

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

SIMULAÇÃO NUMÉRICO-COMPUTACIONAL DE CHAMAS DIFUSIVAS LAMINARES

por

Cristian Alex Hoerlle

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

Porto Alegre, 18,dezembro de 2012



Universidade Federal do Rio Grande do Sul

Escola de Engenharia

Departamento de Engenharia Mecânica

SIMULAÇÃO NUMÉRICO-COMPUTACIONAL DE CHAMAS DIFUSIVAS LAMINARES

por

Cristian Alex Hoerlle

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

Prof. Arnaldo Ruben Gonzalez
Coordenador do Curso de Engenharia Mecânica

Área de Concentração: **Ciências Térmicas**

Orientador: Prof. Fernando M. Pereira

Comissão de Avaliação:

Prof. Sérgio Luiz Frey

Prof. Adriane Prisco Petry

Prof. Paulo Smith Schneider

Porto Alegre, 18, dezembro de 2012

AGRADECIMENTOS

Agradeço ao meu orientador, prof. Dr. Fernando Pereira que esteve bastante presente na realização deste trabalho.

Ao Allyson Portela por gentilmente ter emprestado seu computador em auxílio as simulações computacionais.

Ao Cristian Nunes pelo constante auxílio, e pela colaboração com os dados experimentais.

Aos integrantes do GESTE, que sempre estiveram dispostos em cooperar com a solução de dúvidas teórico-práticas.

E de modo especial a minha família, namorada e amigos por todo apoio nas horas difíceis que transcorreram no desenvolvimento deste.

HOERLLE, C. A.; **Simulação Numérico-Computacional de Chamas Difusivas Laminares**. 2012. 23. Monografia (Trabalho de Conclusão do Curso em Engenharia Mecânica) – Departamento de Engenharia Mecânica, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2012.

RESUMO

O presente trabalho visa estudar teoricamente o escoamento reativo em chamas difusivas laminares. As análises foram realizadas a partir da solução numérica das equações de conservação (massa total, massa das espécies químicas, quantidade de movimento e energia) através do método dos volumes finitos utilizando o Software ANSYS Fluent. A configuração estudada é a chama não pré-misturada em jato com ar injetado coaxialmente ao jato de combustível. As etapas seguidas foram: geração de malha estruturada do domínio computacional, definição das condições de contorno, seleção de modelos para o escoamento e combustão. O comprimento de chama previsto a partir do campo de temperaturas e das frações mássicas das espécies químicas demonstrou ser compatível com trabalhos experimentais realizados previamente.

PALAVRAS-CHAVE: Chamas difusivas laminares, modelagem numérica, comprimento de chama.

HOERLLE, C. A.; “**Numerical-Computational Simulation of Laminar Diffusive Flames**”. 2012. 23. Monografia (Trabalho de Conclusão do Curso em Engenharia Mecânica) – Departamento de Engenharia Mecânica, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2012.

ABSTRACT

This work aims to study theoretically the reacting flow in laminar diffusive flames. The analyses were conducted from the numerical solution of the conservation equations (mass total mass of chemical species, momentum and energy) through the finite volume method using ANSYS Fluent software. The configuration studied is a not pre-mixed flame in air stream, injected coaxially to the jet fuel. The followed steps were: structured mesh generation for the computation domain, flow and combustion modeling. The flame length predicted from the temperature field and the mass fractions of chemical species shown to be compatible with the experimental work performed previously.

KEYWORDS: Laminar diffusive flames, numerical modeling, flame length.

ÍNDICE

	Pág.
1. INTRODUÇÃO.....	01
2. FUNDAMENTAÇÃO.....	01
3. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA.....	02
4. METODOLOGIA.....	03
4.1 MÉTODO NUMÉRICO.....	03
4.2 EQUAÇÕES FUNDAMENTAIS.....	04
4.3 CINÉTICA QUÍMICA.....	05
4.4 ESTRATÉGIAS E OUTRAS CONSIDERAÇÕES COMPUTACIONAIS.....	06
5. DESCRIÇÃO DO PROBLEMA.....	06
5.1 DOMÍNIO COMPUTACIONAL E DISCRETIZAÇÃO.....	06
5.2 CONDIÇÕES DE CONTORNO.....	07
6. RESULTADOS E DISCUSSÕES.....	08
6.1 ESTUDO DA MALHA.....	08
6.2 PERFIL DE TEMPERATURAS.....	09
6.3 CONCENTRAÇÃO DE ESPÉCIES QUÍMICAS.....	10
6.4 COMPRIMENTO DE CHAMA.....	12
7. CONCLUSÕES.....	14
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	14
APÊNDICE I.....	16

1. INTRODUÇÃO

Conhecer detalhadamente os diversos fenômenos físicos envolvidos em processos de combustão é de suma importância prática dado o intenso emprego da combustão na geração de energia e potência. O desenvolvimento de equipamentos de elevada eficiência energética e com baixa produção de poluentes (como CO, NO e fuligem), são somente alguns dos desafios. Uma característica do estudo dessa área é relacionar em um único problema diversos campos de conhecimento como mecânica dos fluidos, termodinâmica, transferência de calor e cinética química.

Neste contexto, a simulação computacional de chamas é uma ferramenta de estudo fundamental por permitir detalhadas dos fenômenos envolvidos e das propriedades das misturas reagentes. Resultados confiáveis e coerentes com a realidade podem ser alcançados com baixo custo econômico.

No entanto, as complexidades encontradas nos mecanismos detalhados de reações ainda são grandes entraves à modelagem de processos de combustão, dado o elevado tempo computacional requerido. Dessa forma, a simulação do fenômeno de combustão deve buscar mecanismos detalhados o bastante para reproduzir dados experimentais, e simples o suficiente para fornecer uma boa relação entre precisão e tempo de simulação. Esse é o objetivo dos diversos mecanismos reduzidos de combustão disponíveis da literatura.

O foco deste trabalho consiste em realizar uma série de simulações computacionais de chamas difusivas laminares em jato visando estudar a estrutura da chama e reproduzir dados experimentais encontrados na literatura. Essa tecnologia permite que modelos mais completos e próximos a realidade possam ser empregados em detrimento das simplificações utilizadas nos métodos analíticos. Sendo um primeiro passo ao estudo de mecanismos mais complexos como em chamas turbulentas.

2. FUNDAMENTAÇÃO

Em chamas difusivas os reagentes encontram-se inicialmente separados, e a combustão depende da difusão das espécies químicas na direção normal à interface entre o combustível e o oxidante, chamada de frente de chama. O combustível e o comburente se difundem em direção a essa interface, enquanto os produtos da combustão se difundem para longe dela. Segundo Turns, 2000, a frente de chama ocorre na região onde a mistura alcança a proporção estequiométrica.

A chama difusiva laminar do tipo jato é gerada quando o combustível é injetado por uma tubulação de raio R . Em geral, para estabilizar a chama, o jato de combustível é envolto por um escoando paralelo de oxidante, conforme Figura 2.1. Nesta figura, o comprimento de chama é indicado por L_f e ϕ é a razão de equivalência. A figura mostra os perfis de temperatura e de concentrações dos reagentes, Y_F e Y_{OX} e dos produtos Y_{Pr} na direção radial a partir da linha de centro para várias alturas.

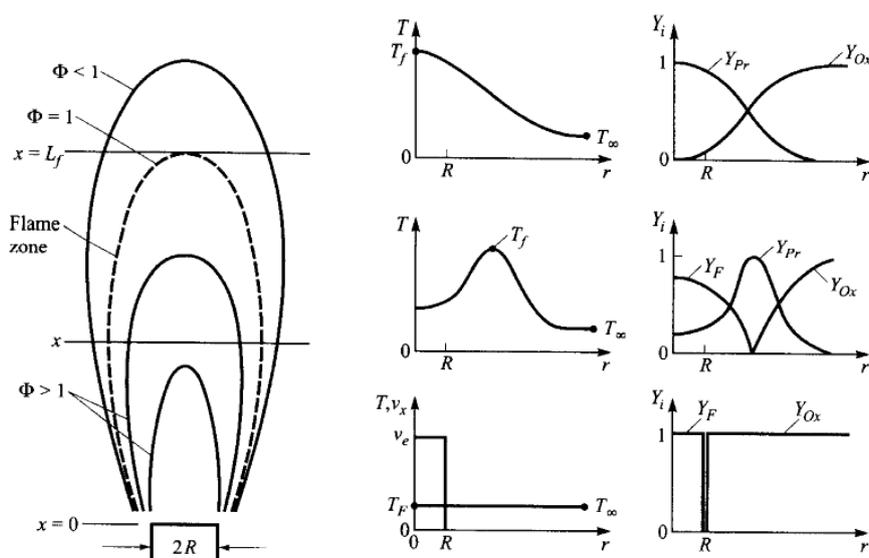


Figura 2.1 – Desenho esquemático do comportamento de chama difusiva laminar adaptada de [Turns, 2000].

Para melhor compreensão, pode-se considerar uma situação limite, na qual a taxa de reação química é infinita. A superfície onde ocorre a reação passa a ser extremamente estreita com a concentração dos reagentes tendendo a zero e a concentração dos produtos tendendo ao seu valor máximo. Dado que a taxa de consumo de reagentes na chama ocorre na proporção estequiométrica, o combustível não passa para o lado oxidante da chama, nem o oxidante para o lado do combustível. A temperatura alcança seu valor máximo na frente de chama e perde calor por difusão tanto para o lado do combustível como para o lado do oxidante.

3. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Neste capítulo será apresentada uma breve revisão bibliográfica de alguns estudos com ênfase em chamas difusivas laminares de metano. Serão mostrados trabalhos experimentais e computacionais, e uma descrição das características deste tipo de chama, posicionando o trabalho no contexto geral da literatura.

Burcke-Shurman, 1928, apresentaram o que seria o primeiro modelo analítico capaz de prescrever o formato de uma chama difusiva laminar do tipo jato como descrito na seção anterior. Posteriormente esse modelo foi aprimorado por Rope, 1977a, obtendo bons resultados para o comprimento de chama obtidos experimentalmente em Rope, 1977b.

Ellzey et al, 1990, realizou um estudo comparativo entre uma solução numérica e a solução analítica de Burcke-Shurman, 1928, para uma chama de H₂-N₂ em ar. Um algoritmo computacional foi desenvolvido pelos autores, e algumas restrições impostas por Burcke-Shurman, 1928, foram eliminadas através da consideração da variação das densidades e coeficientes difusivos. Dadas as restrições computacionais da época, os autores utilizaram uma reação global de um passo na sua modelagem. Com a representação mais realística dos fenômenos físicos, foi notado uma pequena alteração na estrutura da chama aparecendo efeitos de aceleração, pequenos gradientes de velocidade radial, instabilidades e flutuações na chama, os quais não eram representados pela solução analítica. A simplificação da cinética química, no entanto, levou a discrepâncias significativas da temperatura da chama, que foram corrigidas fazendo um ajuste da entalpia do combustível.

Um estudo um pouco mais detalhado de chama difusiva laminar de metano/ ar foi realizado por Fengshan *et al*, 2004. Usando um queimador muito semelhante ao proposto por Burcke-Shurman, 1928, e considerando uma cinética química de 36 espécies e 219

reações, foi analisado a formação de fuligem de um modelo adaptado da combustão de acetileno/ar, e a influência da radiação. Além da solução do campo de temperaturas, de formação de fuligem e de frações mássicas das maiores espécies dos produtos, os autores também apresentaram os erros relativos e os tempos computacionais para as variações dos modelos radiantes empregados.

Verhoeven et al, 2011, realizou um estudo a fim de investigar a aplicação de um modelo de elementos de chama denominado *flamelet-generated manifold* - FGM, em simulação numérica multidimensional de chama laminar não-prémisturada. Este modelo emprega soluções de chamas unidimensionais com cinética química detalhada para construir um banco de dados que posteriormente é usado para resolver uma chama multidimensional de metano e ar. Bons resultados foram apresentados, validando assim a proposta do autor.

Recentemente, Nunes, 2012, construiu um queimador a fim de estudar o comprimento de chama. Baseando-se nas considerações anteriores, utilizando termopares para registro de temperatura e tubos de pitot para se assegurar da uniformidade do escoamento, o autor buscou registrar o comprimento de chama para diferentes vazões com o auxílio de réguas. Uma pequena diferença foi encontrada para valores muito baixos de velocidade dos fluidos, e para valores próximos aqueles da região de transição para o regime permanente. Em uma faixa média para os valores de fluxo, obteve-se na época uma boa precisão do comprimento de chama referente a estudos anteriores.

4. METODOLOGIA

O caso estudado apresenta um acoplamento de diversos fenômenos físicos, incluindo: reações químicas, escoamento e transferência de calor. A representação de todos esses fenômenos foi feito via simulações numéricas no software de dinâmica dos fluidos computacional (CFD – *Computational Fluid Dynamics*) Ansys FLUENT.

Os programas CFD são estruturados de forma a seguir um procedimento computacional que se baseia em uma série de etapas pré-definidas:

1. Definição da geometria;
2. Geração da malha;
3. Pré-processamento (define condições físicas do problema): condições de contorno; seleção dos modelos de escoamento e combustão; definição das reações químicas; definição das propriedades do fluido; definição das condições iniciais e dos parâmetros de convergência;
4. Processamento: solução dos modelos utilizados.
5. Pós-processamento: análise crítica dos resultados (permite apresentar qualitativamente e quantitativamente os resultados através de funções de visualização, de gráficos e tabelas de dados);

A etapa seguinte diz respeito ao estudo da chama difusiva laminar. Utilizando um mecanismo reduzido de combustão de metano, as vazões de oxidante e combustível serão variadas a fim de se obter diferentes comprimentos de chama, os quais serão comparados com resultados experimentais encontrados na literatura.

4.1. MÉTODO NUMÉRICO

As equações diferenciais parciais de conservação de massa, quantidade de movimento e energia foram resolvidas através do Método dos Volumes Finitos. O método consiste em dividir a região de interesse em pequenas regiões chamadas de volumes de controle, gerando a malha computacional. As equações diferenciais são integradas em cada volume, gerando um conjunto de equações algébricas, conforme *Patankar, 1980*. A partir de um processo iterativo, um valor aproximado para cada uma das variáveis pode ser obtido em cada volume de controle do domínio computacional. Um resultado mais próximo da solução correta é obtido com o

refinamento dos volumes de controle (com um conseqüente aumento do tempo computacional).

Os termos difusivos foram aproximados pelo esquema das diferenças centrais, e os termos convectivos pelo esquema *Upwind*. O acoplamento pressão-velocidade é realizado através do algoritmo *SIMPLE* (Pantakar, 1980). A convergência das equações é determinada comparando o valor obtido em relação à solução anterior para cada iteração. O critério padrão estabelece que a solução é adequada para erro relativo inferior a 1×10^{-4} para a conservação da quantidade de movimento e 1×10^{-6} para a equação da energia.

4.2. EQUAÇÕES FUNDAMENTAIS

O presente modelo resolve as equações de conservação da massa total, massa das espécies químicas, quantidade de movimento e energia.

A conservação da massa é expressa como:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{U}) = 0 \quad (4.1)$$

onde ρ é a densidade do fluido, t é o tempo e U é a velocidade.

Em regime laminar de escoamento o campo de velocidades e pressão pode ser obtido pela solução das equações de Navier-Stokes:

$$\frac{\partial (\rho \vec{U})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{U} \otimes \vec{U}) = -\nabla p + \nabla \cdot \left(\mu (\nabla \vec{U} + \nabla \vec{U}^T) - \frac{2}{3} \nabla \cdot \vec{U} I \right) \quad (4.2)$$

sendo p a pressão, μ a viscosidade e I é o tensor unitário. Nota-se que a chama em estudo apresenta pressão aproximadamente constante, no entanto, a forma compressível da equação de N-S deve ser usada dada à grande variação de temperatura (e densidade) do escoamento.

A equação da conservação da energia é utilizada para prever a temperatura em todo o fluido. Em termos de entalpia ela é dada por:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho h) - \frac{\partial p}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{U} h) = \nabla \cdot (\lambda \nabla T) \quad (4.3)$$

$$h = \sum_{i=1}^N \left(h_{f,i}^0 + \int_{T_{ref}}^T C_{p,i} dT \right)$$

onde h é a entalpia total, λ é a condutividade térmica, T é o campo de temperaturas, N é o número de espécies químicas na mistura, e $C_{p,i}$ o calor específico a pressão constante da espécie i , $h_{f,i}^0$ é a entalpia de formação da espécie i na temperatura de referência T_{ref} . Nota-se que nessa forma a reação química é implicitamente considerada através da variação da composição da mistura. Nota-se também que a difusão de calor induzida pela difusão de massa foi desprezada.

A equação de transporte para o componente i com fração mássica Y_i é:

$$\frac{\partial (\rho Y_i)}{\partial t} + \frac{\partial (\rho \vec{U} Y_i)}{\partial x_j} = -\nabla \cdot \vec{J}_i + R_i \quad (4.4)$$

onde, \vec{J}_i é o fluxo difusivo da espécie i , que neste trabalho é modelado como sendo dependente apenas do gradiente de concentração (lei de Fick):

$$\vec{J}_i = -\rho D_{i,m} \nabla Y_i \quad (4.5)$$

sendo $D_{i,m}$ o coeficiente de difusão mássica da espécie i na mistura. Esse coeficiente é obtido pela aproximação de Hirschfelder (Coelho e Costa, 2007).

4.3. CINÉTICA QUÍMICA

A reação química pode ser descrita em termos de r reações elementares envolvendo N componentes. Calcula-se a taxa de reação, R_i , do elemento i como a soma das taxas de produção e consumo para todas as reações elementares nas quais o respectivo elemento participa:

$$R_i = M_{w,i} \sum_{r=1}^N \hat{R}_{i,r} \quad (4.6)$$

onde $M_{w,i}$ é o peso molecular da espécie i , $\hat{R}_{i,r}$ é a taxa molar de criação/ destruição da espécie i na reação r . A taxa de reação elementar $\hat{R}_{i,r}$ é calculada como:

$$\hat{R}_{i,r} = \Gamma(v''_{i,r} - v'_{i,r}) \left(k_{f,r} \prod_{i=1}^N [C_{i,r}]^{(\eta'_{i,r} - \eta''_{i,r})} \right) \quad (4.7)$$

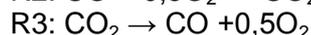
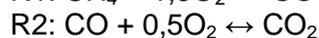
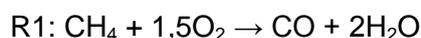
de forma que $[C_{i,r}]$ representa a concentração molar da espécie i , $v'_{i,r}$ e $v''_{i,r}$ os coeficientes estequiométricos dos reagentes e dos produtos, $\eta'_{i,r}$ e $\eta''_{i,r}$ as ordens de reação do elemento i como reagente e produto na reação r , e $k_{f,r}$ a constante de reação. A constante de reação seguem o modelo de Arrhenius:

$$k_{f,r} = A_r T^{\beta_r} \exp\left(-\frac{E_r}{RT}\right) \quad (4.8)$$

onde A_r é o fator pré-exponencial, β_r é o expoente adimensional de temperatura, E_r é a energia de ativação, T é a temperatura absoluta, e R é a constante universal dos gases.

As propriedades termodinâmicas da mistura são calculadas de acordo com a proporção de cada elemento presente no volume de controle.

Como mecanismo optou-se por um mecanismo global de dois passos (sendo um passo reversível) conforme mostrado abaixo:



Os parâmetros de cinética de reação adotados neste trabalho são padrões do software, cujos valores estão representados na Tabela 4.1.

Tabela 4.1 – Parâmetro de cinética química utilizados.

Reação	A_k	E_k	B_k	$r_{CH_4,k}$	$r_{O_2,k}$	$r_{CO_2,k}$	$r_{CO,k}$	$r_{H_2O,k}$
1	5,012E11 [s ⁻¹ mol ^{-0,5} m ^{1,5}]	2E8 J/Kg	0	0,7	0,8	-	-	-
2	2.239E12 [s ⁻¹ mol ^{-0,75} m ^{2,25}]	1,7E8 J/Kg	0	-	0,25	-	1,0	0,5
3	5E8 [s ⁻¹]	1,7E8 J/Kg	0	-	-	1,0	-	-

4.4. ESTRATÉGIAS E OUTRAS CONSIDERAÇÕES COMPUTACIONAIS

Simulações de escoamentos reativos necessitam que algum procedimento seja adotado a fim de se obter a ignição da chama. Neste trabalho, considerou-se como condição inicial do domínio a composição química de 23.2% de CH₄, 5% de CO₂, 1% de CO, 5% de H₂O em uma temperatura de 1200K na mesma velocidade da condição de contorno de entrada. Informando pequenas frações mássicas dos produtos, há maior estabilidade de convergência nas primeiras iterações. Vale frisar que quanto mais próximas à solução final forem as condições iniciais do problema, mais rápido a solução tenderá a convergência.

Em detrimento da integração direta das equações de cinética química e seu elevado tempo computacional, o Fluent dispõe de uma ferramenta chamada Integrador ISAT capaz de acelerar o tempo de solução das reações. O software implementa a ferramenta para tabular dinamicamente o mapa das composições na região do espaço computacional com controle de erro. Detalhes do algoritmo ISAT podem ser encontrados em Ansys Inc., 2010. Para a construção das tabelas, reservou-se valores elevados de memória Ram do computador e erros de no máximo 1xE-4 para garantir que a ferramenta fosse utilizada durante toda a simulação com boa precisão, evitando as integrações diretas.

Um problema de convergência em fluidos reagentes envolve a magnitude do termo fonte das reações. Quando a modelagem utiliza taxas de reações muito elevadas (taxas de reações muito mais rápidas que as escalas de tempo convectivas e difusivas), a solução da equação de transporte das espécies químicas se torna numericamente difícil. Este problema pode ser contornado utilizando a opção: Solucionador de Química Severa (*Stiff Chemistry Solver*). Esta ferramenta aplica um algoritmo de passo fracionário. Primeiramente as reações químicas são solucionadas para cada volume de controle a pressão constante usando o integrador *ISAT*, no segundo momento os termos convectivos e difusivos são tratados como em uma simulação não reagente.

Segundo Ellsey et al, 1990, o uso de reações globais em simulações numéricas pode gerar regiões de temperatura elevada demais dada a avaliação simplificada do calor específico da mistura. Devido a ocorrência desse fenômeno, para garantir a convergência da temperatura, durante as primeiras iterações a temperatura máxima para o cálculo das propriedades químicas foi limitada em 2200K (temperatura adiabática do metano). Essa restrição é liberada após a equação da continuidade alcançar um erro relativo de 5xE-2 (condição determinada puramente como critério de padronização para todas as soluções).

5. DESCRIÇÃO DO PROBLEMA

5.1. DOMÍNIO COMPUTACIONAL E DISCRETIZAÇÃO

O sistema físico consiste em uma região cilíndrica para queima de metano em ar, conforme Nunes, 2012, cujo trabalho foi utilizado como referência para o estudo. Trata-se de um domínio cilíndrico com 137 mm de altura, diâmetro externo de 50 mm representando uma face anular de injeção de ar, e a injeção de combustível ocorre em uma face circular com 4,8

mm de diâmetro no eixo de simetria. A geometria construída no Software Ansys Icem CFD é apresentada na Figura 5.1.

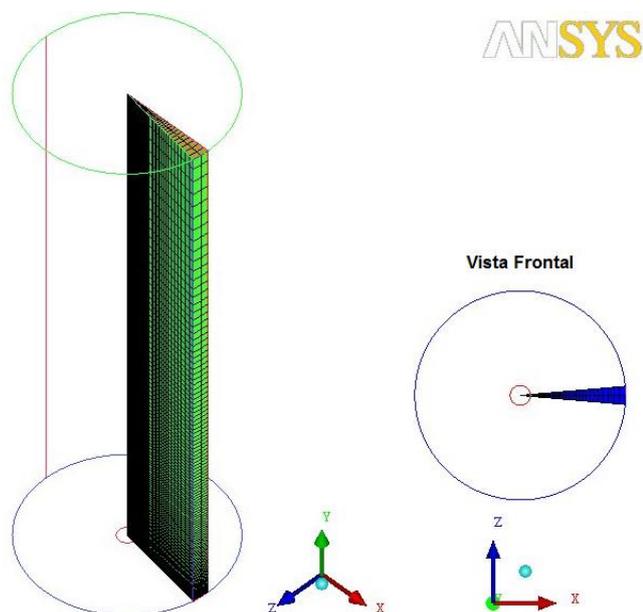


Figura 5.1 – Geometria da Câmara.

Tratando-se de um problema axisimétrico, o domínio computacional foi reduzido a uma seção de 10 graus. A malha foi gerada empregando elementos hexaédricos de forma estruturada com maior refinamento na região central próxima a entrada dos fluídos, onde se encontram os maiores gradientes, sendo expandida em direção às paredes e à saída dos gases, conforme Figura 5.2. Essa estratégia reduz consideravelmente o tempo computacional. Diversos autores [Zhang et al, 2008; Wang et al, 2011] têm trabalhado com este padrão de malha.

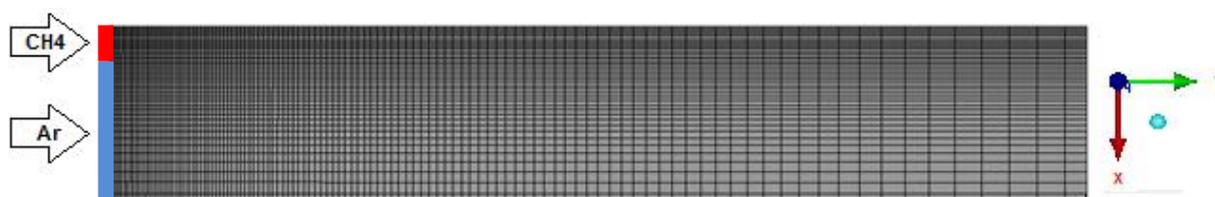


Figura 5.2 – Detalhe de malha grosseira do domínio computacional.

5.2. CONDIÇÕES DE CONTORNO

As condições de contorno do problema foram baseadas do trabalho experimental realizado por Nunes, 2012. Trata-se uma combustão sem pré-mistura entre reagente e comburente, onde os fluídos são injetados paralelamente ao eixo de simetria com velocidade constante a uma temperatura de 300K. O combustível é composto por 100% de metano, enquanto o ar é composto por 23,2% de oxigênio e 76,8% de nitrogênio (em base mássica). Para a parede, foi considerada adiabática com condição de escorregamento livre. Na saída considerou-se que os gradientes (na direção normal dos volumes de controle) de todas as variáveis do fluido são nulos.

6. RESULTADOS E DISCUSSÕES

Para o estudo em questão, foram simuladas três condições de comprimento de chama visando comparar com dados experimentais, obtidos para as vazões de 0,1 NLPM, 0,2 NLPM e 0,3 NLPM. Estes valores, pela geometria em questão e pela lei dos gases perfeitos a 300K equivalem respectivamente: 0,10053 m/s, 0,20107 m/s e 0,30161 m/s. Resultados obtidos e análises críticas são apresentados a seguir.

6.1. ESTUDO DA MALHA

Realizou-se um estudo da qualidade da malha para a situação mais crítica da simulação: maior velocidade de escoamento: Observa-se que o resultado tende a convergir com o aumento do número de elementos (Figura 6.1 e Figura 6.2), onde a temperatura máxima permaneceu em 2242K.

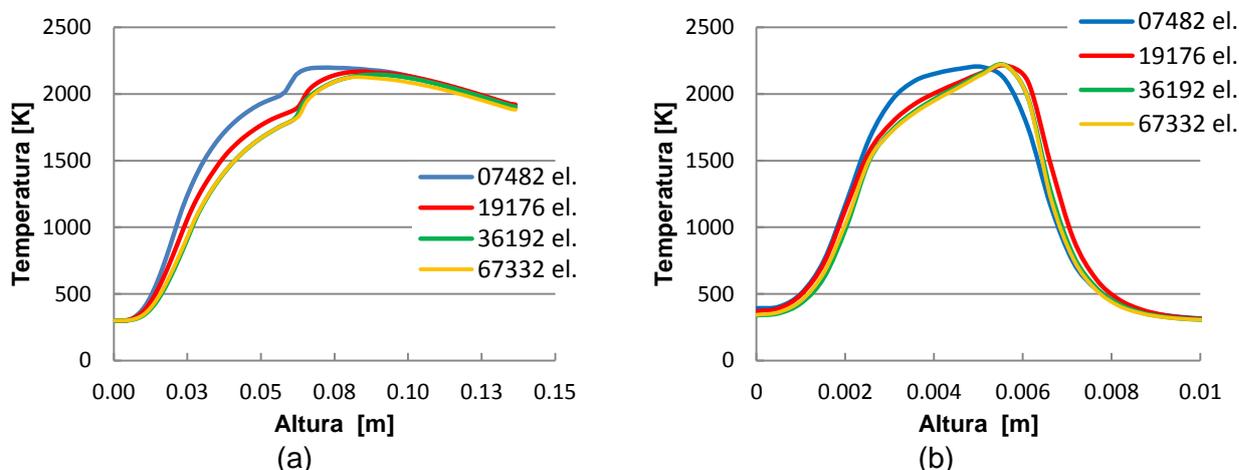


Figura 6.1 – Perfil de temperaturas: (a) Longitudinal; (b) Radial, a 0,01m de altura.

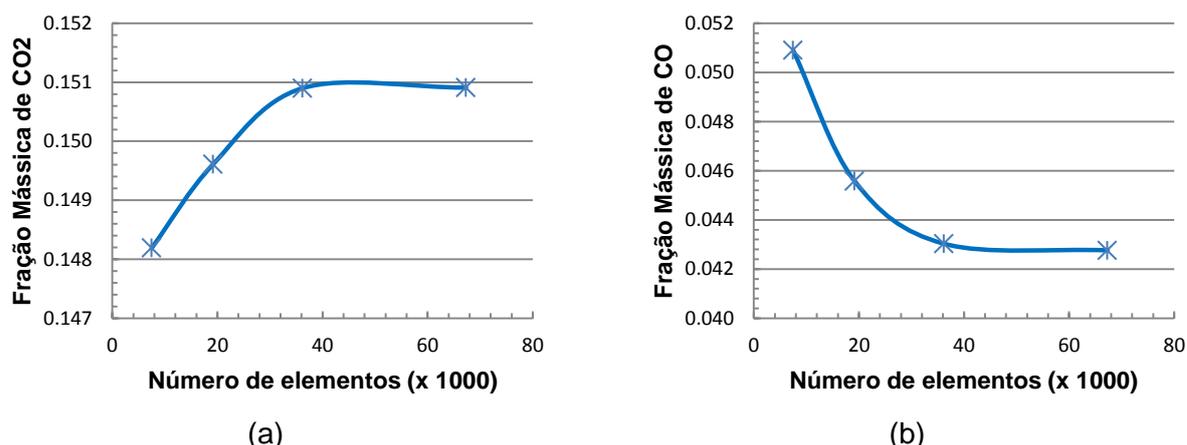


Figura 6.2 – Frações mássicas máximas: (a) Dióxido de carbono; (b) Monóxido de carbono.

Durante a realização do estudo, o tempo computacional passou de apenas algumas horas (malha mais grosseira) para dias (malha mais refinada). Entende-se que este grande aumento esteja relacionado a extrapolação da memória reservada para o ISAT, de forma que software passe automaticamente a realizar integrações diretas para as espécies químicas. Utilizou-se a malha de 36192 volumes para as posteriores simulações por apresentar uma relação de precisão e tempo computacional mais viável. A malha utilizada é considerada suficiente para a obtenção de bons resultados para o comprimento de chama.

6.2. PERFIL DE TEMPERATURAS

As simulações para diferentes vazões geraram como resultados os campos de temperaturas representados na Figura 6.3. É visível que com o aumento da vazão além de alterar o comprimento, também há um estreitamento da chama, bem como seu afastamento em relação à região de entrada do combustível. Nota-se uma dissipação de calor junto ao eixo de simetria na parte interior da chama, formando uma descontinuidade no perfil elíptico da temperatura máxima, não condizente com a estrutura esperada para uma chama difusiva para as vazões de 0,2 NLPM e 0,3 NLPM.

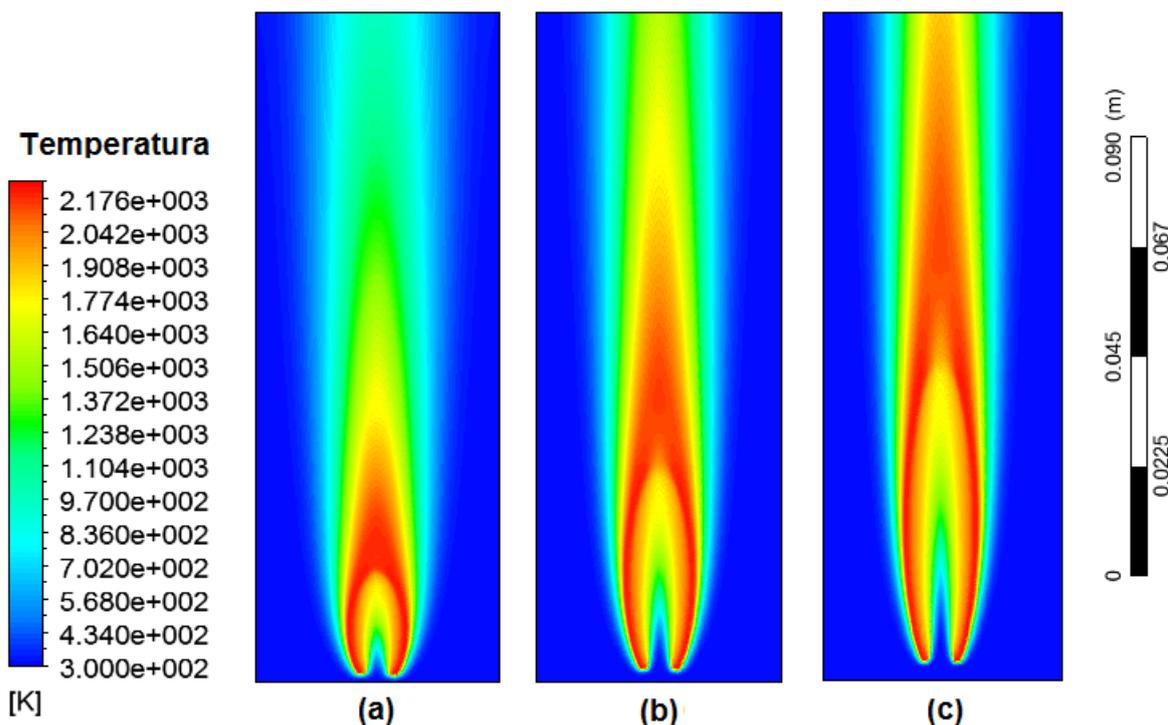


Figura 6.3 – Campo de temperaturas para: (a) 0,1 NLPM; (b) 0,2 NLPM; (c) 0,3 NLPM.

Para uma comparação qualitativa usou-se os resultados de Verhoeven et al, 2011. Esses autores estudaram uma chama difusiva laminar de metano/ar (metano diluído com 45% vol. de N₂) com vazão de 0,3 NLPM em um queimador com diâmetro de injetor de 12 mm. Apesar de se tratar de combustível e queimador diferentes, esses resultados podem ser usados para comparações qualitativas. Assim, os resultados de temperatura obtidos por Verhoeven et al, 2011 e pelo presente trabalho são mostrados na Figura 6.4. A legenda identifica os perfis de temperatura do presente trabalho pelo nome Presente, e dois casos estudados pelo autor: FC considerando cinética química detalhada pelo método convencional, e FGM representando cinética química detalhada pelo método FGM (*flamelet generated manifold*).

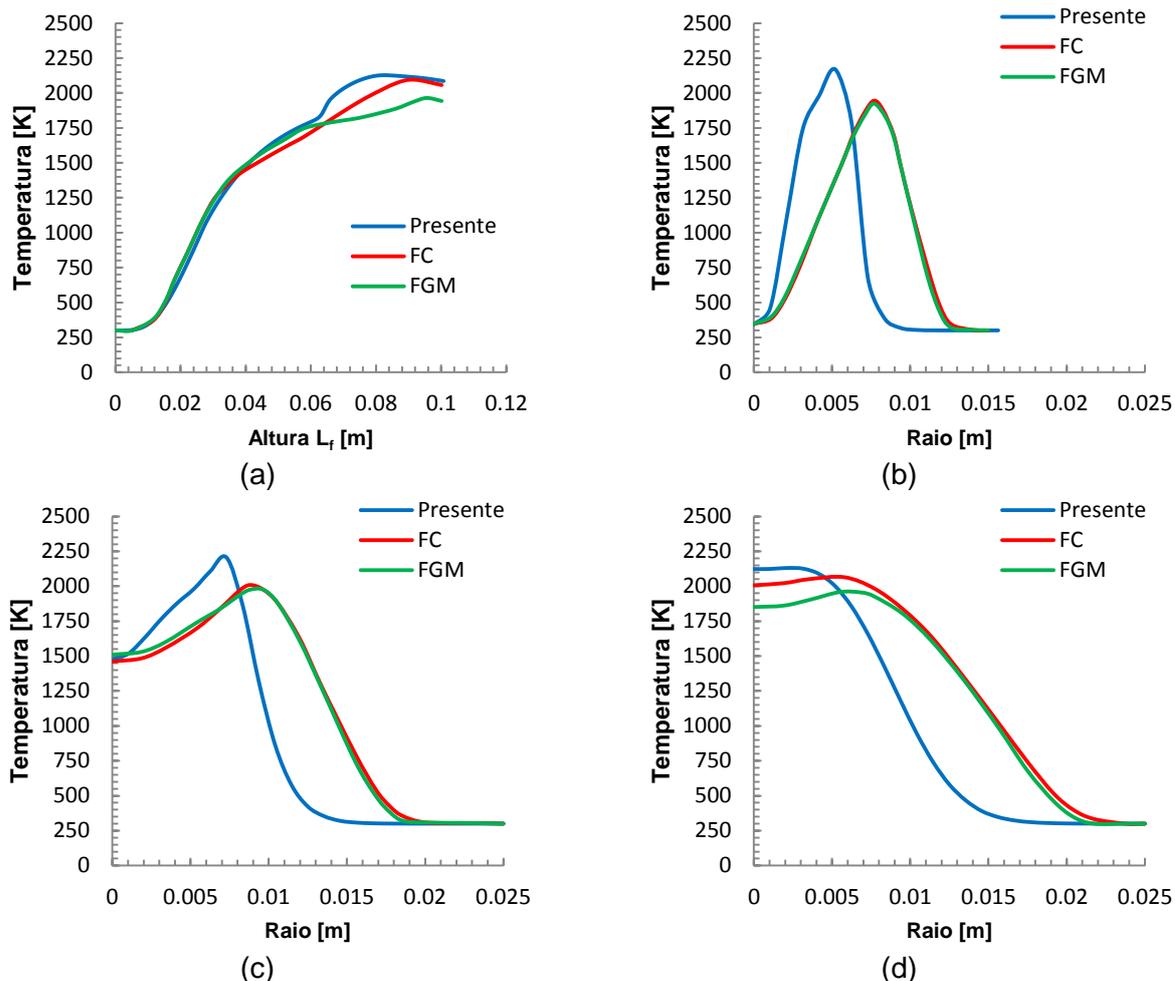


Figura 6.4 – Perfil de temperatura para o presente trabalho (Presente), e para o trabalho de Verhoeven et al 2011 (FC para cinética química detalhada, e FGM para *flamelet generated manifold*) : (a) Linha central; (b) Direção radial, a 0,01 m da entrada; (c) Direção radial, a 0,04 m da entrada; (d) Direção radial, a 0,08 m da entrada.

Na Figura 6.4, observa-se uma concordância qualitativa entre os casos indicados. O perfil de temperaturas na linha de centro encontrado neste trabalho apresenta um comportamento bastante próximo àqueles de Verhoeven et al, 2011, revelando variações para valores acima de 1750K. No entanto, pouca diferença é visível para temperatura máxima e a posição em que ela se encontra. Nos perfis radiais o deslocamento das curvas de temperatura entre os trabalhos, representando um estreitamento da chama, é justificado pelo raio da região de injeção de combustível: 0,0024m de conforme Nunes, 2012, para 0,006m em Verhoeven et al, 2011.

6.3. CONCENTRAÇÃO DAS ESPÉCIES QUÍMICAS

A Figura 6.5 mostra os perfis radiais das concentrações das espécies químicas nas alturas de 0,01, 0,04 e 0,08m a partir da região de injeção do combustível a uma vazão de 0,3 NLPM. A concentração de combustível no eixo de simetria juntamente à região de injeção apresenta seus valores máximos, e tende a diminuir no sentido radial até a frente de chama onde é consumido. Já o oxidante apresenta valores máximos junto às bordas externas do domínio, mas também cai em direção à chama. A superfície da chama se localiza no ponto de intersecção entre as curvas de concentração de metano e ar, onde por sua vez, há as frações mássicas máximas dos produtos. Ao contrário das simplificações analíticas, as diferenças de

posicionamento dos máximos valores de concentração de cada produto da combustão indicam uma região de reação com espessura finita.

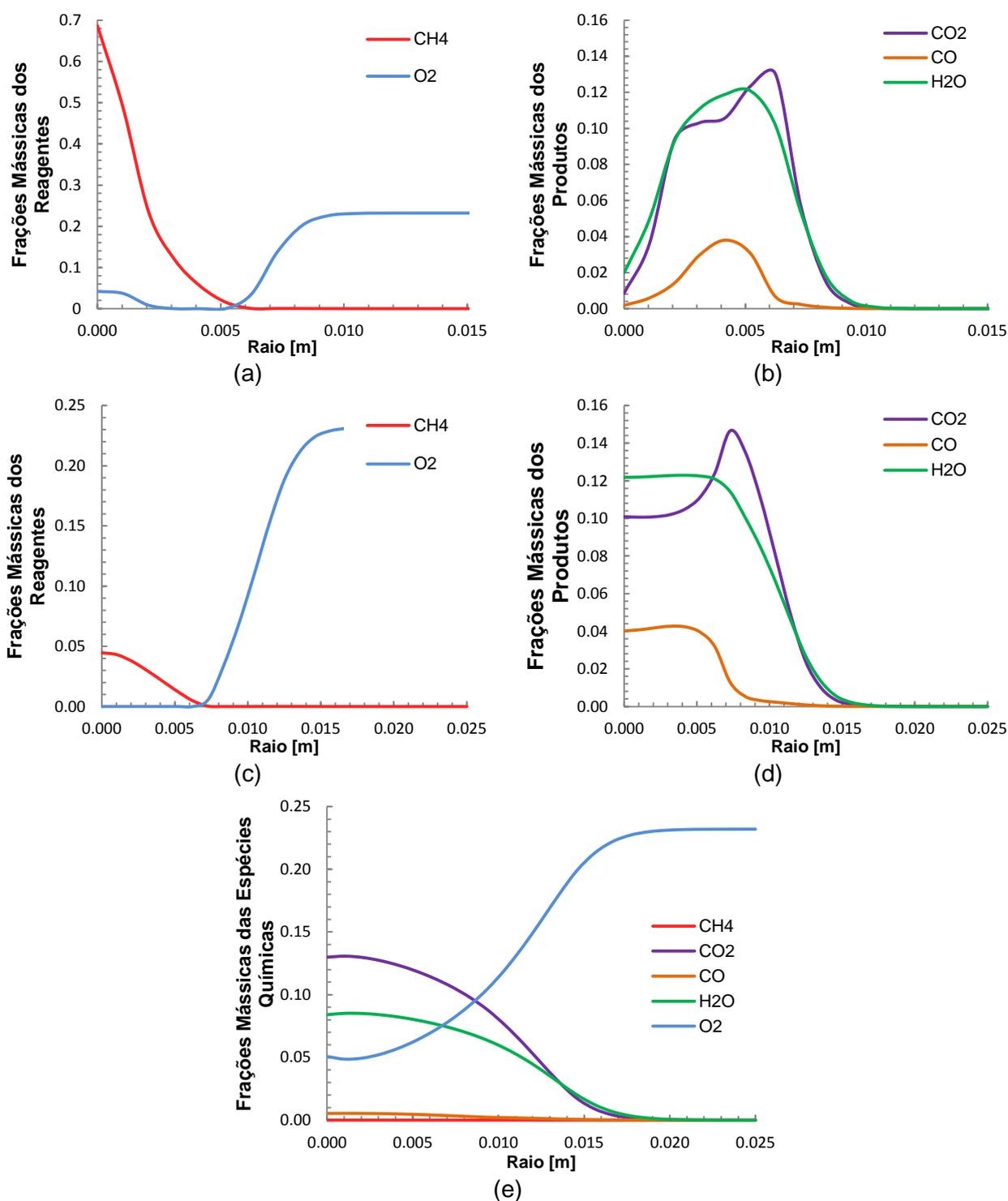


Figura 6.5 – Perfil radial das frações mássicas das espécies químicas: (a) Reagentes na altura de 0,01m; (b) Produtos na altura de 0,1m; (c) Reagentes na altura de 0,04m; (d) Produtos na altura de 0,04m; (e) Reagentes e produtos na altura de 0,08m.

Uma observação interessante na Figura 6.5 (a) é a presença de uma parcela de oxidante junto ao comburente. Supõe-se que este evento ocorra devido ao afastamento da

chama em relação à superfície de injeção permitindo a penetração de ar pela base da chama, como também pode ser visto em Walsh et al, 2000.

A forma não esperada de algumas curvas, visível principalmente na Figura 6.5 (b) e (e), junto a linha central é uma importante pista de que o sistema não está totalmente estabilizado sob o ponto de vista computacional.

Os campos de concentração obtidos para as espécies químicas são mostrados no Apêndice I para uma seção transversal de todo o domínio computacional. As espécies químicas são representadas de acordo com as três vazões abordadas neste trabalho.

6.4. COMPRIMENTO DE CHAMA

Para determinar o comprimento de chama pode-se usar como critério o valor máximo na linha de centro de algumas variáveis do problema. Como exemplo, os perfis de temperaturas, frações mássicas de CO_2 e taxas de formação de CO_2 no eixo de simetria do domínio computacional são mostrados na Figura 6.6 para as três vazões estudadas.

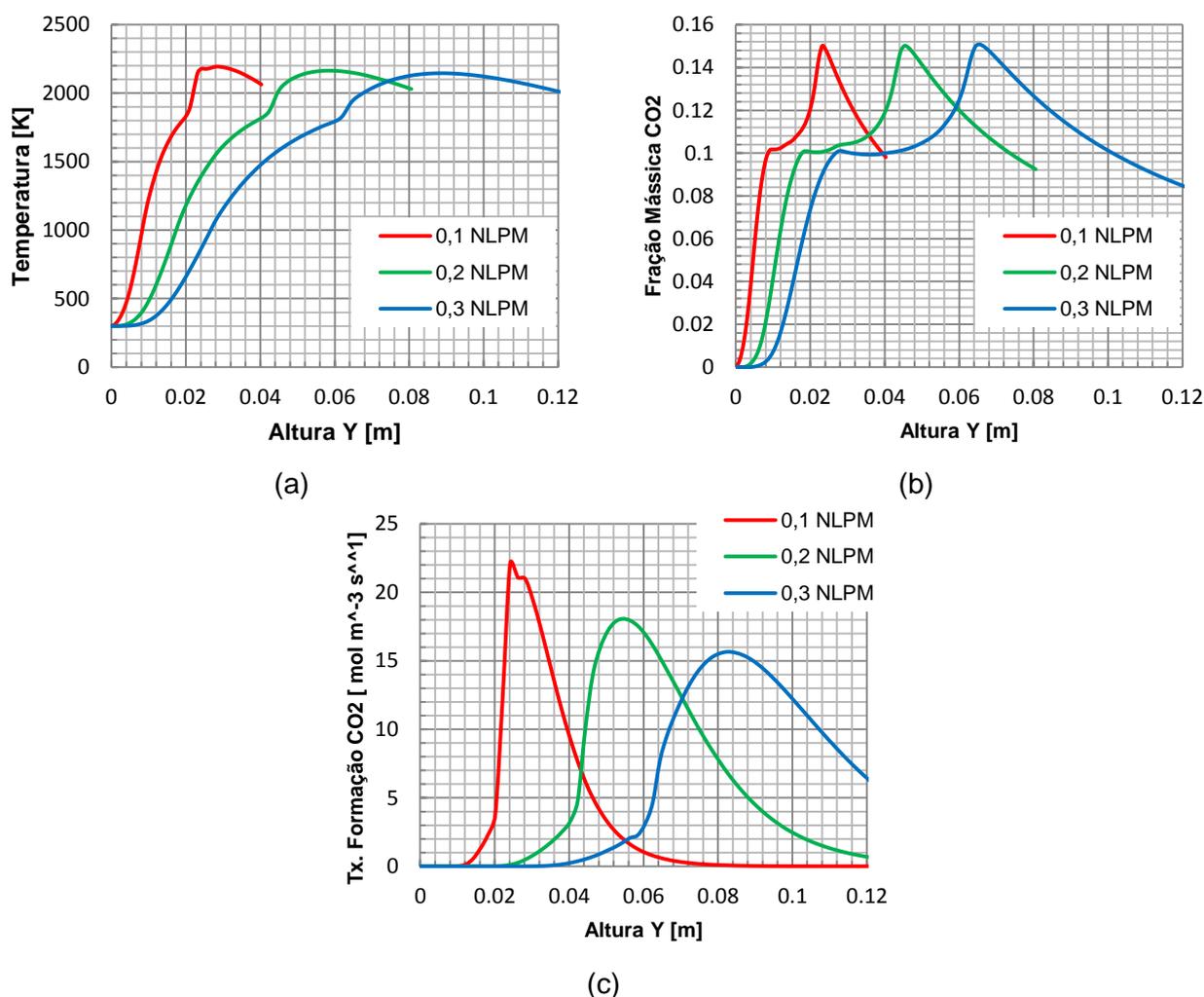


Figura 6.6 – Perfis no eixo de simetria: (a) Temperatura; (b) Fração mássica de CO_2 ; (c) Taxa de formação de CO_2 . Para vazões de 0,1 NLPM, 0,2 NLPM e 0,3 NLPM

A partir da avaliação dos perfis de temperatura, fração mássica de CO_2 e taxa de reação de CO_2 determinou-se o comprimento de chama, cujos valores são mostrados na Tabela 6.1, para cada uma das vazões de combustível propostas. A Figura 6.7 mostra a

comparação desses valores com outros trabalhos analíticos e experimentais encontrados na literatura.

Tabela 6.1 – Comprimento de chama para Temperatura e concentração de CO_2 .

Vazão [NLPM]	L_f [m] para T_{\max}	L_f [m] para $Y_{\text{CO}_2, \max}$	L_f [m] para R_{CO_2}
0.1	0.028	0.023	0.024
0.2	0.058	0.045	0.054
0.3	0.090	0.065	0.082

Observando estes dados fica claro que para uma análise considerando apenas as temperaturas, a chama se estenderia a valores acima daqueles calculados pela teoria de Burke-Shumann, 1928, e medidos por Nunes, 2012. De modo contrário, a concentração de dióxido de carbono prevê com exatidão aqueles obtidos por Rope, 1977a e 1977b, para a frente de chama. As taxas de formação de CO_2 indicam valores intermediários pouco acima daqueles de Burke-Shumann, 1928.

Os resultados computacionais apresentaram boa concordância às demais curvas para a de vazão de 0,1 SLPM. Os valores encontrados para os três critérios propostos são próximos daqueles obtidos por Blanke, 2007, e por Rope, 1977a e 1977b. Para vazões maiores os tamanhos das chamas apresentam divergências importantes

A condição anormal do campo de temperatura da chama para as maiores vazões, conforme Figura 6.4 (b) e (c), pode ser a principal causadora das divergências para comprimento de chama entre os três critérios citados. As divergências também podem estar associadas as considerações adotadas nas simulações e a cinética química global utilizada. Assim, se faz necessário um trabalho investigativo mais refinado sob este aspecto.

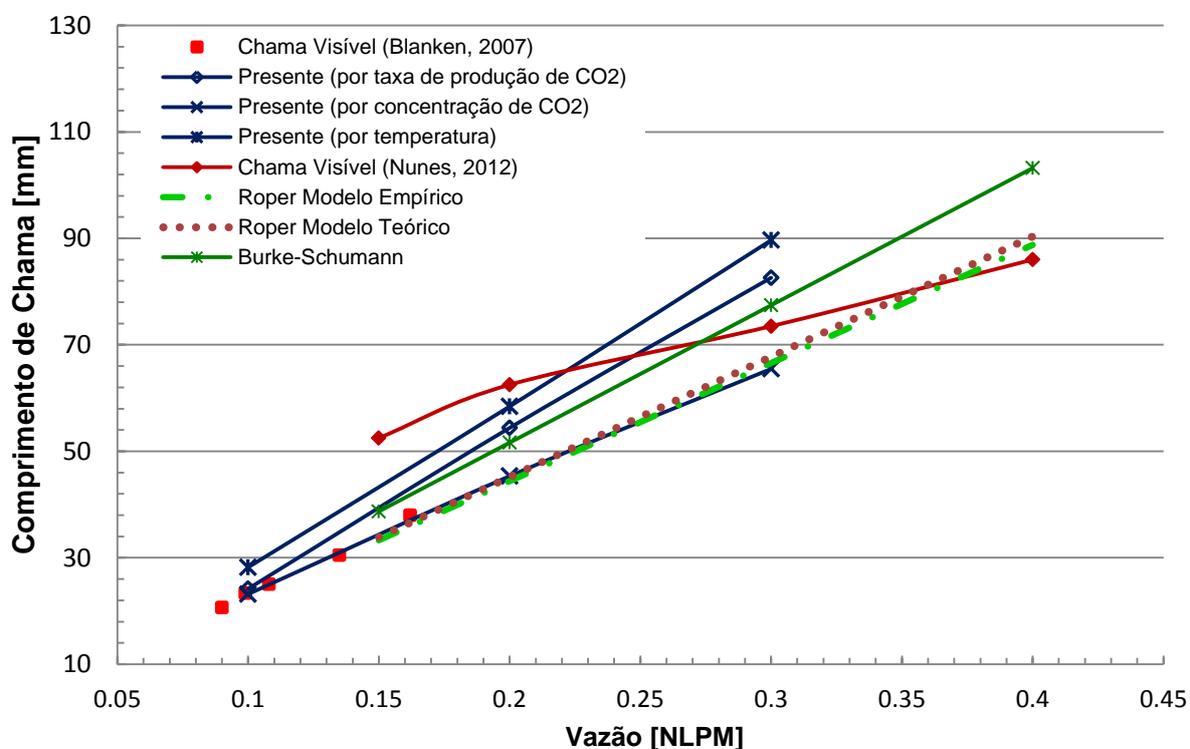


Figura 6.7 - Comprimentos de chama visível para metano a pressão atmosférica adaptada de [Nunes, 2012].

7. CONCLUSÕES

Este trabalho apresentou a simulação numérica da combustão de metano e ar para uma chama laminar difusa do tipo jato empregando cinética global de dois passos no software Ansys FLUENT.

Os resultados do campo de temperaturas e comprimento de chama, principalmente para a menor vazão estudada, são condizentes com o trabalho de outros autores. As análises qualitativas revelaram que os comportamentos dos perfis das espécies químicas foram condizentes com as características deste tipo de chama (Turns, 2000). A discrepância no comprimento de chama entre as três variáveis consideradas pode estar relacionada a anomalia apresentada no campo de temperaturas para as maiores vazões, bem como pode estar associada a penetração de oxigênio da base da chama. Isso indica que um estudo mais refinado sobre este comportamento seja realizado.

Avaliando os dados de comprimento de chama fica claro que uma metodologia a qual envolve apenas a consideração da posição da temperatura máxima para uma cinética química global genérica não seria totalmente válida. Apesar de fornecer uma boa aproximação para baixas vazões, tende a superestimar tal comprimento com o aumento da vazão. Assim, análises nas quais também se considera a concentração do produto de maior participação no balanço de massas e suas taxas de formação são mais adequadas para se determinar a região aproximada da frente de chama. Ressalta-se, no entanto, que há indicativos fortes de que a solução obtida ainda não representa uma solução adequadamente convergida o que impede conclusões definitivas.

Para dar continuidade a essa linha de pesquisa sugere-se algumas melhorias passíveis de serem realizadas. Conforme Ellsey et al, 1990, um ajuste da entalpia seria uma alternativa a ser avaliada para o controle das temperaturas da chama. Isso pode exigir um ajuste simultâneo do mecanismo de reação, o que pode ser feito no software CHEMKIN. A utilização de modelos mais robustos para a difusão de massa, a consideração da formação de fuligem e da transferência de calor por radiação são caminhos naturais a serem seguidos.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ANSYS Inc.; **“Ansys Fluent User Theory Guide”**, Release 12.1, 2010.

Blanken, I.R.; **“Laminar Co-flow Burner”**, Internal Research Traineeship, Eindhoven University of Technology, 2007.

Burke S.P. and Schumann T.E.W.; **“Difusion Flames”**, Combustion Simposium, Volume 20, N°10, pp 998-1004, 1928.

Coelho, P.; Costa, M.; **“Combustão”**, Edições Orion, 1° edição, 2007.

Ellsey, J.L.; Laskey, k.L. and Oran, E.S.; **“Study of Confined Diffusion Flame”**, Naval Research Laboratory, NRL Memorandum Report 6704, 1990.

Fengshan, L.; Hongsheng, G. and Smallwood, G.J.; **“Effects of radiation model on the modeling of a laminar coflow methane/air diffusion flame”**, Combustion and Flame, Volume 138, pp. 136-154, 2004.

Nunes, C.D.; **“Estudo Experimental do Comprimento de Chamas Difusivo Laminares”**, Trabalho de Conclusão de Curso, 2012.

Rope, F.G.; **“The prediction of laminar jet diffusion flames sizes: Part I. Theoretical model”**, Combustion and Flame, Volume 29, pp. 219-226, 1977a.

Rope, F.G., Smith, C. and Cunningham A.C; **“The prediction of laminar jet diffusion flames sizes: Part II. Experimental verification”**, Combustion and Flame, Volume 29, pp. 227-234, 1977b.

Patankar, S.V.; **“Numerical Heat Transfer and Fluid Flow”**, Hemisphere Publishing Company. 1980.

Turns, S.R.; **“An Introduction To Combustion”**, McGraw-Hill Higher Education, 2nd ed., 2000.

Verhoeven L.M., Ramaekers W.J.S., van Oijen, J.A. and de Goey, L.P.H.; **“Modeling non-premixed laminar co-flow flames using flamelet-generated manifolds”**, Combustion and Flame, Volume 159, pp. 230-241, 2011.

Walsh, K.T, Fielding, J., Smooke, M.D. and Loong, M.B.; **“Experimental and computational study of temperature, species and soot in buoyant non-buoyant coflow laminar diffusion flames”**, Proceeding of the Combustion Institute, Volume 28, pp. 1973-1979, 2000.

Wang F., Mi J., Li P. and Zheng C.; **“Diffusion flame of a CH₄/H₂ jet in hot low-oxygen coflow”**, International Journal of Hydrogen Energy, Volume 36, pp. 9267-9277, 2011.

Zhang, Q., Guo, H., Smallwood, G.J. and Thomson, M.J.; **“Implementation of an advanced fixed sectional aerosol dynamics model with soot aggregate formation in a laminar methane/air coflow diffusion flame”**, Combustion Theory and Modelling, Volume 12, pp. 621-641, 2008.

APÊNDICE I – CAMPO DE CONCENTRAÇÕES DAS ESPÉCIES QUÍMICAS.

Abaixo seguem os resultados obtidos para os campos das concentrações das espécies químicas. Da esquerda para a direita, respectivamente, são mostradas as soluções para as vazões de 0,01 SLPM, 0,02 SLPM e 0,03SLPM. Por se tratar de gás inerte, o nitrogênio não é representado. As imagens foram obtidas do software Ansys CFD-POST.

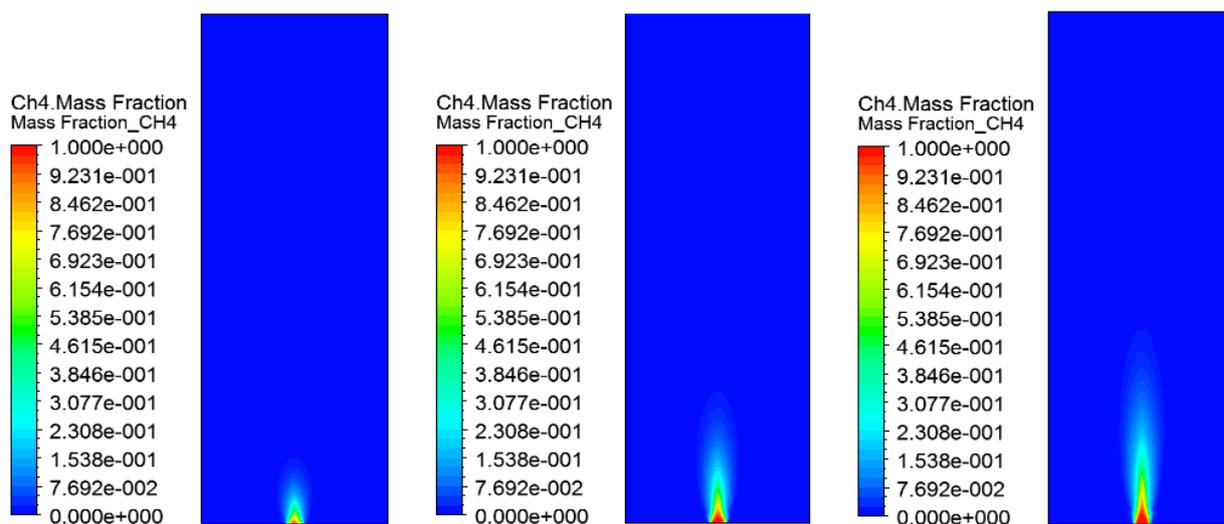


Figura 1 – Frações mássicas de metano.

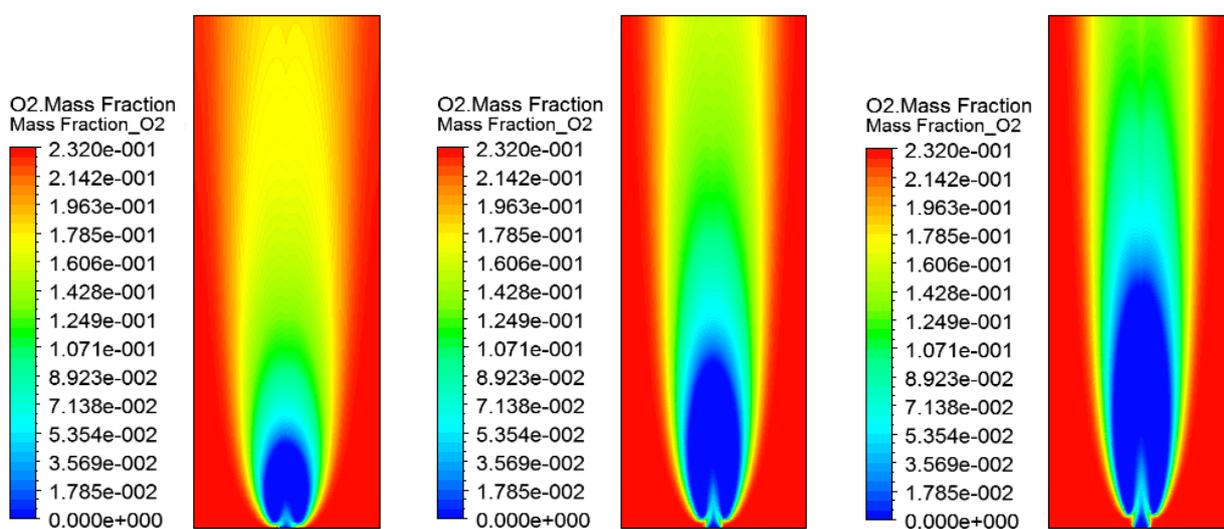


Figura 2 – Frações mássicas de oxigênio.

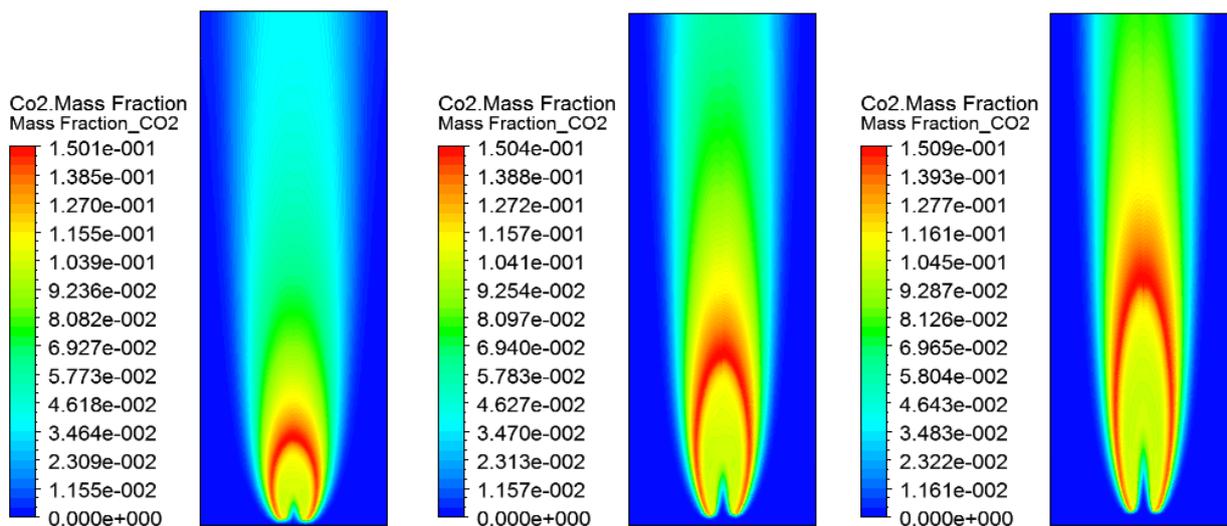


Figura 3 – Frações mássicas de dióxido de carbono.

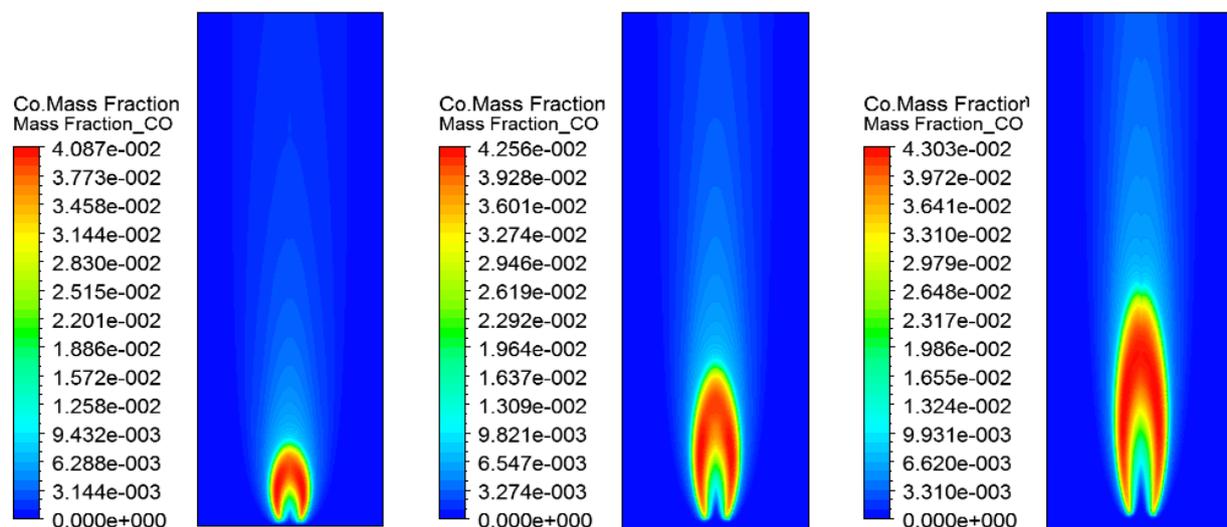


Figura 4 – Frações mássicas de monóxido de carbono.

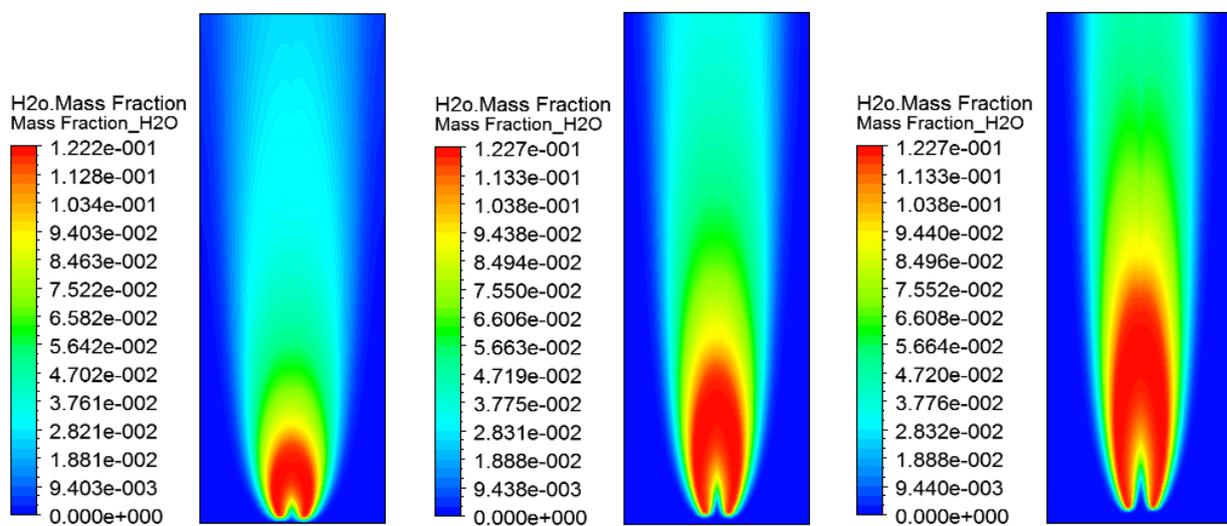


Figura 5 – Frações mássicas de vapor de água.