



Andrea Cristina Carvalho dos Anjos

**Análise de uma Estratégia de Tabulação
In Situ da Cinética Química da
Combustão**

Dissertação de Mestrado

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Mecânica da PUC-Rio como requisito parcial para obtenção do grau de Mestre em Engenharia Mecânica.

Orientador: Prof. Luís Fernando Figueira da Silva

Rio de Janeiro
Outubro de 2011



Andrea Cristina Carvalho dos Anjos

Análise de uma Estratégia de Tabulação *In Situ* da Cinética Química da Combustão

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Mecânica da PUC-Rio como requisito parcial para obtenção do grau de Mestre em Engenharia Mecânica. Aprovada pela Comissão Examinadora abaixo assinada.

Prof. Luís Fernando Figueira da Silva

Orientador

Departamento de Engenharia Mecânica - PUC-Rio

Prof. Guenther Carlos Krieger Filho

Departamento de Engenharia Mecânica - USP

Dr. Ricardo Serfaty

Centro de Pesquisa e Desenvolvimento da Petrobras -
Petróleo Brasileiro S.A.

Prof. José Eugênio Leal

Coordenador Setorial do Centro Técnico Científico -
PUC-Rio

Rio de Janeiro, 13 de outubro de 2011

Todos os direitos reservados. É proibida a reprodução total ou parcial do trabalho sem autorização da autora, do orientador e da universidade.

Andrea Cristina Carvalho dos Anjos

Graduou-se em Engenharia Mecânica pela Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro – PUC-Rio (Rio de Janeiro, Brasil) em 2009.

Ficha Catalográfica

Anjos, Andrea Cristina Carvalho dos

Análise de uma estratégia de tabulação *in situ* da cinética química da combustão / Andrea Cristina Carvalho dos Anjos; orientador: Luís Fernando Figueira de Silva. - Rio de Janeiro: PUC, Departamento de Engenharia Mecânica, 2011.

137 f, 29,7 cm

1. Dissertação (mestrado) -- Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Departamento de Engenharia Mecânica.

Inclui referências bibliográficas.

1. Engenharia Mecânica - Teses. 2. Combustão. 3. Simulação. 4. Tabulação. I. Da Silva, Luís Fernando. II. Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro. Departamento de Engenharia Mecânica. III. Título

CDD: 621

Dedico esta dissertação a vovó Francisca e ao Rafael.

Agradecimentos

Ao CNPq, a CAPES e a PUC-Rio pelos auxílios concedidos;

Aos professores do Departamento de Engenharia Mecânica; pelos ensinamentos;

A Deus, por tudo;

Aos colegas de trabalho e de estudo da PUC-Rio;

Ao meu orientador Luís Fernando pelas importantes contribuições e dedicação ao longo deste trabalho;

Aos professores participantes da banca examinadora;

A Petrobras e ao Ricardo Serfaty;

Aos amigos e familiares;

Ao Américo Cunha por toda ajuda e conhecimento passado a mim;

Ao Rafael, por todo amor e compreensão;

A Érica, pela amizade e por toda ajuda;

A Luna, pelo apoio.

Resumo

Anjos, Andrea Cristina Carvalho dos; Figueira da Silva; Luís Fernando. **Análise de uma estratégia de tabulação *in situ* da cinética química da combustão.** Rio de Janeiro, 2011. 137p. Dissertação de Mestrado - Departamento de Engenharia Mecânica, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro.

A simulação numérica de processos de combustão é uma ferramenta cada vez mais utilizada para o projeto, a análise e a otimização de turbinas, motores e fornos de combustão, entre outros. No entanto, um dos principais inconvenientes que limitam a descrição fiel da realidade de modelos de combustão é o esforço computacional necessário para a solução das equações de transporte das propriedades do escoamento reativo, como frações de massa das espécies químicas, que incluem um termo fonte não linear associado à lei de Arrhenius. A rigidez e a carga computacional relacionadas com a determinação deste termo domina o custo de simulações que empregam modelos detalhados da cinética química da combustão. Esta dissertação descreve um estudo cujo objetivo é reduzir tais custos mediante a utilização de uma técnica de tabulação automática da evolução termoquímica da mistura. Assim, este trabalho apresenta a discussão do estado da arte da técnica denominada tabulação adaptativa *in situ*, que exhibe desempenho considerável em termos de tempo computacional, na determinação dos termos fontes químicos, e propõe uma modificação do algoritmo atrasando o início da tabulação, para evitar o armazenamento de composições existentes apenas no estado transiente da queima, as quais não são representativas do regime estatisticamente estacionário. Um estudo dos resultados obtidos, em um reator parcialmente agitado com CO/O₂, mostra ganhos superiores a 95% na altura da árvore binária utilizada para tabulação, isso se reflete no custo de armazenamento e na acurácia dos resultados. Uma análise do tempo computacional caracteriza situações em que a nova estratégia de tabulação pode levar à redução do mesmo, quando comparado com a estratégia original. Seu desempenho é confirmado pelo estudo do sistema químico CH₄/ar.

Palavras-chave

Combustão; Simulação; Tabulação

Abstract

Anjos, Andrea Cristina Carvalho dos; Figueira da Silva; Luís Fernando (Advisor). **Analysis of an in situ tabulation strategy of combustion chemical kinetics**. Rio de Janeiro, 2011. 137p. MSc. Dissertation - Departamento de Engenharia Mecânica, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro.

The numerical simulation of combustion processes is an important tool used for design, analysis and optimization of turbines, combustion engines and furnaces, among others. However, one of the major drawbacks that limit the faithful description of reality of combustion models is the computational effort required for the transport equations solution of reactive flow properties such as chemical species mass fractions, which include a nonlinear source term associated to the Arrhenius law. The stiffness and the computational burden related to the determination of such term, largely dominate the cost of simulations that employ detailed models of chemical kinetics combustion. This dissertation describes a study whose objective is to reduce these costs by using a of automatic tabulation technique of the mixture's thermochemical evolution. Hence, this work presents a state of the art discussion of the technique named *in situ* adaptive tabulation – ISAT, which shows considerable performance in terms of computational time for the determination of the chemical sources terms, and proposes a modification in the algorithm by delaying the table start to avoid the storage of compositions that exist only in transient state, and which are not statistically representative of the stationary regime. A systematic study of the results in a partially stirred reactor with CO/O₂, shows more than 95% gains at the binary tree height used for tabulation, the gains are also optimistic in the storage demand and the results accuracy. A computational time analysis characterizes situations in which the new strategy tabulation could reduce it, when compared to the original algorithm. The strategy performance is confirmed by the study of the chemical system CH₄/ar.

Keywords

Combustion; Simulation; Table

Sumário

1 Introdução	20
1.1. Objetivo	21
1.2. Estrutura da Dissertação	21
2 Revisão Bibliográfica	23
2.1. Evoluções da Técnica ISAT	24
2.1.1. Introdução	24
2.1.2. ISAT-5	26
2.1.3. Correção e Verificação de Erros	32
2.1.4. Aglomeração e Múltiplas Árvores	34
2.1.5. Balanceamento Dinâmico da Árvore Binária	35
2.1.6. Especificação de Regiões de Acurácia e de Inacurácia	36
2.1.7. Operadores de Separação	44
2.2. Algumas Técnicas que Consideram a Estrutura da Combustão	45
2.2.1. F-TACLES (Tabulação Química Filtrada para Simulação de Grandes Escalas)	45
2.2.2. MFM (Tubos Multidimensionais Gerados por Elemento de Chama)	48
2.3. Algumas Técnicas que Não Consideram a Estrutura da Combustão	49
2.3.1. Redução por Análise dos Passos de Reação	49
2.3.2. ICE-PIC	50
2.4. Considerações Finais	59
3 Formulação Matemática	61
3.1. Fundamentos da Técnica Original	61
3.2. Definições Auxiliares	66
3.2.1. Medidas de Erro	67
3.2.2. Medidas de Ganhos Com a Nova Estratégia	68

3.2.3. Considerações Quanto ao Custo Computacional	68
3.3. ISAT Modificado	70
3.3.1. Modificações no Código ISAT Existente	70
3.3.2. Dados de Entrada	72
3.3.3. Saídas do ISAT	74
3.3.4. Caracterização do Ganho Com Relação ao Tempo de Processamento	77
4 Resultados e Discussões	81
4.1. Influência da Semente dos Processos Estatísticos	82
4.1.1. Análise do Erro	84
4.1.2. Análise das Saídas Características do Algoritmo ISAT	89
4.2. Estudo da Nova Estratégia de Tabulação – Algoritmo Modificado – CO/O ₂	93
4.2.1. Árvore Não Saturada	97
4.2.2. Árvore Saturada	108
4.3. Estudo da Nova Estratégia de Tabulação – Algoritmo Modificado – CH ₄ /ar	119
5 Conclusões e Perspectivas	125
6 Referências	127
Apêndice - Artigo	129

Lista de Figuras

Figura 2-1. Esquema simplificado da técnica ISAT-5.	27
Figura 2-2. Esboço de uma árvore binária elipsoidal simples – EBT (Lu e Pope, 2009).	29
Figura 2-3. Esquema explicativo da etapa de tentativa de busca na tabela ISAT.	30
Figura 2-4. Tempo médio de CPU (μ s) por consulta em função do erro a 90 por cento. Tolerância do erro: $\varepsilon_{tol} = 1 \times 10^{-4}$ (verde); $\varepsilon_{tol} = 2 \times 10^{-4}$ (azul); $\varepsilon_{tol} = 3 \times 10^{-4}$ (vermelho). Os números 0, 0.01, 0.03, 0.1, 0.3, 0.5 indicam o valor da fração ζ , que controla a quantidade de correção e verificação feita. (Pope e Ren, 2009)	33
Figura 2-5. Interseção do elipsoide de acurácia com a região convexa. Os EOAs não são conformes à região convexa (adaptado de (Abrol, 2009)).	36
Figura 2-6. Ilustração do crescimento do EOA no modo 1 (Liu e Pope, 2005).	38
Figura 2-7. Ilustração do crescimento do elipsoide de acurácia usando o modo 1, no espaço transformado. (Liu e Pope, 2005)	39
Figura 2-8. Ilustração dos diferentes modos de crescimento. Linhas sólidas: modo1. Linhas pontilhadas: hipercubo usado no modo 2. Linhas tracejadas: crescimento do EOA usando o modo 2. (Liu e Pope, 2005)	39
Figura 2-9. Ilustração do modo de crescimento 3. Linhas sólidas: EOA original. Linhas pontilhadas: cone usado no modo 3. Linhas tracejadas: crescimento do EOA no modo 3 (Liu e Pope, 2005).	40
Figura 2-10. Erros numéricos. Esquemas de Strang (Strang-PC1, Strang-PC2, Strang-Lin) e esquemas escalonados (Staggered-PC1) (Pope e Ren, 2009).	45
Figura 2-11. Ilustração da região realizável para o sistema idealizado H_2/O , com 2 trajetórias originando na fronteira e terminando no ponto de equilíbrio (Ren, Pope, <i>et al.</i> , 2006).	52

Figura 2-12. Ilustração da região realizável reduzida (hachurada), como a projeção da região realizável C^+ . A figura também mostra a região viável F (Ren, Pope, <i>et al.</i> , 2006).	54
Figura 2-13. Tubo CEM, em negrito está a borda equilíbrio restrito $\partial MCEze$ (Ren, Pope, <i>et al.</i> , 2006).	55
Figura 2-14. Tubo de equilíbrio invariante restrito (ICE), para um sistema idealizado, que é a união das trajetórias de reação da borda linhas do equilíbrio restrito (em negrito) (Ren, Pope, <i>et al.</i> , 2006).	56
Figura 2-15. Representação da região realizável e do <i>preimage manifold</i> (Ren, Pope, <i>et al.</i> , 2006).	57
Figura 2-16. Representação da interseção entre <i>preimage manifold</i> e tubo de equilíbrio restrito (CEM). Essa interseção é a pré-imagem da curva de equilíbrio restrito (CE-PIC) (Ren, Pope, <i>et al.</i> , 2006).	57
Figura 2-17. Esquema do método ICE-PIC (Ren, Pope, <i>et al.</i> , 2006).	59
Figura 3-2. Evolução da medida da fração de massa das espécies químicas: (a) CO, (b) CO ₂ , (c) O, (d) O ₂ .	75
Figura 3-3. Evolução da temperatura média dentro do reator.	75
Figura 3-4. Evolução do erro médio: (a) Erro médio para o cálculo da fração de massa do O. (b) Erro médio para o cálculo da temperatura dentro do reator.	76
Figura 3-5. Gráficos de saídas características. A=número de adições; G=número de crescimentos; R= número de recuperações; DE= número de avaliações diretas; H=altura da árvore binária de busca. (a) Derivada no tempo das saídas características, (b) Saídas características.	76
Figura 3-6. Curva de ganho com relação ao tempo de CPU para caso particular. CO/O ₂ com $R_t=1/6$.	80
Figura 4-1. Erro do cálculo da evolução da temperatura para as condições da Tabela 4-1, usadas em 3 diferentes ensaios, com o algoritmo original. Situação PaSR, $\tau_m/\tau_r=1/2$.	86
Figura 4-2. Erro do cálculo da evolução da temperatura para as condições da Tabela 4-1 usadas em 3 diferentes ensaios, com o algoritmo original. Situação quase-PSR, $\tau_m/\tau_r=1/10$.	88

Figura 4-3. Saídas característica do ISAT para as condições iniciais da Tabela 4-1 calculadas em 3 ensaios, usando o algoritmo original. A=adições, G=crescimentos, R=recuperações, DE=avaliações diretas, H=altura da árvore. Situação PaSR, $\tau_m/\tau_r=1/2$.	90
Figura 4-4. Saídas característica do ISAT para as condições iniciais da Tabela 4-1 calculadas em 3 ensaios quase-PSR, usando o algoritmo original. A=adições, G=crescimentos, R=recuperações, DE=avaliações diretas, H=altura da árvore. Situação quase-PSR, $\tau_m/\tau_r=1/10$.	92
Figura 4-5. Saídas características para a formulação original - caso 1. A=adições, G=crescimentos, R=recuperações, DE=avaliações diretas, H=altura da árvore.	98
Figura 4-6. Saídas características para a nova estratégia - caso 1. A=adições, G=crescimentos, R=recuperações, DE=avaliações diretas, H=altura da árvore.	98
Figura 4-7. Taxa das saídas características e árvore binária do ISAT – casos 2 e 4. A=adições, G=crescimentos, R=recuperações, DE=avaliações diretas, H=altura da árvore.	102
Figura 4-8. Saídas características do ISAT – casos 2 e 4. A=adições, G=crescimentos, R=recuperações, DE=avaliações diretas, H=altura da árvore.	103
Figura 4-9. Evolução da temperatura dentro do reator. Casos 4 e 7.	105
Figura 4-10. Variância da temperatura calculada como: $T'^2 = T_2 - T_2 T_{eq} - T_{in}^2$. Casos 4 e 7.	106
Figura 4-11. Ganhos relativos - casos 1, 1a, 1b e 1c.	107
Figura 4-12. Saídas características do ISAT - caso 5. A=adições, G=crescimentos, R=recuperações, DE=avaliações diretas, H=altura da árvore.	110
Figura 4-13. Saídas características do ISAT - caso 8. A=adições, G=crescimentos, R=recuperações, DE=avaliações diretas, H=altura da árvore.	110
Figura 4-14. Evolução da temperatura reduzida dentro do reator - caso 5.	113

Figura 4-15. Ganhos em relação ao aumento do tempo inicial de tabulação – caso 5 e suas variações.	113
Figura 4-16. Saídas características do ISAT – variantes do caso 8. A=adições, G=crescimentos, R=recuperações, DE=avaliações diretas, H=altura da árvore.	115
Figura 4-17. Ganhos em relação ao aumento do tempo inicial de tabulação – caso 8 e suas variações.	117
Figura 4-18. Zoom da curva de temperatura até 12 tempos de residência - caso 8.	118
Figura 4-19. Evolução da temperatura no reator - caso 8.	118
Figura 4-20. Variância da temperatura calculada como: $T'^2 = T_2 - T_2^{Teq} - T_{in}^2$. Caso 8.	119
Figura 4-21. Saídas características do ISAT. A=adições, G=crescimentos, R=recuperações, DE=avaliações diretas, H=altura da árvore – CH ₄ /ar.	123

Lista de Tabelas

Tabela 2-1. Estatísticas de erro do ISAT para diferentes estratégias de crescimento com $\varepsilon_{tol} = 1 \times 10^{-4}$ (Liu e Pope, 2005).	42
Tabela 3-1. Tempos médios das operações características do ISAT, no caso da combustão CO/O ₂ .	77
Tabela 4-1. Condições iniciais de simulação da combustão do CO/O ₂ usando o algoritmo original ISAT.	83
Tabela 4-2. Saídas características do ISAT para as mesmas condições iniciais.	89
Tabela 4-3. Saídas características do ISAT para as mesmas condições iniciais.	93
Tabela 4-4. Condições iniciais usadas nos casos simulados para a combustão da mistura CO/O ₂ .	94
Tabela 4-5. Condições para o estudo paramétrico do CO/O ₂ - árvore não saturada.	95
Tabela 4-6. Ganho calculado para cada caso avaliado com o algoritmo modificado em relação ao algoritmo original - árvore não saturada.	95
Tabela 4-7. Condições para o estudo paramétrico do CO/O ₂ - árvore saturada.	96
Tabela 4-8. Ganho calculado para cada caso avaliado com o algoritmo modificado em relação ao algoritmo original - árvore saturada.	96
Tabela 4-9. Erro absoluto fornecido pelo ISAT modificado e original e seus respectivos ganhos, em cada elemento considerado e temperatura, para os casos 2 e 4.	104
Tabela 4-10. Comparação do número de adições, recuperações e altura da árvore entre os casos 4 e 7.	104
Tabela 4-11. Valores numéricos para as saídas características - caso 8 e suas variações.	116
Tabela 4-12. Condições iniciais usadas nos casos simulados para a	

combustão da mistura CH ₄ /ar.	121
Tabela 4-13. Ganho calculado para cada caso avaliado com o algoritmo modificado em relação ao algoritmo original.	121
Tabela 4-14. Tempos médios das operações características do ISAT, no caso da combustão CH ₄ /ar.	124

Nomenclatura

Caracteres Romanos Maiúsculos

A	Matriz de sensibilidade (gradiente)
B	Matriz de combinação linear
C	Espaço de composição
B	Espaço de composição reduzida
F	Região viável
E	Elipsoide
E	Matriz composição das espécies
L	Matriz Cholesky do elipsoide de acurácia
M	Tubo atrator
P	Projeção
R	Mapa de reação
R^l	Aproximação linear para o mapa de reação
S	Vetor de reação
T^*	Temperatura reduzida
T	Temperatura
V	Volume
W	Massa molar
Y	Fração mássica das espécies químicas
Y_i	Fração mássica da espécie química i

Caracteres Romanos Minúsculos

c	Variável de progresso
g	Ganho
h	Entalpia específica
m	Vazão mássica
nA	Número de adições na árvore binária
n_a	Dimensão do espaço reduzido

n_e	Número de entradas permitidas na árvore binária
n_{el}	Número de elementos
n_F	Número de folhas na árvore binária
n_{in}	Número de partículas que entram no reator
n_N	Número de nós na árvore binária
n_p	Número de partículas
nR	Número de recuperações na árvore binária
n_r	Número de variáveis representadas
n_s	Número de espécies químicas
n_φ	Dimensão do vetor de entrada
p	Pressão
\mathbf{r}	Vetor composição reduzida
r	Resultado numérico
t	Tempo
t_T	Tempo para iniciar tabulação
\mathbf{z}	Vetor fração molar

Caracteres Gregos Maiúsculos

Γ	Vetor de mistura
Δt	Passo no tempo

Caracteres Gregos Minúsculos

ε	Erro
ε_{max}	Erro máximo
ε_{ref}	Erro de referência
ε_{tol}	Tolerância de erro do ISAT
ρ	Densidade
τA	Tempo gasto na adição
τDI	Tempo gasto na integração direta
τ_m	Tempo de mistura

τ_p	Tempo de emparelhamento
τ_r	Tempo de residência
τ^*	Tempo total de simulação
φ	Composição química
φ_0	Composição química inicial
ψ	Propriedade termoquímica qualquer
$\dot{\omega}$	Taxa de reação química

Superescritos

*	Reduzida
+	Realizável
<i>CE</i>	Equilíbrio restrito
<i>ICE</i>	Equilíbrio restrito e invariante
<i>l</i>	Aproximação linear
<i>q</i>	Ponto consultado
<i>p</i>	Ponto limite
<i>T</i>	Transposta

Subescritos

<i>eq</i>	Equilíbrio
<i>g</i>	Global
<i>in</i>	Entrada
<i>m</i>	Modificado
<i>o</i>	Original
n_p	Enésima partícula
n_s	Enésima espécie química

Abreviaturas, Siglas e Símbolos

<i>CEM</i>	Tubo de equilíbrio restrito
<i>CPU</i>	Unidade central de processamento
<i>DI</i>	Integração direta
<i>ECC</i>	Correção e verificação de erro
<i>EOA</i>	Elipsoide de acurácia
<i>F-TACLES</i>	<i>Filtered tabulated chemistry for large eddy simulation</i>
<i>ICE-PIC</i>	<i>Invariant constrained equilibrium edge preimage curve</i>
<i>ISAT</i>	<i>In situ adaptive tabulation</i>
<i>MFM</i>	<i>Multidimensional flamelet-generated manifolds</i>
<i>MFU</i>	Mais frequentemente usado
<i>MRU</i>	Mais recentemente usado
<i>PaSR</i>	Reator parcialmente agitado
<i>PMSR</i>	<i>Pairwise mixing stirred reactor</i>
<i>PSR</i>	Reator perfeitamente agitado
<i>ROA</i>	Região de acurácia
#	Quantidade
<>	Valor médio