proceedings of the Combustion Institute* 28 (2000), 167–174.
- [27] CHEN, R.-H.; KOTHAWALA, A.; CHAOS, M.; CHEW, L. P. Schmidt number effects on laminar jet diffusion flame liftoff. *Combustion and Flame* 141 (2005), 469–472.
- [28] CHENG, T. S.; WU, C.-Y.; CHEN, C.-P.; LI, Y.-H.; CHAO, Y.-C.; YUAN, T.; LEU, T. S. Detailed measurement and assessment of laminar hydrogen jet diffusion flames. *Combustion and Flame* 146 (2006), 268–282.
- [29] CHORIN, A. J.; MARSDEN, J. E. *A Mathematical Introduction to Fluid Mechanics*, 3 ed. Springer, New York, 2000.
- [30] CIARLET, P. *The finite element method for elliptic problems*. North-Holland, Philadelphia, 1980.
- [31] CIARLET, P. G.; LIONS, J. L. *Handbook of Numerical Analysis*, 3 ed., vol. 2. North-Holland, 2003.
- [32] CLARAMUNT, K.; CÒNSUL, R.; CARBONELL, D.; PÉREZ-SEGARRA, C. Analysis of the laminar flamelet concept for nonpremixed laminar flames. *Combustion and Flame* 145 (2006), 845–862.
- [33] CONNELLY, B.; LONG, M.; SMOOKE, M. D.; HALL, R.; COLKET, M. Computational and experimental investigation of the interaction of soot and NO in coflow diffusion flames. *Proceedings of the Combustion Institute* 32 (2009), 777–784.

- [34] CÒNSUL, R.; OLIVA, A.; PÉREZ-SEGARRA, C.; CARBONELL, D.; GOEY, L. P. H. D. Analysis of the flamelet concept in the numerical simulation of laminar partially premixed flames. *Combustion and Flame* 153 (2008), 71–83.
- [35] CONWAY, J. B. *A Course in Functional Analysis*. Springer, New York, 1985.
- [36] CORREA, C.; NIEMANN, H.; SCHRAMM, B.; WARNATZ, J. Reaction mechanism reduction for higher hydrocarbons by the ILDM method. *Proceedings of the Combustion Institute* 28 (2000), 1607–1614.
- [37] DWORKIN, S. B.; BENNETT, B. A. V.; SMOOKE, M. D. A mass-conserving vorticity-velocity formulation with application to nonreacting and reacting flows. *Journal of Computational Physics* 215 (2006), 430–447.
- [38] EVANS, L. C. *Partial Differential Equations*, vol. 19. American Mathematical Society, Providence, 1998.
- [39] GIRAULT, V.; RAVIART, P.-A. *Finite Element methods for Navier-Stokes equations: theory and algorithms*. Springer, Berlin, 1986.
- [40] GOURLAY, A. *Computational methods for matrix eigenproblems*. John Wiley, London, 1973.
- [41] GRIFFITHS, J. Reduced kinetic models and their application to practical combustion systems. *Progress in Energy and Combustion Science* 21, 1 (1995), 25–107.
- [42] GROSSHANDLER, W. L. RADCAL: A narrow-band model for radiation calculations in a combustion environment. Tech. rep., National Institute of Standards and Technology (Fire Science Division), 1993.

- [43] GROSSMANN, C.; ROOS, H.-G.; STYNES, M. *Numerical Treatment of Partial Differential Equations*. Springer, Berlin, 2007.
- [44] HEDENGREN, J. D. Implementation of automatically symplified chemical kinetics through intrinsic low-dimensional manifolds for gaseous HMX. Dissertação, Brigham Young University, 2002.
- [45] HUEBNER, K.; THORNTON, E. *The finite element method for engineers*, 2 ed. John Wiley & Sons, New York, 1982.
- [46] HUGHES, T. *The Finite Element Method: Linear Static and Dynamic Finite Element Analysis*. Dover Publications, 1987.
- [47] IHME, M.; PITSCH, H. Prediction of extinction and reignition in non-premixed turbulent flames using a flamelet/progress variable model: 2. Application in LES of Sandia flames D and E. *Combustion and Flame* 155 (2008), 90–107.
- [48] JOHNSON, C. *Numerical solution of partial differential equations by the finite element method*. Cambridge University Press, New York, 1987.
- [49] KIM, K.; WON, S.; S.H., C. Characteristics of laminar lifted flames in coflow jets with initial temperature variation. *Proceedings of the Combustion Institute* 31 (2007), 947–954.
- [50] KONZEN, P. H. A. Estudo de um modelo convectivo-difusivo-reactivo em combustão baseado no método de elementos finitos. Dissertação, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Instituto de Matemática, 2006.
- [51] KONZEN, P. H. A.; RICHTER, T.; RIEDEL, U.; MAAS, U. Implementation of REDIM reduced chemistry to model an axisymmetric laminar diffusion methane/air flame. *Combustion Theory and Modelling* (aceito em 03.11.2010).

- [52] KUO, K. K. *Principles of combustion*, 2 ed. Wiley-Interscience, New York, 2005.
- [53] LAM, S. Using CSP to understand complex chemical kinetics. *Combustion Science and Technology* 89, 5–6 (1993), 375–404.
- [54] LAM, S.; GOUSSIS, D. The CSP method for simplifying kinetics. *International Journal of Chemical Kinetics* 26 (1994), 461–486.
- [55] LAW, C. Combustion at a crossroads: Status and prospects. *Proceedings of the Combustion Institute* 31 (1997), 1–29.
- [56] LAW, C. *Combustion Physics*. Cambridge University Press, New York, 2006.
- [57] LIN, K.-C.; FAETH, G. M.; SUNDERLAND, P. B.; URBAN, D.; YUAN, Z.-G. Shapes of nonbuoyant round luminous hydrocarbon/air laminar jet diffusion flame. *Combustion and Flame* 116 (1999), 415–431.
- [58] MAAS, U. *Automatische Reduktion von Reaktionsmechanismen zur Simulation reaktiver Stroemungen*. Tese, Institut fuer Technische Verbrennung, Universitaet Stuttgart, Germany, 1993.
- [59] MAAS, U. Coupling of chemical reaction with flow and molecular transport. *Applications of Mathematics* 40, 3 (1995), 249–266.
- [60] MAAS, U. Efficient calculation of intrinsic low-dimensional manifolds for the simplification of chemical kinetics. *Computing and Visualization in Science* 1(2) (1998), 69–81.
- [61] MAAS, U.; BYKOV, V. The extention of the reaction/diffusion manifold concept to systems with detailed transport models. *Proceedings of the Combustion Institute* (aceito em 2010).

- [62] MAAS, U.; POPE, S. B. Simplifying chemical kinetics: Intrinsic low-dimensional manifolds in combustion space. *Combustion and Flame* 88 (1992), 239–264.
- [63] MAAS, U.; WARNATZ, J. Ignition processes in hydrogen-oxygen mixtures. *Combustion and Flame* 74, 1 (1988), 53–69.
- [64] MCENALLY, C. S.; PFEFFERLE, L. D. Aromatic and linear hydrocarbon concentration measurements in a non-premixed flame. *Combustion Science and Technology* 116 (1996), 183–209.
- [65] MCENALLY, C. S.; PFEFFERLE, L. D.; SCHAFFER, A. M.; LONG, M. B.; MOHAMMED, R. K.; SMOOKE, M. D.; COLKET, M. B. Characterization of a coflowing methane/air non-premixed flame with computer modeling, Rayleigh-Raman imaging, and on-line mass spectrometry. *Proceedings of the Combustion Institute* 28 (2000), 2063–2070.
- [66] MICHEL, J.-B.; COLIN, O.; ANGELBERGER, C.; VEYNANTE, D. Using the tabulated diffusion flamelet model ADF-PCM to simulate a lifted methane-air jet flame. *Combustion and Flame* 156 (2009), 1318–1331.
- [67] NAFE, J.; MAAS, U. Modeling of NO formation based on ILDM reduced chemistry. *Proceedings of the Combustion Institute* 29 (2002), 1379–1385.
- [68] NAFE, J.; MAAS, U. Hierarchical generation of ILDMs of higher hydrocarbons. *Combustion and Flame* 135 (2003), 17–26.
- [69] NGUYEN, P.-D.; VERVISCH, L.; SUBRAMANIAN, V.; DOMINGO, P. Multidimensional flamelet-generated manifolds for partially premixed combustion. *Combustion and Flame* 157 (2010), 43–61.
- [70] NIST - NATIONAL INSTITUTE OF STANDARDS AND TECHNOLOGY. Fire on the web. <http://www.fire.nist.gov/>, acessado em 19/04/2010.

- [71] OKINO, M. S.; MAVROVOUNIOTIS, M. L. Simplification of mathematical models of chemical reaction system. *Chemical Reviews* 98, 2 (1998), 391–408.
- [72] PATANKAR, S. V. *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*. Taylor & Francis, New York, 1980.
- [73] PEPIOT-DESJARDINS, P.; PITSCH, H. An automatic chemical lumping method for the reduction of large chemical kinetic mechanisms. *Combustion Theory and Modelling* 12, 6 (2008), 1089–1108.
- [74] PETERS, N. *Turbulent Combustion*. Cambridge University Press, London, 2006.
- [75] PETERS, N. Fifteen lectures on laminar and turbulent combustion. Disponível em: <http://www.itv.rwth-aachen.de/index.php?id=33>, acessado em 22.07.2010.
- [76] PETERS, N.; ROGG, B. *Reduced kinetic mechanisms for applications in combustion systems*. Springer-Verlag, Berlin, 1993.
- [77] POINSOT, T.; VEYNANTE, D. *Encyclopedia of Computational Mechanics*. John Wiley & Sons, New York, 2004, ch. Combustion, pp. 1–42.
- [78] POINSOT, T.; VEYNANTE, D. *Theoretical and numerical combustion*. R.T. Edwards, Inc., Philadelphia, 2005.
- [79] RICHTER, T. *Parallel Multigrid Method for Adaptive Finite Elements with Application to 3D Flow Problems*. Tese, University of Heidelberg, 2005.
- [80] SERRACANTA, R. C. *Development of Numerical Codes for the Evaluation of Combustion Processes. Detailed Numerical Simulations of Laminar Flames*. Tese, Centre Tecnològic de Transferència de Calor, Departament de Màquines i Motors Tèrmics, Universitat Politècnica de Catalunya, 2002.

- [81] SHADDIX, C. R.; HARRINGTON, J. E.; SMYTH, K. C. Quantitative measurements of enhanced soot production in a flickering methane/air diffusion flame. *Combustion and Flame* 99 (1994), 723–732.
- [82] SHADDIX, C. R.; SMYTH, K. C. Laser-induced incandescence measurements of soot production in steady and flickering methane, propane, and ethylene diffusion flames. *Combustion and Flame* 107 (1996), 418–452.
- [83] SMITH, G. P.; GOLDEN, D. M.; FRENKLACH, M.; MORIARTY, N. W.; EITENEER, B.; GOLDENBERG, M.; BOWMAN, C. T.; HANSON, R. K.; SONG, S.; GARDINER, W. C. J.; LISSANSKI, V. V.; QIN, Z. GRI version 3.0. Disponível em: http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/, acessado em 14/03/2010.
- [84] SMOOKE, M. D.; MCENALLY, C. S.; PFEFFERLE, L. D.; HALL, R.; COLKET, M. Computational and experimental study of soot formation in a coflow, laminar diffusion flame. *Combustion and Flame* 117 (1999), 117–139.
- [85] SMOOKE, M. D.; MITCHELL, R.; KEYES, D. Numerical solution of two-dimensional axisymmetric laminar diffusion flames. *Combustion Science and Technology* 67, 4 (1986), 85–122.
- [86] SUNDERLAND, P. B.; HAYLETT, J. E.; URBAN, D. L.; NAYAGAM, V. Lengths of laminar diffusion flames under elevated gravity. *Combustion and Flame* 152 (2008), 60–68.
- [87] SUNDERLAND, P. B.; MENDELSON, B.; YUAN, Z.-G.; URBAN, D. Shapes of buoyant and nonbuoyant laminar jet diffusion flames. *Combustion and Flame* 116 (1999), 376–386.

- [88] TAP, F.; VEYNANTE, D. Simulation of flame lift-off on a diesel jet using a generalized flame surface density modeling approach. *Proceedings of the Combustion Institute* 30 (2005), 919–926.
- [89] TELEAGA, I.; SEAİD, M. Simplified radiative models for low-Mach number reactive flows. *Applied Mathematical Modelling* 32 (2008), 971–991.
- [90] TORO, V. V.; MOKHOV, A. V.; LEVINSKY, H. B.; SMOOKE, M. D. Combined experimental and computational study of laminar, axisymmetric hydrogen-air diffusion flames. *Proceedings of the Combustion Institute* 30 (2005), 485–492.
- [91] WALSH, K. T.; FIELDING, J.; SMOOKE, M. D.; LONG, M. Experimental and computational study of temperature, species, and soot in buoyant and non-buoyant coflow laminar diffusion flames. *Proceedings of the Combustion Institute* 28 (2000), 1973–1979.
- [92] WARNATZ, J.; MAAS, U.; DIBBLE, R. *Combustion: Physical and Chemical Fundamentals, Modeling and Simulation, Experiments, Pollutant Formation*, 3 ed. Springer, Berlin, 2001.
- [93] WESTBROOK, C. K.; MIZOBUCHI, Y.; POINSOT, T. J.; SMITH, P. J.; WARNATZ, J. Computational combustion. *Proceedings of the Combustion Institute* 30 (2005), 125 – 157.
- [94] XIN, Y.; SONG, Z.; TAN, Y.; WANG, D. The directed relation graph method for mechanism reduction in the oxidative coupling of methane. *Catalysis Today* 131 (2008), 483–488.
- [95] XU, Y.; SMOOKE, M. D. Application of a primitive variable Newton’s method for the calculation of an axisymmetric laminar diffusion flame. *Journal of Computational Physics* 104 (1993), 99–109.
- [96] YOSIDA, K. *Functional Analysis*, 6 ed. Springer, Berlin, 1980.

- [97] ZEUCH, T.; MORÉAC, G.; AHMED, S. S.; MAUSS, F. A comprehensive skeletal mechanism for the oxidation of n-heptane generated by chemistry-guided reduction. *Combustion and Flame* 155 (2008), 651–674.
- [98] ZIENKIEWICZ, O. C.; TAYLOR, R. L. *The Finite Element Method: The Basis*, 5 ed., vol. 1. Butterworth-Heinemann, Oxford, 2000.

Apêndice A FORMULAÇÃO AXISIMÉTRICA

Coordenadas cilíndricas são uma extensão das coordenadas polares bidimensionais para o espaço tridimensional através da definição da altura (z) (veja Figura A.1).

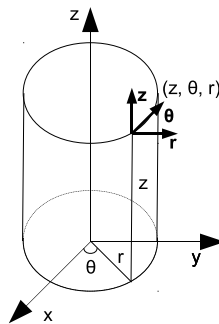


Figura A.1: Coordenadas cilíndricas

Em termos das coordenadas cartesianas (x, y, z) , as coordenadas cilíndricas (r, θ, z) podem ser escritas como:

$$\begin{aligned} r &= \sqrt{x^2 + y^2} \\ \theta &= \tan^{-1} \left(\frac{y}{x} \right) \\ z &= z, \end{aligned}$$

onde, $r \in [0, \infty)$, $\theta \in [0, 2\pi)$ e $z \in (-\infty, \infty)$. As coordenadas cartesianas escritas em termos das coordenadas cilíndricas são:

$$\begin{aligned} x &= r \cos \theta \\ y &= r \sin \theta \\ z &= z. \end{aligned}$$

O Jacobiano da transformação das coordenadas cartesianas em coordenadas cilíndricas é:

$$\left| \frac{\partial(x, y, z)}{\partial(r, \theta, z)} \right| = r.$$

e as derivadas das coordenadas cilíndricas em relação as coordenadas cartesianas são:

$$\begin{aligned} r_x &= \cos \theta & \theta_x &= -\frac{\sin \theta}{r} & z_x &= 0 \\ r_y &= \sin \theta & \theta_y &= \frac{\cos \theta}{r} & z_y &= 0 \\ r_z &= 0 & \theta_z &= 0 & z_z &= 1 \end{aligned}$$

Os vetores unitários são:

$$\mathbf{r} = \begin{bmatrix} \cos \theta \\ \sin \theta \\ 0 \end{bmatrix} \quad \boldsymbol{\theta} = \begin{bmatrix} -\sin \theta \\ \cos \theta \\ 0 \end{bmatrix} \quad \mathbf{z} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}.$$

De agora em diante, os subíndices i, j e k indicam coordenadas cartesianas e os subíndices α, β e κ indicam coordenadas cilíndricas. Ainda mais, se f é uma função, então $\hat{f} = \hat{f}(x, y, z) = \hat{f}(r \cos \theta, r \sin \theta, z) = f(r, \theta, z) = f$. A notação ξ_i^α , por exemplo, denota $\frac{\partial r}{\partial x}$ e, similarmente, para os outros casos.

Agora, se $\hat{\mathbf{u}} = (\hat{u}^x, \hat{u}^y, \hat{u}^z)$ é um campo vetorial, então $\hat{u}^i = \sum_{\beta} (\hat{e}_i, e_{\beta} u^{\beta})$ ou, equivalentemente,

$$\begin{aligned} \hat{u}^x &= \cos \theta u^r - \sin \theta u^{\theta} \\ \hat{u}^y &= \sin \theta u^r + \cos \theta u^{\theta} \\ \hat{u}^z &= u^z. \end{aligned}$$

e as derivadas são dadas por:

$$\begin{aligned}
\hat{u}_r^x &= \cos \theta u_r^r - \sin \theta u_r^\theta & \hat{u}_r^y &= \sin \theta u_r^r + \cos \theta u_r^\theta \\
\hat{u}_r^z &= u_r^z \\
\hat{u}_\theta^x &= -\sin \theta u^r + \cos \theta u_\theta^r - \cos \theta u^\theta - \sin \theta u_\theta^\theta \\
\hat{u}_\theta^y &= \cos \theta u^r + \sin \theta u_\theta^r - \sin \theta u^\theta + \cos \theta u_\theta^\theta \\
\hat{u}_\theta^z &= u_\theta^z \\
\hat{u}_z^x &= \cos \theta u_z^r - \sin \theta u_z^\theta & \hat{u}_z^y &= \sin \theta u_z^r + \cos \theta u_z^\theta \\
\hat{u}_z^z &= u_z^z
\end{aligned}$$

Existem duas formulações equivalentes das equações governantes (5.22)-(5.24) em coordenadas cilíndricas axisimétricas. Uma, é obtida escrevendo, primeiramente, a formulação forte (5.22)-(5.24) em coordenadas cilíndricas axisimétricas e, então, obter a formulação fraca através da multiplicação por funções teste. A outra formulação é obtida escrevendo, primeiramente, a formulação fraca em coordenadas cartesianas e, então, transformando as integrais em coordenadas cilíndricas axisimétricas. Aqui, esta segunda estratégia é aplicada.

A.1 Formulação fraca em coordenadas cilíndricas

Na sequência, (\cdot, \cdot) denota o usual produto interno em $L^2(\Omega)$ sobre o domínio aberto Ω . Todas as funções são assumidas ser suficientemente suaves para garantir existência.

A.1.1 Termo escalar

- Coordenadas cilíndricas:

$$(\hat{f}, \hat{\phi}) = \int \int f \phi r d(r, z) d\theta$$

- Coordenadas cilíndricas axisimétricas:

$$\left(\hat{f}, \hat{\phi}\right) = 2\pi \int f \phi r d(r, z)$$

A.1.2 Derivada temporal

- Coordenadas cilíndricas:

$$\left(\frac{\partial \hat{f}}{\partial t}, \hat{\phi}\right) = \int \int \frac{\partial f}{\partial t} \phi r d(r, z) d\theta$$

- Coordenadas cilíndricas axisimétricas:

$$\left(\frac{\partial \hat{f}}{\partial t}, \hat{\phi}\right) = 2\pi \int \frac{\partial f}{\partial t} \phi r d(r, z)$$

A.1.3 Divergente

- Coordenadas cilíndricas:

$$\left(\operatorname{div}(\hat{\mathbf{u}}), \hat{\phi}\right) = \int \int \operatorname{div}(\hat{\mathbf{u}}) \phi r d(r, z) d\theta$$

Agora, observando que

$$\begin{aligned} \operatorname{div}(\hat{\mathbf{u}}) &= \sum_i \hat{u}_i^i \\ &= \sum_{i,\alpha} \xi_i^\alpha \hat{u}_\alpha^i \\ &= \cos \theta (\cos \theta u_r^r - \sin \theta u_r^\theta) \\ &\quad + \sin \theta (\sin \theta u_r^r + \cos \theta u_r^\theta) \\ &\quad - \frac{\sin \theta}{r} (-\sin \theta u^r + \cos \theta u_\theta^r - \cos \theta u^\theta - \sin \theta u_\theta^\theta) \\ &\quad + \frac{\cos \theta}{r} (\cos \theta u^r + \sin \theta u_\theta^r - \sin \theta u^\theta + \cos \theta u_\theta^\theta) \\ &\quad + u_z^z \\ &= u_r^r + \frac{1}{r} u^r + \frac{1}{r} u_\theta^\theta + u_z^z \end{aligned}$$

segue

$$\left(\operatorname{div}(\hat{\mathbf{u}}), \hat{\phi}\right) = \int \int \left(u_r^r + \frac{1}{r}u^r + \frac{1}{r}u_\theta^\theta + u_z^z\right) \phi r d(r, z) d\theta$$

- Coordenadas cilíndricas axisimétricas:

$$\left(\operatorname{div}(\hat{\mathbf{u}}), \hat{\phi}\right) = 2\pi \int \left(u_r^r + \frac{1}{r}u^r + u_z^z\right) \phi r d(r, z)$$

A.1.4 Convecção escalar

- Coordenadas cilíndricas:

$$\left(\hat{\mathbf{u}} \cdot \operatorname{grad}(\hat{f}), \hat{\phi}\right) = \int \int \hat{\mathbf{u}} \cdot \operatorname{grad}(\hat{f}) \hat{\phi} r d(r, z) d\theta$$

Agora, observando que:

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{u}} \cdot \operatorname{grad}(\hat{f}) &= \sum_i \hat{u}^i \hat{f}_i \\ &= \sum_{i,\alpha} \hat{u}^i \xi_i^\alpha f_\alpha \\ &= (\cos \theta u^r - \sin \theta u^\theta) \cos \theta f_r \\ &\quad - (\cos \theta u^r - \sin \theta u^\theta) \frac{\sin \theta}{r} f_\theta \\ &\quad + (\sin \theta u^r + \cos \theta u^\theta) \sin \theta f_r \\ &\quad + (\sin \theta u^r + \cos \theta u^\theta) \frac{\cos \theta}{r} f_\theta \\ &\quad + u^z f_z \end{aligned}$$

segue

$$\left(\hat{\mathbf{u}} \cdot \operatorname{grad}(\hat{f}), \hat{\phi}\right) = \int \int \left(u^r f_r + \frac{1}{r}u^\theta f_\theta + u^z f_z\right) \phi r d(r, z) d\theta$$

- Coordenadas cilíndricas axisimétricas:

$$\left(\hat{\mathbf{u}} \cdot \operatorname{grad}(\hat{f}), \hat{\phi}\right) = 2\pi \int (u^r f_r + u^z f_z) \phi r d(r, z)$$

A.1.5 Difusão escalar

- Coordenadas cilíndricas:

$$\begin{aligned}
 (\operatorname{div}(D\operatorname{grad}(\hat{f})), \hat{\phi}) &= - \int (D\operatorname{grad}(\hat{f})) \cdot \operatorname{grad}(\hat{\phi}) d\hat{\mathbf{x}} + \int_{\partial} \hat{\phi} \operatorname{grad}(\hat{f}) \cdot \hat{\eta} d\hat{s} \\
 &= - \int \sum_i Df_i \hat{\phi}_i d\hat{\mathbf{x}} + \text{b.t.} \\
 &= - \int \int D \sum_{i,\alpha,\beta} f_\alpha \xi_i^\alpha \phi_\beta \xi_i^\beta r d(r, z) d\theta + \text{b.t.}
 \end{aligned}$$

Agora, os termos com $\alpha \neq \beta$ são todos nulos e

$$\begin{aligned}
 \sum_i (\xi_i^r)^2 &= \cos^2 \theta + \sin^2 \theta = 1 \\
 \sum_i (\xi_i^\theta)^2 &= \frac{\sin^2 \theta}{r^2} + \frac{\cos^2 \theta}{r^2} = \frac{1}{r^2} \\
 \sum_i (\xi_i^z)^2 &= 1
 \end{aligned}$$

Daí, segue:

$$(\operatorname{div}(D\operatorname{grad}(\hat{f})), \hat{\phi}) = - \int \int D \left(f_r \phi_r + \frac{1}{r^2} f_\theta \phi_\theta + f_z \phi_z \right) r d(r, z) d\theta + \text{b.t.}$$

- Coordenadas cilíndricas axisimétricas:

$$(\operatorname{div}(D\operatorname{grad}(\hat{f})), \hat{\phi}) = -2\pi \int D (f_r \phi_r + f_z \phi_z) r d(r, z) + \text{b.t.}$$

A.1.6 Termo vetorial

- Coordenadas cilíndricas:

$$\begin{aligned}
 (\hat{\mathbf{u}}, \hat{\phi}) &= \int \int [(\cos \theta u^r - \sin \theta u^\theta) (\cos \theta \phi^r - \sin \theta \phi^\theta) \\
 &+ (\sin \theta u^r + \cos \theta u^\theta) (\sin \theta \phi^r + \cos \theta \phi^\theta) \\
 &+ u^z \phi^z] r d(r, z) d\theta
 \end{aligned}$$

Segue:

$$\left(\hat{\mathbf{u}}, \hat{\phi}\right) = \int \int (u^r \phi^r + u^\theta \phi^\theta + u^z \phi^z) r d(r, z) d\theta \quad (\text{A.1})$$

- Coordenadas cilíndricas axisimétricas:

$$\left(\hat{\mathbf{u}}, \hat{\phi}\right) = 2\pi \int (u^r \phi^r + u^z \phi^z) r d(r, z) \quad (\text{A.2})$$

A.1.7 Derivadas temporais da velocidade

- Coordenadas cilíndricas:

$$\left(\frac{\partial \hat{\mathbf{u}}}{\partial t}, \hat{\phi}\right) = \int \int \left(\frac{\partial u^r}{\partial t} \phi^r + \frac{\partial u^\theta}{\partial t} \phi^\theta + \frac{\partial u^z}{\partial t} \phi^z\right) r d(r, z) d\theta$$

- Coordenadas cilíndricas axisimétricas:

$$\left(\frac{\partial \hat{\mathbf{u}}}{\partial t}, \hat{\phi}\right) = \int \int \left(\frac{\partial u^r}{\partial t} \phi^r + \frac{\partial u^z}{\partial t} \phi^z\right) r d(r, z) d\theta$$

A.1.8 Convecção vetorial

- Coordenadas cilíndricas: Do fato de que

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{u}} \cdot \text{grad}(\hat{\mathbf{u}}) &= \sum_{i,j} \hat{e}_i \hat{u}^j \hat{u}_j^i \\ &= \sum_{i,j,\alpha} \hat{e}_i \hat{u}^j \hat{u}_\alpha^i \xi_j^\alpha \\ &= \left(u^r \frac{\partial u^r}{\partial r} + \frac{u^\theta}{r} \frac{\partial u^r}{\partial \theta} - \frac{u^\theta u^\theta}{r} + u^z \frac{\partial u^r}{\partial z}\right) \mathbf{r} \\ &+ \left(u^r \frac{\partial u^\theta}{\partial r} + \frac{u^r u^\theta}{r} + \frac{u^\theta}{r} \frac{\partial u^\theta}{\partial \theta} + u^z \frac{\partial u^\theta}{\partial z}\right) \boldsymbol{\theta} \\ &+ \left(u^r \frac{\partial u^z}{\partial r} + \frac{u^\theta}{r} \frac{\partial u^z}{\partial \theta} + u^z \frac{\partial u^z}{\partial z}\right) \mathbf{z} \end{aligned}$$

segue:

$$\begin{aligned} \int [\hat{\mathbf{u}} \cdot \text{grad}(\hat{\mathbf{u}})] \cdot \hat{\boldsymbol{\phi}} d\hat{\mathbf{x}} &= \int \int \left\{ \left(u^r \frac{\partial u^r}{\partial r} + \frac{u^\theta}{r} \frac{\partial u^r}{\partial \theta} - \frac{u^\theta u^\theta}{r} + u^z \frac{\partial u^r}{\partial z} \right) \phi^r \right. \\ &+ \left(u^r \frac{\partial u^\theta}{\partial r} + \frac{u^r u^\theta}{r} + \frac{u^\theta}{r} \frac{\partial u^\theta}{\partial \theta} + u^z \frac{\partial u^\theta}{\partial z} \right) \phi^\theta \\ &+ \left. \left(u^r \frac{\partial u^z}{\partial r} + \frac{u^\theta}{r} \frac{\partial u^z}{\partial \theta} + u^z \frac{\partial u^z}{\partial z} \right) \phi^z \right\} r d(r, z) d\theta \end{aligned}$$

- Coordenadas cilíndricas axisimétricas:

$$\begin{aligned} \int [\hat{\mathbf{u}} \cdot \text{grad}(\hat{\mathbf{u}})] \cdot \hat{\boldsymbol{\phi}} d\hat{\mathbf{x}} &= 2\pi \int \left\{ \left(u^r \frac{\partial u^r}{\partial r} + u^z \frac{\partial u^r}{\partial z} \right) \phi^r \right. \\ &+ \left. \left(u^r \frac{\partial u^z}{\partial r} + u^z \frac{\partial u^z}{\partial z} \right) \phi^z \right\} r d(r, z) \end{aligned}$$

A.1.9 Difusão vetorial

- Coordenadas cilíndricas:

$$\begin{aligned} (\text{div}(\mu \text{grad}(\hat{\mathbf{u}})), \hat{\boldsymbol{\phi}}) &= - \int \mu \text{grad}(\hat{\mathbf{u}}) \cdot \text{grad}(\hat{\boldsymbol{\phi}}) d\hat{\mathbf{x}} + \text{b.t.} \\ &= - \sum_i \int \mu \text{grad}(\hat{u}^i) \cdot \text{grad}(\hat{\phi}^i) d\hat{\mathbf{x}} + \text{b.t.} \\ &= - \sum_i \int \int \mu \left(\hat{u}_r^i \hat{\phi}_r^i + \frac{1}{r^2} \hat{u}_\theta^i \hat{\phi}_\theta^i + \hat{u}_z^i \hat{\phi}_z^i \right) r d(r, z) d\theta + \text{b.t.} \end{aligned}$$

Agora, observando que:

$$\begin{aligned} \sum_i \hat{u}_r^i \hat{\phi}_r^i &= u_r^r \phi_r^r + u_r^\theta \phi_r^\theta + u_r^z \phi_r^z \\ \frac{1}{r^2} \sum_i \frac{1}{r^2} \hat{u}_\theta^i \hat{\phi}_\theta^i &= \frac{1}{r^2} [u_r^r \phi_r^r + u_\theta^r \phi_\theta^r - u_\theta^r \phi^\theta - u^\theta \phi_\theta^r \\ &+ u^\theta \phi^\theta + u_\theta^\theta \phi^r + u_\theta^\theta \phi_\theta^\theta + u_\theta^z \phi_\theta^z] \\ \sum_i \hat{u}_z^i \hat{\phi}_z^i &= u_z^r \phi_z^r + u_z^\theta \phi_z^\theta + u_z^z \phi_z^z \end{aligned}$$

segue:

$$\begin{aligned}
 (\operatorname{div}(\mu \operatorname{grad}(\hat{\mathbf{u}})), \hat{\boldsymbol{\phi}}) &= - \int \int \mu [u_r^r \phi_r^r + u_r^\theta \phi_r^\theta + u_r^z \phi_r^z \\
 &+ \frac{1}{r^2} (u^r \phi^r + u_\theta^r \phi_\theta^r - u_\theta^r \phi^\theta \\
 &- u^\theta \phi_\theta^r + u^\theta \phi^\theta + u_\theta^\theta \phi^r + u_\theta^\theta \phi_\theta^\theta + u_\theta^z \phi_\theta^z) \\
 &+ u_z^r \phi_z^r + u_z^\theta \phi_z^\theta + u_z^z \phi_z^z] r d(r, z) d\theta
 \end{aligned}$$

- Coordenadas cilíndricas axisimétricas:

$$\begin{aligned}
 (\operatorname{div}(\mu \operatorname{grad}(\hat{\mathbf{u}})), \hat{\boldsymbol{\phi}}) &= -2\pi \int \mu \left[\left(u_r^r \phi_r^r + \frac{1}{r^2} u^r \phi^r + u_z^r \phi_z^r \right) \right. \\
 &+ \left. (u_r^z \phi_r^z + u_z^z \phi_z^z) \right] r d(r, z)
 \end{aligned}$$

A.1.10 Gradiente escalar

- Coordenadas cilíndricas:

$$\begin{aligned}
 (\operatorname{grad}(\hat{f}), \hat{\boldsymbol{\phi}}) &= \int \int \sum_i \hat{f}_i \hat{\phi}^i r d(r, z) d\theta \\
 &= \int \int \sum_{i,\alpha} \hat{f}_\alpha \xi_i^\alpha \hat{\phi}^i r d(r, z) d\theta \\
 &= \int \int [f_r \cos \theta (\cos \theta \phi^r - \sin \theta \phi^\theta) \\
 &+ f_r \sin \theta (\sin \theta \phi^r + \cos \theta \phi^\theta) \\
 &- f_\theta \frac{\sin \theta}{r} (\cos \theta \phi^r - \sin \theta \phi^\theta) \\
 &+ f_\theta \frac{\cos \theta}{r} (\sin \theta \phi^r + \cos \theta \phi^\theta) \\
 &+ f_z \phi^z] r d(r, z) \\
 &= \int \int \left(f_r \phi^r + \frac{1}{r} f_\theta \phi^\theta + f_z \phi^z \right) r d(r, z) d\theta
 \end{aligned}$$

- Coordenadas cilíndricas axisimétricas:

$$(\operatorname{grad}(\hat{f}), \hat{\boldsymbol{\phi}}) = 2\pi \int (f_r \phi^r + f_z \phi^z) r d(r, z)$$

A.1.11 Gradiente da pressão

- Coordenadas cilíndricas:

$$\begin{aligned} (\text{grad}(\hat{p}), \hat{\phi}) &= - \int \hat{p} \cdot \text{div}(\hat{\phi}) d\hat{\mathbf{x}} + \int_{\partial} \hat{\phi} \cdot \text{grad}(\hat{p}) \cdot \eta d\hat{s} \\ &= - \int \int p \left(\phi_r^r + \frac{1}{r} \phi^r + \frac{1}{r} \phi_\theta^\theta + \phi_z^z \right) r d(r, z) d\theta + \text{b.t.} \end{aligned}$$

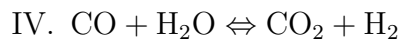
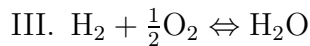
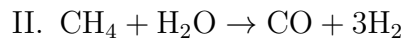
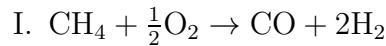
- Coordenadas cilíndricas axisimétricas:

$$(\text{grad}(\hat{p}), \hat{\phi}) = -2\pi \int p \left(\phi_r^r + \frac{1}{r} \phi^r + \phi_z^z \right) r d(r, z)$$

Apêndice B REDIM PARA UM MODELO SIMPLIFICADO

B.1 O mecanismo de Jones e Lindsted

Jones e Lindsted sugeriram um esquema simplificado de 4 passos para chamam pré-misturadas e não pré-misturadas de metano/ar (veja [80], e a literatura citada neste). O simples mecanismo global segue:



onde, as taxas das variáveis de progresso são dadas por:

$$q_I = k_I^f c_{\text{CH}_4}^{0.5} c_{\text{O}_2}^{1.25} \quad (\text{B.1})$$

$$q_{II} = k_{II}^f c_{\text{CH}_4} c_{\text{H}_2\text{O}} \quad (\text{B.2})$$

$$q_{III} = k_{III}^f c_{\text{H}_2}^{0.5} c_{\text{O}_2}^{2.25} c_{\text{H}_2\text{O}}^{-1.0} - k_{III}^b c_{\text{O}_2}^{1.75} c_{\text{H}_2}^{0.75} \quad (\text{B.3})$$

$$q_{IV} = k_{IV}^f c_{\text{CO}} c_{\text{H}_2\text{O}} - k_{IV}^b c_{\text{CO}_2}^{-1} c_{\text{H}_2}. \quad (\text{B.4})$$

As constantes das taxas de reação para frente são dadas na Tabela B.1, sendo as taxas das reações reversas obtidas usualmente da constante de equilíbrio. Aqui, assume-se q em $\text{mol}/\text{m}^3 \cdot \text{s}$.

Na sequência, a construção da REDIM unidimensional baseada neste mecanismo é discutida.

Tabela B.1: Dados da cinética química para a modelagem da combustão de metano/ar para o esquema de Jones e Lindsted [80]. Unidades em m,kg,s,mol,K.

Step	A	β	E_a
I	$6.8 \cdot 10^{15}$	-1.0	40000
II	$3.0 \cdot 10^8$	0.0	30000
III	$2.5 \cdot 10^{16}$	-1.0	40000
IV	$2.7 \cdot 10^9$	0.0	20000

B.2 1D-REDIM

A combustão adiabática do metano (100%CH₄) e ar (21%O₂ + 79%N₂) modelada pelo mecanismo de Jones e Lindsted (veja a Seção B.1) é considerada. As hipóteses usuais para a mistura multi-componente de:

- fluído newtoniano;
- dissipação viscosa negligenciável;
- efeito de Soret negligenciável;
- efeito de Dufour negligenciável;
- constante de Lewis igual a 1.

são assumidas. Note que as hipóteses acima são, aqui, consideradas, mas a aplicação da REDIM não é restrita as mesmas.

Assim, o processo termoquímico relacionado pode ser modelado pelo seguinte conjunto de equações governantes:

$$\frac{\partial h}{\partial t} = -\mathbf{u} \cdot \nabla h + \frac{1}{\rho} \nabla \cdot \left(\frac{\lambda}{c_p} \nabla h \right) \quad (\text{B.5})$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = 0 \quad (\text{B.6})$$

$$\frac{\partial \phi_{\text{N}_2}}{\partial t} = f_{\text{N}_2} - \mathbf{u} \cdot \nabla \phi_{\text{N}_2} + \frac{1}{\rho} \nabla \cdot \left(\frac{\lambda}{M c_p} \nabla x_{\text{N}_2} \right) \quad (\text{B.7})$$

$$\frac{\partial \phi_{\text{CH}_4}}{\partial t} = f_{\text{CH}_4} - \mathbf{u} \cdot \nabla \phi_{\text{CH}_4} + \frac{1}{\rho} \nabla \cdot \left(\frac{\lambda}{Mc_p} \nabla x_{\text{CH}_4} \right) \quad (\text{B.8})$$

$$\frac{\partial \phi_{\text{O}_2}}{\partial t} = f_{\text{O}_2} - \mathbf{u} \cdot \nabla \phi_{\text{O}_2} + \frac{1}{\rho} \nabla \cdot \left(\frac{\lambda}{Mc_p} \nabla x_{\text{O}_2} \right) \quad (\text{B.9})$$

$$\frac{\partial \phi_{\text{CO}}}{\partial t} = f_{\text{CO}} - \mathbf{u} \cdot \nabla \phi_{\text{CO}} + \frac{1}{\rho} \nabla \cdot \left(\frac{\lambda}{Mc_p} \nabla x_{\text{CO}} \right) \quad (\text{B.10})$$

$$\frac{\partial \phi_{\text{H}_2}}{\partial t} = f_{\text{H}_2} - \mathbf{u} \cdot \nabla \phi_{\text{H}_2} + \frac{1}{\rho} \nabla \cdot \left(\frac{\lambda}{Mc_p} \nabla x_{\text{H}_2} \right) \quad (\text{B.11})$$

$$\frac{\partial \phi_{\text{H}_2\text{O}}}{\partial t} = f_{\text{H}_2\text{O}} - \mathbf{u} \cdot \nabla \phi_{\text{H}_2\text{O}} + \frac{1}{\rho} \nabla \cdot \left(\frac{\lambda}{Mc_p} \nabla x_{\text{H}_2\text{O}} \right) \quad (\text{B.12})$$

$$\frac{\partial \phi_{\text{CO}_2}}{\partial t} = f_{\text{CO}_2} - \mathbf{u} \cdot \nabla \phi_{\text{CO}_2} + \frac{1}{\rho} \nabla \cdot \left(\frac{\lambda}{Mc_p} \nabla x_{\text{CO}_2} \right) \quad (\text{B.13})$$

o qual é um sistema ($n = 2 + n_{sp}$)-dimensional, onde $n_{sp} = 7$ e os termos fontes reativos são dados por:

$$\begin{aligned} f_h &= 0 & f_p &= 0 \\ f_{\text{N}_2} &= 0 & f_{\text{CH}_4} &= -\frac{1}{\rho} (q_I + q_{II}) \\ f_{\text{O}_2} &= -\frac{1}{2\rho} (q_I + q_{III}) & f_{\text{CO}} &= \frac{1}{\rho} (q_I + q_{II} - q_{IV}) \\ f_{\text{H}_2} &= \frac{1}{\rho} (2q_I + 3q_{II} - q_{III}) & f_{\text{H}_2\text{O}} &= \frac{1}{\rho} (-q_{II} + q_{III} - q_{IV}) \\ f_{\text{CO}_2} &= \frac{1}{\rho} q_{IV} \end{aligned} \quad (\text{B.14})$$

Seguindo a notação do Capítulo 5 o sistema acima pode ser convenientemente reescrito na forma vetorial geral (5.1), onde o vetor de estados ($n = 9$)-dimensional $\Psi = (h, p, \phi_{\text{N}_2}, \phi_{\text{CH}_4}, \phi_{\text{O}_2}, \phi_{\text{CO}}, \phi_{\text{H}_2}, \phi_{\text{H}_2\text{O}}, \phi_{\text{CO}_2})^T$, o vetor fonte 9-dimensional

$$\mathbf{D} = \begin{pmatrix} \frac{\lambda}{c_p} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\lambda}{Mc_p} \frac{\partial x_{N_2}}{\partial \phi_{N_2}} & \frac{\lambda}{Mc_p} \frac{\partial x_{N_2}}{\partial \phi_{CH_4}} & \frac{\lambda}{Mc_p} \frac{\partial x_{N_2}}{\partial \phi_{O_2}} & \frac{\lambda}{Mc_p} \frac{\partial x_{N_2}}{\partial \phi_{CO}} & \frac{\lambda}{Mc_p} \frac{\partial x_{N_2}}{\partial \phi_{H_2}} & \frac{\lambda}{Mc_p} \frac{\partial x_{N_2}}{\partial \phi_{H_2O}} & \frac{\lambda}{Mc_p} \frac{\partial x_{N_2}}{\partial \phi_{CO_2}} & \frac{\lambda}{Mc_p} \frac{\partial x_{N_2}}{\partial \phi_{CO_2}} \\ 0 & 0 & \frac{\lambda}{Mc_p} \frac{\partial x_{CH_4}}{\partial \phi_{N_2}} & \frac{\lambda}{Mc_p} \frac{\partial x_{CH_4}}{\partial \phi_{CH_4}} & \frac{\lambda}{Mc_p} \frac{\partial x_{CH_4}}{\partial \phi_{O_2}} & \frac{\lambda}{Mc_p} \frac{\partial x_{CH_4}}{\partial \phi_{CO}} & \frac{\lambda}{Mc_p} \frac{\partial x_{CH_4}}{\partial \phi_{H_2}} & \frac{\lambda}{Mc_p} \frac{\partial x_{CH_4}}{\partial \phi_{H_2O}} & \frac{\lambda}{Mc_p} \frac{\partial x_{CH_4}}{\partial \phi_{CO_2}} & \frac{\lambda}{Mc_p} \frac{\partial x_{CH_4}}{\partial \phi_{CO_2}} \\ 0 & 0 & \frac{\lambda}{Mc_p} \frac{\partial x_{O_2}}{\partial \phi_{N_2}} & \frac{\lambda}{Mc_p} \frac{\partial x_{O_2}}{\partial \phi_{CH_4}} & \frac{\lambda}{Mc_p} \frac{\partial x_{O_2}}{\partial \phi_{O_2}} & \frac{\lambda}{Mc_p} \frac{\partial x_{O_2}}{\partial \phi_{CO}} & \frac{\lambda}{Mc_p} \frac{\partial x_{O_2}}{\partial \phi_{H_2}} & \frac{\lambda}{Mc_p} \frac{\partial x_{O_2}}{\partial \phi_{H_2O}} & \frac{\lambda}{Mc_p} \frac{\partial x_{O_2}}{\partial \phi_{CO_2}} & \frac{\lambda}{Mc_p} \frac{\partial x_{O_2}}{\partial \phi_{CO_2}} \\ 0 & 0 & \frac{\lambda}{Mc_p} \frac{\partial x_{CO}}{\partial \phi_{N_2}} & \frac{\lambda}{Mc_p} \frac{\partial x_{CO}}{\partial \phi_{CH_4}} & \frac{\lambda}{Mc_p} \frac{\partial x_{CO}}{\partial \phi_{O_2}} & \frac{\lambda}{Mc_p} \frac{\partial x_{CO}}{\partial \phi_{CO}} & \frac{\lambda}{Mc_p} \frac{\partial x_{CO}}{\partial \phi_{H_2}} & \frac{\lambda}{Mc_p} \frac{\partial x_{CO}}{\partial \phi_{H_2O}} & \frac{\lambda}{Mc_p} \frac{\partial x_{CO}}{\partial \phi_{CO_2}} & \frac{\lambda}{Mc_p} \frac{\partial x_{CO}}{\partial \phi_{CO_2}} \\ 0 & 0 & \frac{\lambda}{Mc_p} \frac{\partial x_{H_2}}{\partial \phi_{N_2}} & \frac{\lambda}{Mc_p} \frac{\partial x_{H_2}}{\partial \phi_{CH_4}} & \frac{\lambda}{Mc_p} \frac{\partial x_{H_2}}{\partial \phi_{O_2}} & \frac{\lambda}{Mc_p} \frac{\partial x_{H_2}}{\partial \phi_{CO}} & \frac{\lambda}{Mc_p} \frac{\partial x_{H_2}}{\partial \phi_{H_2}} & \frac{\lambda}{Mc_p} \frac{\partial x_{H_2}}{\partial \phi_{H_2O}} & \frac{\lambda}{Mc_p} \frac{\partial x_{H_2}}{\partial \phi_{CO_2}} & \frac{\lambda}{Mc_p} \frac{\partial x_{H_2}}{\partial \phi_{CO_2}} \\ 0 & 0 & \frac{\lambda}{Mc_p} \frac{\partial x_{H_2O}}{\partial \phi_{N_2}} & \frac{\lambda}{Mc_p} \frac{\partial x_{H_2O}}{\partial \phi_{CH_4}} & \frac{\lambda}{Mc_p} \frac{\partial x_{H_2O}}{\partial \phi_{O_2}} & \frac{\lambda}{Mc_p} \frac{\partial x_{H_2O}}{\partial \phi_{CO}} & \frac{\lambda}{Mc_p} \frac{\partial x_{H_2O}}{\partial \phi_{H_2}} & \frac{\lambda}{Mc_p} \frac{\partial x_{H_2O}}{\partial \phi_{H_2O}} & \frac{\lambda}{Mc_p} \frac{\partial x_{H_2O}}{\partial \phi_{CO_2}} & \frac{\lambda}{Mc_p} \frac{\partial x_{H_2O}}{\partial \phi_{CO_2}} \\ 0 & 0 & \frac{\lambda}{Mc_p} \frac{\partial x_{CO_2}}{\partial \phi_{N_2}} & \frac{\lambda}{Mc_p} \frac{\partial x_{CO_2}}{\partial \phi_{CH_4}} & \frac{\lambda}{Mc_p} \frac{\partial x_{CO_2}}{\partial \phi_{O_2}} & \frac{\lambda}{Mc_p} \frac{\partial x_{CO_2}}{\partial \phi_{CO}} & \frac{\lambda}{Mc_p} \frac{\partial x_{CO_2}}{\partial \phi_{H_2}} & \frac{\lambda}{Mc_p} \frac{\partial x_{CO_2}}{\partial \phi_{H_2O}} & \frac{\lambda}{Mc_p} \frac{\partial x_{CO_2}}{\partial \phi_{CO_2}} & \frac{\lambda}{Mc_p} \frac{\partial x_{CO_2}}{\partial \phi_{CO_2}} \end{pmatrix}$$

Agora, negligenciando o gradiente da massa molar média (i.e. $\nabla M = 0$), a matriz de difusão é $\mathbf{D} = d \cdot I$, onde $d = -\lambda/c_p$.

Portanto, a REDIM é definida pela solução estacionária de:

$$\begin{cases} \frac{\partial \Psi(\theta)}{\partial t} = (I - \Psi_\theta \Psi_\theta^+) \cdot \left[\mathbf{F}(\theta) - \frac{d}{\rho} \Psi_{\theta\theta} \circ \text{grad}(\theta) \circ \text{grad}(\theta) \right] \\ \Psi^0 = \Psi^{\text{ext}}(\theta) \end{cases} \quad (\text{B.15})$$

onde, θ denota as coordenadas generalizadas.

Aqui, a 1D-REDIM ($m_s = 1$) pode ser parametrizada pelo parâmetro fixo Z , i.e. a fração de mistura $\theta = Z$ (veja, Subseção 4.2.1), a qual é simplesmente definida por:

$$Z := \frac{\phi_{N_2} - \phi_{N_2}^0}{\phi_{N_2}^1 - \phi_{N_2}^0}, \quad (\text{B.16})$$

onde, $\phi_{N_2}^0 = 27.382$, e $\phi_{N_2}^1 = 0$. Assim, o vetor gradiente (9×1)-dimensional Ψ_θ é dado por:

$$\Psi_\theta = \left(\frac{\partial h}{\partial Z}, 0, (\phi_{N_2}^1 - \phi_{N_2}^0), \frac{\partial \phi_{CH_4}}{\partial Z}, \frac{\partial \phi_{O_2}}{\partial Z}, \frac{\partial \phi_{CO}}{\partial Z}, \frac{\partial \phi_{H_2}}{\partial Z}, \frac{\partial \phi_{H_2O}}{\partial Z}, \frac{\partial \phi_{CO_2}}{\partial Z} \right)^T \quad (\text{B.17})$$

e, portanto, a pseudo-inversa (1×9) -dimensional segue:

$$\Psi_{\theta}^{+} = \left(0, 0, \frac{1}{\phi_{\text{N}_2}^1 - \phi_{\text{N}_2}^0}, 0, 0, 0, 0, 0, 0 \right). \quad (\text{B.18})$$

Assim, a aproximação do operador de projeção $(I - \Psi_{\theta}\Psi_{\theta}^{+})$ é simplesmente a matriz (9×9) -dimensional dada por:

$$(I - \Psi_{\theta}\Psi_{\theta}^{+}) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & (\phi_{\text{N}_2}^1 - \phi_{\text{N}_2}^0)^{-1} \frac{\partial h}{\partial Z} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & (\phi_{\text{N}_2}^1 - \phi_{\text{N}_2}^0)^{-1} \frac{\partial \phi_{\text{CH}_4}}{\partial Z} & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & (\phi_{\text{N}_2}^1 - \phi_{\text{N}_2}^0)^{-1} \frac{\partial \phi_{\text{O}_2}}{\partial Z} & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & (\phi_{\text{N}_2}^1 - \phi_{\text{N}_2}^0)^{-1} \frac{\partial \phi_{\text{CO}}}{\partial Z} & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & (\phi_{\text{N}_2}^1 - \phi_{\text{N}_2}^0)^{-1} \frac{\partial \phi_{\text{H}_2}}{\partial Z} & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & (\phi_{\text{N}_2}^1 - \phi_{\text{N}_2}^0)^{-1} \frac{\partial \phi_{\text{H}_2\text{O}}}{\partial Z} & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & (\phi_{\text{N}_2}^1 - \phi_{\text{N}_2}^0)^{-1} \frac{\partial \phi_{\text{CO}_2}}{\partial Z} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (\text{B.19})$$

A matriz Hessiana (9×1) -dimensional $\Psi_{\theta\theta}$ é dada por:

$$\Psi_{\theta\theta} = \left(\frac{\partial^2 h}{\partial Z^2}, 0, 0, \frac{\partial^2 \phi_{\text{CH}_4}}{\partial Z^2}, \frac{\partial^2 \phi_{\text{O}_2}}{\partial Z^2}, \frac{\partial^2 \phi_{\text{CO}}}{\partial Z^2}, \frac{\partial^2 \phi_{\text{H}_2}}{\partial Z^2}, \frac{\partial^2 \phi_{\text{H}_2\text{O}}}{\partial Z^2}, \frac{\partial^2 \phi_{\text{CO}_2}}{\partial Z^2} \right)^T \quad (\text{B.20})$$

Agora, assumindo-se $\text{grad}(\theta) = \nabla Z$ o sistema REDIM (B.15) lê-se:

$$\frac{\partial \phi_i}{\partial t} = f_i - \frac{d}{\rho} |\nabla Z|^2 \frac{\partial^2 \phi_i}{\partial Z^2}, \quad (\text{B.21})$$

para $i = h, \text{CH}_4, \text{O}_2, \text{CO}, \text{H}_2, \text{H}_2\text{O}, \text{CO}_2$. Note que a equação acima (B.21) é equivalente a equação flamelet (4.20) (diferenças são devidas somente as unidades). Ainda mais, no estado não-estacionário, o sistema projetado das equações na REDIM (5.21) é simplesmente:

$$\frac{\partial Z}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla Z - \nabla \cdot \left(\frac{\lambda}{c_p} \nabla Z \right) = 0 \quad (\text{B.22})$$

a qual é a equação da fração de mistura (4.16).

É fácil notar que os modelos 1D-REDIM e flamelet são geralmente equivalentes. Entretanto, eles não são equivalentes para REDIMs de maior dimensão.

B.3 2D-REDIM

Para clarificar as diferenças entre os modelos, uma 2D-REDIM é discutida para o caso acima. É assumido que a REDIM é, agora, parametrizada pelas coordenadas fixas $\boldsymbol{\theta} = (Z, \phi_{\text{CO}_2})$. Assim, o gradiente (9×2) -dimensional do vetor de estados é dado por:

$$\boldsymbol{\Psi}_{\boldsymbol{\theta}} = \begin{pmatrix} \frac{\partial h}{\partial Z} & 0 & (\phi_{\text{N}_2}^1 - \phi_{\text{N}_2}^0) & \frac{\partial \phi_{\text{CH}_4}}{\partial Z} & \frac{\partial \phi_{\text{O}_2}}{\partial Z} & \frac{\partial \phi_{\text{CO}}}{\partial Z} & \frac{\partial \phi_{\text{H}_2}}{\partial Z} & \frac{\partial \phi_{\text{H}_2\text{O}}}{\partial Z} & \frac{\partial \phi_{\text{CO}_2}}{\partial Z} \\ \frac{\partial h}{\partial \phi_{\text{CO}_2}} & 0 & \frac{\partial \phi_{\text{N}_2}}{\partial \phi_{\text{CO}_2}} & \frac{\partial \phi_{\text{CH}_4}}{\partial \phi_{\text{CO}_2}} & \frac{\partial \phi_{\text{O}_2}}{\partial \phi_{\text{CO}_2}} & \frac{\partial \phi_{\text{CO}}}{\partial \phi_{\text{CO}_2}} & \frac{\partial \phi_{\text{H}_2}}{\partial \phi_{\text{CO}_2}} & \frac{\partial \phi_{\text{H}_2\text{O}}}{\partial \phi_{\text{CO}_2}} & 1 \end{pmatrix}^T \quad (\text{B.23})$$

e a sua pseudo-inversa é:

$$\boldsymbol{\Psi}_{\boldsymbol{\theta}}^+ = \begin{pmatrix} 0 & 0 & (\phi_{\text{N}_2}^1 - \phi_{\text{N}_2}^0)^{-1} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (\text{B.24})$$

Portanto, a matriz projeção (9×9) -dimensional é, agora:

$$(I - \boldsymbol{\Psi}_{\boldsymbol{\theta}} \boldsymbol{\Psi}_{\boldsymbol{\theta}}^+) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & (\phi_{\text{N}_2}^1 - \phi_{\text{N}_2}^0)^{-1} \frac{\partial h}{\partial Z} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{\partial h}{\partial \phi_{\text{CO}_2}} \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{\partial \phi_{\text{N}_2}}{\partial \phi_{\text{CO}_2}} \\ 0 & 0 & (\phi_{\text{N}_2}^1 - \phi_{\text{N}_2}^0)^{-1} \frac{\partial \phi_{\text{CH}_4}}{\partial Z} & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{\partial \phi_{\text{CH}_4}}{\partial \phi_{\text{CO}_2}} \\ 0 & 0 & (\phi_{\text{N}_2}^1 - \phi_{\text{N}_2}^0)^{-1} \frac{\partial \phi_{\text{O}_2}}{\partial Z} & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & \frac{\partial \phi_{\text{O}_2}}{\partial \phi_{\text{CO}_2}} \\ 0 & 0 & (\phi_{\text{N}_2}^1 - \phi_{\text{N}_2}^0)^{-1} \frac{\partial \phi_{\text{CO}}}{\partial Z} & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & \frac{\partial \phi_{\text{CO}}}{\partial \phi_{\text{CO}_2}} \\ 0 & 0 & (\phi_{\text{N}_2}^1 - \phi_{\text{N}_2}^0)^{-1} \frac{\partial \phi_{\text{H}_2}}{\partial Z} & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & \frac{\partial \phi_{\text{H}_2}}{\partial \phi_{\text{CO}_2}} \\ 0 & 0 & (\phi_{\text{N}_2}^1 - \phi_{\text{N}_2}^0)^{-1} \frac{\partial \phi_{\text{H}_2\text{O}}}{\partial Z} & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & \frac{\partial \phi_{\text{H}_2\text{O}}}{\partial \phi_{\text{CO}_2}} \\ 0 & 0 & (\phi_{\text{N}_2}^1 - \phi_{\text{N}_2}^0)^{-1} \frac{\partial \phi_{\text{CO}_2}}{\partial Z} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{B.25})$$

A Hessiana é o tensor:

$$\Psi_{\theta\theta} = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 h}{\partial Z \partial Z} & \frac{\partial^2 h}{\partial Z \partial \phi_{\text{CO}_2}} & \frac{\partial^2 h}{\partial \phi_{\text{CO}_2} \partial Z} & \frac{\partial^2 h}{\partial \phi_{\text{CO}_2} \partial \phi_{\text{CO}_2}} \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{\partial^2 \phi_{\text{N}_2}}{\partial \phi_{\text{CO}_2} \partial \phi_{\text{CO}_2}} \\ \frac{\partial^2 \phi_{\text{CH}_4}}{\partial Z \partial Z} & \frac{\partial^2 \phi_{\text{CH}_4}}{\partial Z \partial \phi_{\text{CO}_2}} & \frac{\partial^2 \phi_{\text{CH}_4}}{\partial \phi_{\text{CO}_2} \partial Z} & \frac{\partial^2 \phi_{\text{CH}_4}}{\partial \phi_{\text{CO}_2} \partial \phi_{\text{CO}_2}} \\ \frac{\partial^2 \phi_{\text{O}_2}}{\partial Z \partial Z} & \frac{\partial^2 \phi_{\text{O}_2}}{\partial Z \partial \phi_{\text{CO}_2}} & \frac{\partial^2 \phi_{\text{O}_2}}{\partial \phi_{\text{CO}_2} \partial Z} & \frac{\partial^2 \phi_{\text{O}_2}}{\partial \phi_{\text{CO}_2} \partial \phi_{\text{CO}_2}} \\ \frac{\partial^2 \phi_{\text{CO}}}{\partial Z \partial Z} & \frac{\partial^2 \phi_{\text{CO}}}{\partial Z \partial \phi_{\text{CO}_2}} & \frac{\partial^2 \phi_{\text{CO}}}{\partial \phi_{\text{CO}_2} \partial Z} & \frac{\partial^2 \phi_{\text{CO}}}{\partial \phi_{\text{CO}_2} \partial \phi_{\text{CO}_2}} \\ \frac{\partial^2 \phi_{\text{H}_2}}{\partial Z \partial Z} & \frac{\partial^2 \phi_{\text{H}_2}}{\partial Z \partial \phi_{\text{CO}_2}} & \frac{\partial^2 \phi_{\text{H}_2}}{\partial \phi_{\text{CO}_2} \partial Z} & \frac{\partial^2 \phi_{\text{H}_2}}{\partial \phi_{\text{CO}_2} \partial \phi_{\text{CO}_2}} \\ \frac{\partial^2 \phi_{\text{H}_2\text{O}}}{\partial Z \partial Z} & \frac{\partial^2 \phi_{\text{H}_2\text{O}}}{\partial Z \partial \phi_{\text{CO}_2}} & \frac{\partial^2 \phi_{\text{H}_2\text{O}}}{\partial \phi_{\text{CO}_2} \partial Z} & \frac{\partial^2 \phi_{\text{H}_2\text{O}}}{\partial \phi_{\text{CO}_2} \partial \phi_{\text{CO}_2}} \\ \frac{\partial^2 \phi_{\text{CO}_2}}{\partial Z \partial Z} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{B.26})$$

onde, cada linha representa $(\Psi_{\theta\theta})_l$ a matriz Hessiana (4×4) -dimensional:

$$(\Psi_{\theta\theta})_l = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 \Psi_l}{\partial Z \partial Z} & \frac{\partial^2 \Psi_l}{\partial Z \partial \phi_{\text{CO}_2}} \\ \frac{\partial^2 \Psi_l}{\partial \phi_{\text{CO}_2} \partial Z} & \frac{\partial^2 \Psi_l}{\partial \phi_{\text{CO}_2} \partial \phi_{\text{CO}_2}} \end{pmatrix} \quad (\text{B.27})$$

E, assumindo que a estimativa do gradiente $\text{grad}(\theta)$ é conhecida como $\text{grad}(\theta) = \left(\frac{\partial Z}{\partial x^*}, \frac{\partial \phi_{\text{CO}_2}}{\partial x^*} \right)$, onde x^* é, por exemplo, uma dada localização computada previamente, tem-se:

$$\text{grad}(\theta) \circ \text{grad}(\theta) = \begin{pmatrix} \frac{\partial Z}{\partial x^*} \frac{\partial Z}{\partial x^*} & \frac{\partial Z}{\partial x^*} \frac{\partial \phi_{\text{CO}_2}}{\partial x^*} \\ \frac{\partial Z}{\partial x^*} \frac{\partial \phi_{\text{CO}_2}}{\partial x^*} & \frac{\partial \phi_{\text{CO}_2}}{\partial x^*} \frac{\partial \phi_{\text{CO}_2}}{\partial x^*} \end{pmatrix} \quad (\text{B.28})$$

Assim, o fenômeno de transporte é tratado pela 2D-REDIM como:

$$\Psi_{\theta\theta} \circ \text{grad}(\theta) \circ \text{grad}(\theta) = \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^{m_s} \sum_{j=1}^{m_s} \frac{\partial^2 h}{\partial \theta_i \partial \theta_j} \frac{\partial \theta_i}{\partial x^*} \frac{\partial \theta_j}{\partial x^*} \\ 0 \\ \frac{\partial^2 \phi_{\text{N}_2}}{\partial \phi_{\text{CO}_2} \phi_{\text{CO}_2}} \frac{\partial \phi_{\text{CO}_2}}{\partial x^*} \frac{\partial \phi_{\text{CO}_2}}{\partial x^*} \\ \sum_{i=1}^{m_s} \sum_{j=1}^{m_s} \frac{\partial^2 \text{CH}_4}{\partial \theta_i \partial \theta_j} \frac{\partial \theta_i}{\partial x^*} \frac{\partial \theta_j}{\partial x^*} \\ \sum_{i=1}^{m_s} \sum_{j=1}^{m_s} \frac{\partial^2 \text{O}_2}{\partial \theta_i \partial \theta_j} \frac{\partial \theta_i}{\partial x^*} \frac{\partial \theta_j}{\partial x^*} \\ \sum_{i=1}^{m_s} \sum_{j=1}^{m_s} \frac{\partial^2 \text{CO}}{\partial \theta_i \partial \theta_j} \frac{\partial \theta_i}{\partial x^*} \frac{\partial \theta_j}{\partial x^*} \\ \sum_{i=1}^{m_s} \sum_{j=1}^{m_s} \frac{\partial^2 \text{H}_2}{\partial \theta_i \partial \theta_j} \frac{\partial \theta_i}{\partial x^*} \frac{\partial \theta_j}{\partial x^*} \\ \sum_{i=1}^{m_s} \sum_{j=1}^{m_s} \frac{\partial^2 \text{H}_2\text{O}}{\partial \theta_i \partial \theta_j} \frac{\partial \theta_i}{\partial x^*} \frac{\partial \theta_j}{\partial x^*} \\ \frac{\partial^2 \phi_{\text{CO}_2}}{\partial Z \partial Z} \frac{\partial Z}{\partial x^*} \frac{\partial Z}{\partial x^*} \end{pmatrix} \quad (\text{B.29})$$

Neste caso, o sistema 2D-REDIM (B.15) é dado por:

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^{m_s} \sum_{j=1}^{m_s} \frac{\partial^2 h}{\partial \theta_i \partial \theta_j} \frac{\partial \theta_i}{\partial x^*} \frac{\partial \theta_j}{\partial x^*} + \frac{1}{c} \frac{\partial h}{\partial Z} \frac{\partial^2 \phi_{\text{N}_2}}{\partial \phi_{\text{CO}_2} \phi_{\text{CO}_2}} \frac{\partial \phi_{\text{CO}_2}}{\partial x^*} \frac{\partial \phi_{\text{CO}_2}}{\partial x^*} + \frac{\partial h}{\partial \phi_{\text{CO}_2}} \frac{\partial^2 \phi_{\text{CO}_2}}{\partial Z \partial Z} \frac{\partial Z}{\partial x^*} \frac{\partial Z}{\partial x^*} \\ 0 \\ \frac{\partial \phi_{\text{N}_2}}{\partial \phi_{\text{CO}_2}} f_{\text{CO}_2} + \frac{\partial \phi_{\text{N}_2}}{\partial \phi_{\text{CO}_2}} \frac{\partial^2 \phi_{\text{CO}_2}}{\partial Z \partial Z} \frac{\partial Z}{\partial x^*} \frac{\partial Z}{\partial x^*} \\ f_{\text{CH}_4} + \frac{\partial \phi_{\text{CH}_4}}{\partial \phi_{\text{CO}_2}} f_{\text{CO}_2} + \frac{1}{c} \frac{\partial \phi_{\text{CH}_4}}{\partial Z} \frac{\partial^2 \phi_{\text{N}_2}}{\partial \phi_{\text{CO}_2} \phi_{\text{CO}_2}} \frac{\partial \phi_{\text{CO}_2}}{\partial x^*} \frac{\partial \phi_{\text{CO}_2}}{\partial x^*} + \sum_{i=1}^{m_s} \sum_{j=1}^{m_s} \frac{\partial^2 \phi_{\text{CH}_4}}{\partial \theta_i \partial \theta_j} \frac{\partial \theta_i}{\partial x^*} \frac{\partial \theta_j}{\partial x^*} + \frac{\partial \phi_{\text{CH}_4}}{\partial \phi_{\text{CO}_2}} \frac{\partial^2 \phi_{\text{CO}_2}}{\partial Z \partial Z} \frac{\partial Z}{\partial x^*} \frac{\partial Z}{\partial x^*} \\ f_{\text{O}_2} + \frac{\partial \phi_{\text{O}_2}}{\partial \phi_{\text{CO}_2}} f_{\text{CO}_2} + \frac{1}{c} \frac{\partial \phi_{\text{O}_2}}{\partial Z} \frac{\partial^2 \phi_{\text{N}_2}}{\partial \phi_{\text{CO}_2} \phi_{\text{CO}_2}} \frac{\partial \phi_{\text{CO}_2}}{\partial x^*} \frac{\partial \phi_{\text{CO}_2}}{\partial x^*} + \sum_{i=1}^{m_s} \sum_{j=1}^{m_s} \frac{\partial^2 \phi_{\text{O}_2}}{\partial \theta_i \partial \theta_j} \frac{\partial \theta_i}{\partial x^*} \frac{\partial \theta_j}{\partial x^*} + \frac{\partial \phi_{\text{O}_2}}{\partial \phi_{\text{CO}_2}} \frac{\partial^2 \phi_{\text{CO}_2}}{\partial Z \partial Z} \frac{\partial Z}{\partial x^*} \frac{\partial Z}{\partial x^*} \\ f_{\text{CO}} + \frac{\partial \phi_{\text{CO}}}{\partial \phi_{\text{CO}_2}} f_{\text{CO}_2} + \frac{1}{c} \frac{\partial \phi_{\text{CO}}}{\partial Z} \frac{\partial^2 \phi_{\text{N}_2}}{\partial \phi_{\text{CO}_2} \phi_{\text{CO}_2}} \frac{\partial \phi_{\text{CO}_2}}{\partial x^*} \frac{\partial \phi_{\text{CO}_2}}{\partial x^*} + \sum_{i=1}^{m_s} \sum_{j=1}^{m_s} \frac{\partial^2 \phi_{\text{CO}}}{\partial \theta_i \partial \theta_j} \frac{\partial \theta_i}{\partial x^*} \frac{\partial \theta_j}{\partial x^*} + \frac{\partial \phi_{\text{CO}}}{\partial \phi_{\text{CO}_2}} \frac{\partial^2 \phi_{\text{CO}_2}}{\partial Z \partial Z} \frac{\partial Z}{\partial x^*} \frac{\partial Z}{\partial x^*} \\ f_{\text{H}_2} + \frac{\partial \phi_{\text{H}_2}}{\partial \phi_{\text{CO}_2}} f_{\text{CO}_2} + \frac{1}{c} \frac{\partial \phi_{\text{H}_2}}{\partial Z} \frac{\partial^2 \phi_{\text{N}_2}}{\partial \phi_{\text{CO}_2} \phi_{\text{CO}_2}} \frac{\partial \phi_{\text{CO}_2}}{\partial x^*} \frac{\partial \phi_{\text{CO}_2}}{\partial x^*} + \sum_{i=1}^{m_s} \sum_{j=1}^{m_s} \frac{\partial^2 \phi_{\text{H}_2}}{\partial \theta_i \partial \theta_j} \frac{\partial \theta_i}{\partial x^*} \frac{\partial \theta_j}{\partial x^*} + \frac{\partial \phi_{\text{H}_2}}{\partial \phi_{\text{CO}_2}} \frac{\partial^2 \phi_{\text{CO}_2}}{\partial Z \partial Z} \frac{\partial Z}{\partial x^*} \frac{\partial Z}{\partial x^*} \\ f_{\text{H}_2\text{O}} + \frac{\partial \phi_{\text{H}_2\text{O}}}{\partial \phi_{\text{CO}_2}} f_{\text{CO}_2} + \frac{1}{c} \frac{\partial \phi_{\text{H}_2\text{O}}}{\partial Z} \frac{\partial^2 \phi_{\text{N}_2}}{\partial \phi_{\text{CO}_2} \phi_{\text{CO}_2}} \frac{\partial \phi_{\text{CO}_2}}{\partial x^*} \frac{\partial \phi_{\text{CO}_2}}{\partial x^*} + \sum_{i=1}^{m_s} \sum_{j=1}^{m_s} \frac{\partial^2 \phi_{\text{H}_2\text{O}}}{\partial \theta_i \partial \theta_j} \frac{\partial \theta_i}{\partial x^*} \frac{\partial \theta_j}{\partial x^*} + \frac{\partial \phi_{\text{H}_2\text{O}}}{\partial \phi_{\text{CO}_2}} \frac{\partial^2 \phi_{\text{CO}_2}}{\partial Z \partial Z} \frac{\partial Z}{\partial x^*} \frac{\partial Z}{\partial x^*} \\ \frac{1}{c} \frac{\partial \phi_{\text{CO}_2}}{\partial Z} \frac{\partial^2 \phi_{\text{N}_2}}{\partial \phi_{\text{CO}_2} \phi_{\text{CO}_2}} \frac{\partial \phi_{\text{CO}_2}}{\partial x^*} \frac{\partial \phi_{\text{CO}_2}}{\partial x^*} \end{pmatrix}$$

O sistema acima, pode ser numericamente resolvido numa malha bi-dimensional $(Z_i, \phi_{\text{CO}_2,j})$ produzindo, assim, uma representação discreta da 2D-REDIM. Cada vértice da malha contém o estado termoquímico completo relaxado Ψ_{ij} . Isto é, tem-se a relação discretamente definida $\Psi = \Psi(\theta)$.

Agora, o sistema das equações governantes projetadas na (B.5)-(B.5) 2D-REDIM fornece o sistema bidimensional:

$$\frac{\partial Z}{\partial t} = -\rho \mathbf{u} \cdot \nabla Z + \nabla \cdot \left(\frac{\lambda}{c_p} \nabla Z \right) \quad (\text{B.30})$$

$$\frac{\partial \phi_{\text{CO}_2}}{\partial t} = -\rho \mathbf{u} \cdot \nabla \phi_{\text{CO}_2} + \nabla \cdot \left(\frac{\lambda}{c_p} \nabla \phi_{\text{CO}_2} \right) + f_{\text{CO}_2} \quad (\text{B.31})$$

Deve-se observar que os cálculos realizados neste apêndice têm a intenção apenas de clarificar a metodologia REDIM. Em princípio, não existe a necessidade de se construir uma REDIM para um mecanismo previamente reduzido. Observa-se que a construção das REDIMs são realizadas anteriormente aos cálculos das chamadas. Assim, o tempo computacional gasto na construção da REDIM não contabiliza um tempo real na computação de uma chamada em particular. Ainda mais, do exemplo acima, observa-se que as equações projetadas são iguais às equações não projetadas para as variáveis de progresso, se estas são tomadas como variáveis reais do sistema.