



**Louise da Costa Ramos**

**Modelagem computacional de chamas  
laminares não pré-misturadas com  
mecanismo de cinética química detalhada,  
utilizando OpenFOAM**

**Projeto de Graduação**

Projeto de Graduação apresentado ao Departamento de Engenharia Mecânica da PUC–Rio.

Orientador: Luís Fernando Figueira da Silva

Rio de Janeiro  
Dezembro de 2017

## Agradecimentos

Agradeço a meus pais, Ogmar e Emilson Ramos, pelo amor, suporte, incentivo e paciência durante todo o curso.

Agradeço aos meus irmãos , Andreza, Estephany, Giovanna e Xenon pelo atenção, conselhos e companheirismo.

Agradeço ao meu orientador e professor, Luís Fernando Figueira da Silva, pelo apoio, aprendizado, experiência e atenção.

Agradeço aos meus colegas e amigos por toda atenção, companheirismo e apoio psicológico.

Agradeço à PUC-Rio e às agências CAPES pelo auxílio concedido no desenvolvimento desse trabalho.

## Resumo

### **Modelagem computacional de chamas laminares não pré-misturadas com mecanismo de cinética química detalhada, utilizando OpenFOAM**

A combustão é um processo que está presente em quase todos setores sociais, pois 85% da energia consumida pelo homem é gerada por este processo. Apesar de trazer múltiplos benefícios para a humanidade, a combustão também traz a poluição ambiental devido a liberação de gases como a fuligem.

O estudo da combustão e de modelagens computacionais pode auxiliar na redução da emissão de gases poluentes, e por isso, objetiva-se estudar a combustão não pré-misturada em escoamentos laminares de metano e etileno utilizando OpenFOAM.

A chama estudada é do tipo que pode ser estabilizada em um queimador do tipo Gülder. Para a modelagem computacional, utiliza-se a descrição de cinética química detalhada GRI, dois domínios computacionais, duas malhas, diferentes velocidades de escoamento para o combustível e diferentes configurações de simulação (serial e em paralelo). No total, estudou-se 4 casos diferentes da combustão.

Como resultado, obteve-se os perfis de temperatura e de velocidade ao longo do escoamento, a fração mássica de espécies químicas, o perfil de velocidade e temperatura ao longo da chama. Finalmente, os perfis obtidos para cada caso são comparados.

## Palavras-chave

Chamas laminares não pré-misturadas; CFD; OpenFOAM; Mecanismo de cinética detalhada.

## **Abstract**

### **Computational modeling of laminar non-premixed diffusion flames with detailed kinetic mechanism, by using OpenFOAM**

Combustion is a process which is present in almost all social sectors, since 85% of the energy consumed by humans is generated by this process. Although it brings multiple benefits to mankind, combustion also brings environmental pollution due to the release of gases such as soot.

The study of combustion and computational modeling can help reduce the emission of pollutant gases, and therefore, it is aimed to study the non-premixed combustion in laminar flows of methane and ethylene using OpenFOAM.

The flame studied is the one that can be stabilized in a Gülder burner. For computational modeling, the detailed chemical kinetics GRI description, two computational domains, two meshes, different flow velocities for the fuel and different simulation configurations (serial and parallel) are used. In total, 4 different cases of combustion were studied.

As result, the temperature and velocity profiles along the flow, the mass fraction of chemical species, the velocity and temperature profile along the flame were obtained. Finally, the profiles obtained for each case are compared.

## **Keywords**

Laminar diffusion non pré-mixed flames; CFD; OpenFOAM; Detailed kinetic mechanism.

## Sumário

1	Introdução	9
1.1	Introdução Geral . . . . .	9
1.2	Revisão Bibliográfica . . . . .	11
1.3	Objetivo . . . . .	17
1.4	Estrutura do manuscrito . . . . .	18
2	Desenvolvimento Teórico	19
2.1	Modelo Matemático . . . . .	19
2.2	Modelagem da cinética química com descrição detalhada . . . . .	21
2.3	Equações auxiliares . . . . .	23
3	Modelagem Computacional	24
3.1	Domínio e blocos computacionais . . . . .	24
3.2	Malha Computacional . . . . .	26
3.3	Solver . . . . .	27
3.4	Condições de contorno e iniciais . . . . .	30
4	Resultados e Discussões	32
4.1	Tempo de simulação . . . . .	32
4.2	Escoamento no canal de combustível . . . . .	33
4.3	Estrutura de escoamento reativo . . . . .	35
4.4	Comparação das chamas de metano . . . . .	39
4.5	Comparação das chamas de etileno . . . . .	46
5	Conclusões e perspectivas	54
5.1	Conclusão . . . . .	54
5.2	Perspectivas . . . . .	55

## Lista de figuras

1.1	Representação do queimador de Gülder e uma representação em corte.[3]	12
1.2	Representação das dimensões do queimador de Gülder.[3]	13
1.3	Imagem da chama experimental no queimador de Gülder.	14
1.4	Campos de temperatura e isolinhas e perfis radiais de temperatura em $z/h_f = 0,4, 0,6$ para $\dot{V}_c = 121 \text{ cm}^3/\text{s}$ e $\dot{V}_{ar} = 60 \text{ cm}^3/\text{s}$ .[4]	15
1.5	Comparação de dados experimentais com dados obtidos a partir do código CoFlame para cortes radiais de temperatura em duas alturas axiais diferentes acima do queimador.	16
1.6	Comparação de dados experimentais com dados computacionais obtidos a partir do código CoFlame para cortes radiais de velocidade axial em alturas axiais variadas acima do queimador.	17
2.1	Fluxograma com representação simplificada da cinética detalhada para combustão de metano. [8]	22
3.1	Representação dos blocos para o domínio A.	25
3.2	Representação dos blocos utilizados para o domínio B.	26
3.3	Representação do zoom na região de saída do combustível das malhas A e B, utilizadas para as simulações de combustão, visualizadas no Paraview.	27
4.1	Velocidade $[m/s]$ do escoamento como função do raio $[mm]$ : (a) Caso 1 para Metano com $\dot{V}_c=169 \text{ cm}^3/\text{s}$ e ar com $\dot{V}_{ar}=35 \text{ cm}^3/\text{s}$ , (b) Caso 2 para Metano com $\dot{V}_c=80 \text{ cm}^3/\text{s}$ e ar com $\dot{V}_{ar}=60 \text{ cm}^3/\text{s}$ , (c) Caso 3 para Etileno com $\dot{V}_c=80 \text{ cm}^3/\text{s}$ e ar com $\dot{V}_{ar}=60 \text{ cm}^3/\text{s}$ e (d) Caso 4 para Etileno com $\dot{V}_c=121 \text{ cm}^3/\text{s}$ e ar com $\dot{V}_{ar}=60 \text{ cm}^3/\text{s}$ .	34
4.2	Velocidade e temperatura do escoamento ao longo de $z$ $[mm]$ para o tempo $t = t_{final}$ de cada caso simulado, para $r = 0 \text{ mm}$ .	36
4.3	Componente $z$ da velocidade $[m/s]$ do escoamento como função do raio $[mm]$ em diferentes alturas para todos os casos estudados. (a) Caso 1 para Metano com $\dot{V}_c = 169 \text{ cm}^3/\text{s}$ e ar com $\dot{V}_{ar}=35 \text{ cm}^3/\text{s}$ , (b) Caso 2 para Metano com $\dot{V}_c=80 \text{ cm}^3/\text{s}$ e ar com $\dot{V}_{ar}=60 \text{ cm}^3/\text{s}$ , (c) Caso 3 para Etileno com $\dot{V}_c=80 \text{ cm}^3/\text{s}$ e ar com $\dot{V}_{ar}=60 \text{ cm}^3/\text{s}$ e (d) Caso 4 para Etileno com $\dot{V}_c=121 \text{ cm}^3/\text{s}$ e ar com $\dot{V}_{ar}=60 \text{ cm}^3/\text{s}$ .	37
4.4	Temperatura $[K]$ do escoamento como função do raio $[mm]$ em diferentes alturas para todos os casos estudados. (a) Caso 1, (b) Caso 2, (c) Caso 3 e (d) Caso 4.	38
4.5	Fração mássica das espécies majoritárias em função do raio $[mm]$ , ao longo da chama, para metano com $\dot{V}_c=169 \text{ cm}^3/\text{s}$ e ar com $\dot{V}_{ar}=35 \text{ cm}^3/\text{s}$ , Caso 1	40

4.6	Fração mássica das espécies majoritárias em função do raio [mm], ao longo da chama, para metano com $\dot{V}_c=80 \text{ cm}^3/s$ e ar com $\dot{V}_{ar}=60 \text{ cm}^3/s$ , Caso 2 . . . . .	41
4.7	Fração mássica das espécies minoritárias em função do raio [mm], ao longo da chama, para metano com $\dot{V}_c=169 \text{ cm}^3/s$ e ar com $\dot{V}_{ar}=35 \text{ cm}^3/s$ , Caso 1 . . . . .	43
4.8	Fração mássica das espécies minoritárias em função do raio [mm], ao longo da chama, para metano com $\dot{V}_c=80 \text{ cm}^3/s$ e ar com $\dot{V}_{ar}=60 \text{ cm}^3/s$ , Caso 2 . . . . .	44
4.9	Fração mássica de Acetileno em função do raio [mm], ao longo da chama. . . . .	45
4.10	Fração mássica das espécies majoritárias em função do raio [mm], ao longo da chama, para etileno com $\dot{V}_c=80 \text{ cm}^3/s$ e ar com $\dot{V}_{ar}=60 \text{ cm}^3/s$ , Caso 2 . . . . .	47
4.11	Fração mássica das espécies majoritárias em função do raio [mm], ao longo da chama, para etileno escoando com $\dot{V}_c=121 \text{ cm}^3/s$ e ar escoando com $\dot{V}_{ar}=60 \text{ cm}^3/s$ , Caso 4. . . . .	48
4.12	Fração mássica das espécies minoritárias em função do raio [mm], ao longo da chama, para etileno com $\dot{V}_c=80 \text{ cm}^3/s$ e ar com $\dot{V}_{ar}=60 \text{ cm}^3/s$ , Caso 2. . . . .	50
4.13	Fração mássica das espécies minoritárias em função do raio [mm], ao longo da chama, para etileno com $\dot{V}_c=121 \text{ cm}^3/s$ e ar com $\dot{V}_{ar}=60 \text{ cm}^3/s$ , Caso4. . . . .	51
4.14	Fração mássica de Acetileno em função do raio [mm], ao longo da chama, para (a) Caso 2 (b) Caso 4. . . . .	52

## Lista de tabelas

3.1	Definição das malhas computacionais . . . . .	26
3.2	Definição das malhas computacionais . . . . .	29
3.3	Dados utilizados para o calculo da altura da chama para cada combustível e caso. . . . .	31
3.4	Configurações dos modelos numéricos. . . . .	31
4.1	Configurações e tempo final das simulações. . . . .	33
4.2	Alturas de análise nas chamas. . . . .	35



# 1

## Introdução

Neste capítulo são apresentadas da geral da combustão e da importância do estudos dos processos de combustão, assim como a otimização deste processo. Além disso, são revisadas nesse capítulo as referências bibliográficas que tornaram o desenvolvimento, análise e compreensão do projeto possíveis, como por exemplo o queimador utilizado e os ensaios feitos no mesmo.

### 1.1

#### Introdução Geral

A combustão é um processo que está presente em quase todos os setores sociais, fazendo parte de qualquer sociedade do mundo, independente do desenvolvimento da nação em questão. Este processo é estratégico e necessário para grande parte da economia mundial e isto ocorre pois a combustão é responsável por gerar 85% da energia consumida pelo homem. De acordo com o balanço energético nacional[1] publicado pelo Ministério de Minas e Energia, a energia gerada através da combustão de derivados de carvão vegetal, carvão mineral, lenha, petróleo, gás natural e dos derivados da cana de açúcar correspondem a aproximadamente 80% da energia utilizada no Brasil.

A ciência e tecnologia da combustão tem alto impacto nos setores industrial, de geração de energia e de transporte. Indústrias como, por exemplo, as de cimento, vidro, mineração, siderúrgica e química, se destacam por serem grandes utilizadoras do processo de combustão de gás natural e de hidrocarbonetos em seus processos de fabricação. Além disso, grande parte dos meios de transporte, como por exemplo veículos automotores, navios e aviões, utilizam a queima de derivados do petróleo ou do gás natural em seu funcionamento. Em particular, o preparo e cozimento de alimentos pela queima de combustíveis são importantes no setor doméstico e o transporte internacional de mercadorias é, em sua maioria, realizado por navios propulsados por motores que fazem a queima de óleo combustível residual. As indústrias químicas são as que mais consomem energia sendo responsáveis por mais de um terço da energia utilizada por todas as indústrias manufatureiras [1].

A combustão, além de trazer múltiplos benefícios para a humanidade, também traz consigo um lado negativo, que é a poluição ambiental, e esta deve ser tratada cuidadosamente, para que não cause malefícios à saúde humana nem ao meio ambiente. O monóxido de carbono (CO), por exemplo, é altamente tóxico para animais e seres humanos. Já a fuligem é um dos maiores

componentes da poluição do ar, e sua formação é dependente do combustível utilizado no processo de combustão e das condições em que o processo ocorre. Além disso, a queima de derivados de petróleo, como por exemplo a queima de gasolina em um automóvel, contribui para o aquecimento global por elevar os níveis de dióxido de carbono na atmosfera.

Os poluentes produzidos nos processos de combustão são, em sua maioria, os hidrocarbonetos não/parcialmente queimados, óxidos de enxofre, óxidos de nitrogênio, monóxido de carbono e material particulado (também denominada como fuligem). Normalmente, tais poluentes são apontados como os causadores principais de grande parte dos problemas vinculados à saúde humana, à formação de chuva ácida, ao efeito estufa e ao aquecimento global [3]. Devido a recentes estudos, pesquisas e análises que constatarem dados que quantificam a poluição causada pelos processos industriais que empregam a combustão, a sociedade está cada vez mais consciente das questões referentes ao dano que já foi causado ao meio ambiente e ao crescente aumento do mesmo. Por isso há uma grande preocupação com os efeitos da poluição, especialmente nos âmbitos da saúde pública e da qualidade do meio ambiente, levando governos a criar regulamentos que delimitem o nível de emissões de poluentes permitido e que façam com que os geradores de poluição adotar práticas de gestão ambiental. Hoje em dia já existe uma legislação correspondente para tal controle (CONAMA[2]), limitando os níveis máximos de emissões permitidas e reduzindo-os gradativamente.

Dentre os poluentes formados pelo processo de combustão, a fuligem é o que mais preocupa por conta dos efeitos causados e por sua alta produção durante os processos. Entretanto, existem algumas aplicações onde a formação de fuligem é incentivada, visto que esta é uma das principais fontes de radiação térmica transferida durante a combustão. Dessa forma, a previsão da taxa de formação e oxidação da fuligem é essencial para projetar sistemas. Já nos processos onde há a intenção de se reduzir a formação de fuligem, o uso de biocombustíveis é uma excelente alternativa. Este tipo de combustível surgiu em 1900 com o primeiro motor a diesel, como uma alternativa promissora aos combustíveis minerais, derivados do petróleo, que são extremamente poluentes e danosos ao meio ambiente e ao ser humano. O caráter renovável do biocombustível, torna o produto uma fonte importante de energia em longo prazo.

O estudo da combustão e de modelagens computacionais para processos de combustão em situações aproximadas as condições reais pode auxiliar na redução da emissão de gases tóxicos, na redução da formação de fuligem, e na otimização dos processos de combustão. Dessa forma a economia do país pode

ser alavancada com o investimento em meios tecnológicos de testar e analisar computacionalmente tais processos. É esta a principal motivação que levou ao desenvolvimento deste trabalho.

Visto que a análise dos processos de combustão é de suma importância para sua otimização, diminuição de custos e da emissão de poluentes durante o processo, formas computacionais de modelar o comportamento de um processo de combustão foram desenvolvidas utilizando o OpenFOAM (Open Source Field Operation And Manipulation). Será modelada a combustão de metano de etileno com mecanismo de cinética química detalhada, já que estes hidrocarbonetos levam alta produção de fuligem em relação a outros.

As simulações deste trabalho serão feitas considerando somente escoamentos laminares. Assume-se que os resultados obtidos irão possibilitar também a compreensão dos modelos de escoamentos turbulentos, que são mais comuns nas condições reais dos processos de combustão, como por exemplo em aquecedores, fornos industriais, etc.

## 1.2

### Revisão Bibliográfica

#### 1.2.1

##### Queimador Gülder

O processo de combustão a ser analisado ocorre no queimador de Gülder, um queimador de escoamentos paralelos de combustível e ar. Este possui um tubo de entrada de combustível no centro e uma entrada de ar na parte anular exterior, como apresentado na figura 1.1. Este queimador é utilizado para estudar chamas não pré-misturadas de variados combustíveis, como metano e etileno, por exemplo. O queimador de Gülder foi estudado por Mergulhão et al. [3], para análise da formação fuligem durante o processo de combustão. Este foi escolhido pois a fração volumétrica de fuligem é maior quando comparada a outros queimadores. Além disso, este queimador pode ser facilmente aquecido para se estudar combustíveis líquidos pré-vaporizados.

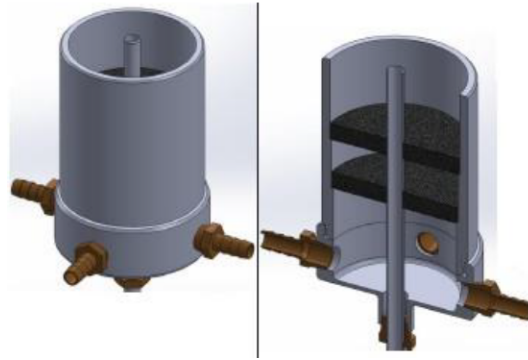


Figura 1.1: Representação do queimador de Gülder e uma representação em corte.[3]

Este queimador é composto por um tubo de aço inoxidável com 11 mm de diâmetro interno e 12,7 mm diâmetro externo, por onde passa o combustível. Este tubo é concêntrico a um tubo de alumínio por onde passa o escoamento de oxidante (ar). O tubo de oxidante possui diâmetro interno de 100 mm e externo de 112,7 mm. As dimensões do queimador de Gülder podem ser visualizados na figura 1.2.

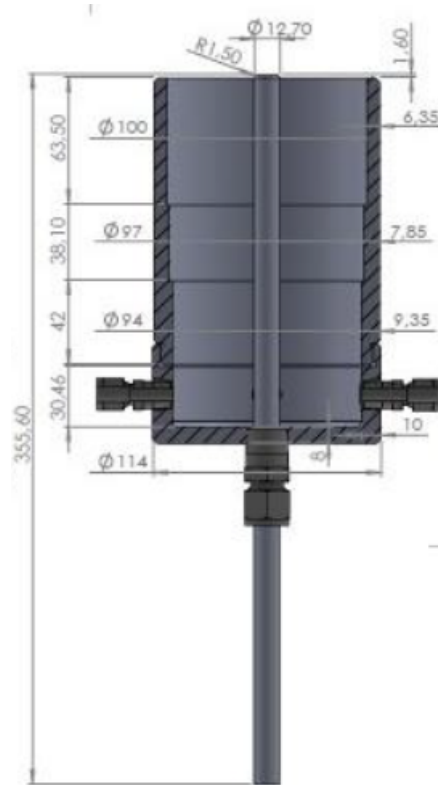


Figura 1.2: Representação das dimensões do queimador de Gülder.[3]

Tipicamente utilizam-se vazões que correspondem ao regime laminar de escoamento ao longo da tubulação de alimentação. O tubo de combustível possui comprimento suficiente para permitir que o escoamento laminar seja desenvolvido no momento em que o deixa.

### 1.2.2

#### Experimentos realizados na PUC-Rio

Visando estudar a distribuição de fuligem em chamas laminares não pré-misturadas de etileno e ar, Villanueva et al. [4] apresentam um estudo plano combinado de fluorescência induzida por laser (PLIF), incandescência induzida por laser (LII) e temperatura no queimador de Gülder disponível no Laboratório de combustão e turbulência da PUC-Rio.

Neste experimento os sinais de fuligem e hidrocarbonetos policíclicos aromáticos (PAHs) são detectados, quando possível, por uma câmera intensificada na combustão de etileno, podendo assim medir a temperatura e algumas outras propriedades. Dessa forma pode-se determinar onde ocorre a formação de fuligem e assim encontrar formas de reduzir sua emissão. A figura 1.3 apresenta uma imagem da chama obtida experimentalmente no queimador de Gülder.



Figura 1.3: Imagem da chama experimental no queimador de Gülder.

Como resultados experimentais, foram obtidos, entre outros, os campos de temperatura da fuligem e os perfis radiais correspondentes em diferentes alturas, como apresentado na figura 1.4. Nesta figura  $z$  é a altura ao longo da chama,  $h_f$  é o comprimento da chama,  $\dot{V}_c$  a vazão de escoamento do combustível e  $\dot{V}_{ar}$  é a vazão de escoamento do ar.

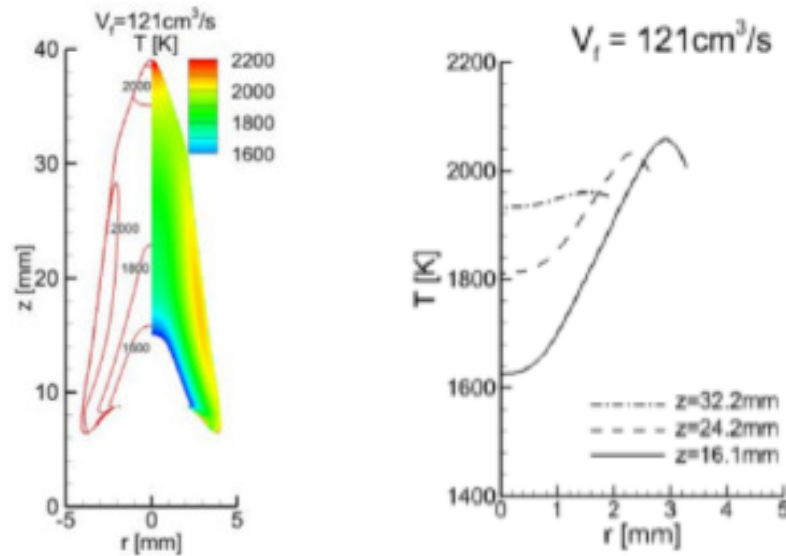


Figura 1.4: Campos de temperatura e isolinhas e perfis radiais de temperatura em  $z/h_f = 0,4, 0,6$  para  $\dot{V}_c = 121 \text{ cm}^3/\text{s}$  e  $\dot{V}_{ar} = 60 \text{ cm}^3/\text{s}$ . [4]

Analisando os resultados obtidos concluiu-se [4] que há três regiões perceptíveis nas chamas, que são as seguintes:

1. Região de baixa temperatura onde não se encontra fuligem, apenas PAH.
2. Região de temperatura intermediária onde PAH e fuligem são encontrados.
3. Região de alta temperatura onde se encontra fuligem.

### 1.2.3

#### Comportamento esperado

Com o intuito de estudar a redução da emissão de fuligem nos processos de combustão devido aos danos à saúde e ao meio ambiente, Eaves et al. [5] apresentam um estudo dos mecanismos de formação de fuligem, incluindo crescimento e oxidação, que possibilite a determinação de métodos economicamente viáveis de reduzir essas emissões. Para isso, modelos numéricos complexos são usados para se alcançar maior entendimento dos fatores que afetam o mecanismo de formação de fuligem.

Nesse estudo utiliza-se o código CoFlame FORTRAN, que modela que modela as chamas de difusão para escoamento laminar em um queimador de tubo axissimétrico para combustão em uma faixa específica de escoamento, determinada através do número de Reynolds. O código desenvolve soluções para velocidade radial e axial, temperatura, conservação de espécies, e agregados de

fuligem e equações de densidade de número de partículas primárias. O modelo de dinâmica de partículas seccionais inclui nucleação, condensação de PAH e crescimento superficial de HACA, oxidação de superfície, fragmentação, coagulação, difusão de partículas e termoforese [5]. Para validar o código modelado, os resultados obtidos foram comparados com dados experimentais.

Para análise de resultados, obteve-se os gráficos para temperatura e velocidade ao longo da chama [5] estão mostrados nas figuras 1.5 e 1.6 respectivamente. Estas apresentam uma comparação de temperatura e da velocidade axial em várias alturas axiais obtidas com o CoFlame e os experimentais retirados de Santoro et al. [6], e Kennedy et al. [7]. Os dados experimentais foram obtidos considerando-se um tubo axssimétrico que experimenta uma expansão súbita, e todos os dados disponíveis para chamas de difusão metano-ar e etileno-ar sem alterar nenhum parâmetro, como por exemplo a vazão de escoamento.

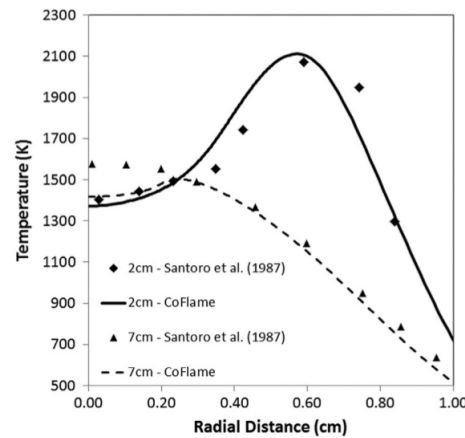


Figura 1.5: Comparação de dados experimentais com dados obtidos a partir do código CoFlame para cortes radiais de temperatura em duas alturas axiais diferentes acima do queimador.



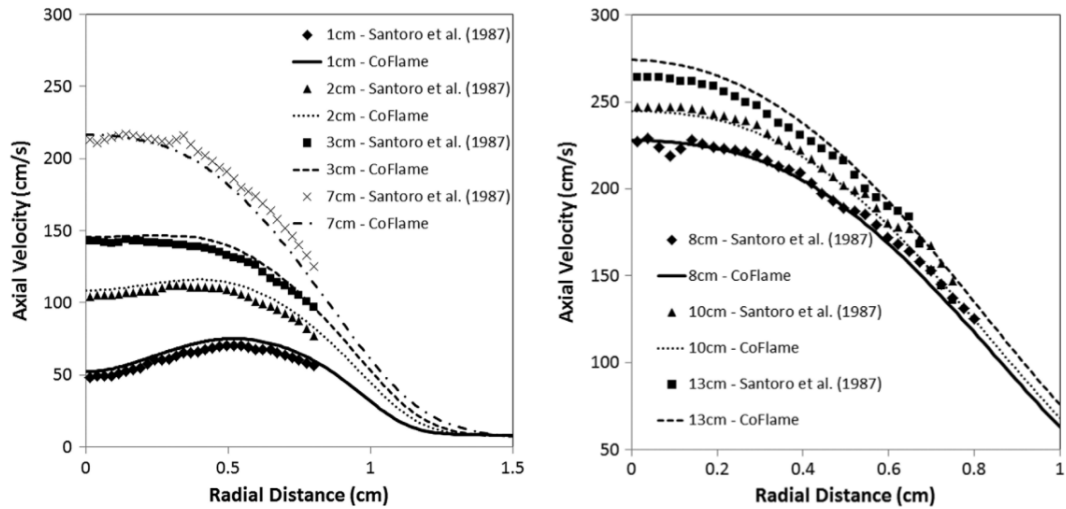


Figura 1.6: Comparação de dados experimentais com dados computacionais obtidos a partir do código CoFlame para cortes radiais de velocidade axial em alturas axiais variadas acima do queimador.

Analisando os resultados obtidos por Eaves et al. [5] é possível observar que os dados obtidos pelo código CoFlame concordam com os dados experimentais. É possível notar que, nas figuras 1.5 e 1.6 por exemplo, o comportamento experimental e do modelo numérico possuem grande concordância.

Conclui-se então que o modelo computacional CoFlame apresentado é validado para modelagem de chamas com escoamentos paralelos, laminares, axssimétricos, com difusão de fuligem.

Como o procedimento estudado possui configurações que se assemelham a do processo estudado no queimador de Gülder, os dados obtidos por Villanueva, et al. [4], serão usados como base para comparação dos modelos computacionais desenvolvidos neste trabalho.

### 1.3

#### Objetivo

Neste trabalho se objetiva estudar a combustão não pré-misturada em escoamentos laminares de metano e etileno. Este estudo, feito com a ferramenta OpenFOAM, visa lançar as bases para a criação de modelos que incluam o processo de formação de fuligem neste tipo de chama.

Assim, modelos computacionais serão implementados utilizando a ferramenta OpenFOAM para descrever a combustão de metano e etileno, possibilitando a análise de propriedades da chama, como a temperatura, velocidade do escoamento, a fração mássica das espécies, e futuramente, a fração mássica de fuligem.

Os objetivos específicos deste trabalho são:

1. Aprender a utilização do código de fonte aberta OpenFOAM.
2. Desenvolver simulações para combustão de metano e de etileno com cinética química detalhada.
3. Descrever a estrutura das chamas laminares calculadas, com ênfase nas propriedades termoquímicas.
4. Estudar o efeito do processamento paralelo sobre o tempo de simulação.
5. Estudar o efeito da escolha da malha computacional sobre o tempo de processamento da simulação.
6. Comparar resultados esperados das simulações com os experimentais.

#### 1.4

##### **Estrutura do manuscrito**

No capítulo 2 apresenta-se as equações matemáticas necessárias para o desenvolvimento da simulação, assim como o modelo de cinética química detalhada GRI, que será utilizado. No capítulo 3 apresentam-se todos os domínios e blocos utilizados para as simulações, assim como suas dimensões e as malhas utilizadas a partir de cada bloco. Além disso, apresenta-se, também no capítulo 3, o reactingFOAM, solver utilizado para simulação do modelo. No capítulo 4 apresentam-se os resultados obtidos para a velocidade de escoamento no canal de entrada de combustível, a estrutura do escoamento reativo, e a comparação das chamas obtidas para metano e etileno em diferentes modelos. Além disso, no capítulo 4 também é feita uma análise dos resultados obtidos. No capítulo 5 são apresentadas as conclusões sobre os modelos estudados e as perspectivas para trabalhos futuros.

## 2

### Desenvolvimento Teórico

Neste capítulo serão apresentadas as equações necessárias para descrever o processo de combustão em um queimador e o modelo de cinética química utilizado neste trabalho. Serão apresentadas as equações governantes necessárias ao modelo matemático, como a equação de Navier-Stokes, e as equações auxiliares utilizadas neste trabalho, como por exemplo a equação semi-empírica para calcular a altura de uma chama.

#### 2.1

##### Modelo Matemático

Nesta seção serão apresentadas todas as equações necessárias para a simulação e para o desenvolvimento do estudo.

##### 2.1.1

##### Equações Governantes

No processo de combustão não há criação nem destruição de massa, logo, pode-se aplicar a lei da conservação [8] de massa, expressa como

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u}) = 0, \quad (2-1)$$

onde sendo  $\rho$  a densidade e  $\vec{u}$  é o vetor velocidade do escoamento e  $t$  o tempo.

A equação da conservação da quantidade de movimento (equação de Navier-Stokes) é expressa como [12]

$$\frac{\partial \rho \vec{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u} * \vec{u}) = -\nabla p + \nabla * \tau + \rho \vec{g}, \quad (2-2)$$

sendo  $p$  a pressão,  $\vec{g}$  o vetor aceleração da gravidade e  $\tau$  o tensor de tensões viscosas, onde

$$\tau = \mu \nabla \vec{u}, \quad (2-3)$$

onde  $\mu$  é a viscosidade dinâmica do fluido newtoniano, descrito nas equações auxiliares apresentadas a seguir.

O balanço de massa de cada uma das  $I$  espécies químicas se define como [8]

$$\frac{\partial \rho Y_i}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u} Y_i) = \nabla \cdot (\rho D_i \nabla Y_i) + \dot{\omega}_i \quad i = 1, \dots, I, \quad (2-4)$$

onde  $D_i$  é a difusividade de massa da espécie  $i$  com respeito à mistura gasosa,  $\dot{\omega}_i$  é a taxa de produção mássica da espécie  $i$  devido às reações químicas e  $Y_i$  é a fração mássica de cada espécie.

O balanço de energia é descrito pela seguinte equação [8]

$$\frac{\partial \rho h}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u} h) = \nabla \cdot (\rho \alpha \nabla h) + \sum_{i=1}^I \{ \nabla \cdot [(h_i) (\rho D_i - \alpha)] \nabla Y_i \} + \frac{\partial p}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla p, \quad (2-5)$$

onde  $\alpha$  é a difusividade térmica da mistura,  $h$  a entalpia,  $h_i$  a entalpia da espécie química  $i$  e  $D_i$  a difusividade de massa da espécie  $i$  em respeito à mistura gasosa.

A equação de Arrhenius que descreve a cinética química detalhada de combustão reapresentada simplificada como [8]

$$k = A_0 T^b e^{-\frac{T_a}{T}}, \quad (2-6)$$

onde  $T^b$  é um termo para dar melhor correspondência com dados experimentais e  $b = 1.3$ ,  $T_a = \frac{E_a}{R_u}$  é a razão entre a energia de ativação e constante universal dos gases ( $R_u = 1,987 \text{ cal/mol} \cdot K$ ).

### 2.1.2

#### Equação de estado e relações constitutivas

Para o desenvolvimento do processo de combustão, assume-se que todos os gases envolvidos se comportam como gases ideais. Sendo assim, pode-se utilizar a equação de estado dos gases, apresentado como

$$p = \rho R T \sum_{i=1}^I \left( \frac{Y_i}{M_i} \right), \quad (2-7)$$

onde  $M_i$  é a massa molecular da espécie  $i$  e  $R$  a constante universal dos gases.

A temperatura  $T$  é determinada através da equação de estado de calor, apresentada na equação 2-8.

$$h = \int_{T_{std}}^T C_p dT, \quad (2-8)$$

onde  $C_p = \sum_{i=1}^I Y_i C_{p,i}$  é o calor específico à pressão constante da mistura e  $T_{std}$  a temperatura padrão em que a formação de entalpia é definida, e tipicamente assume o valor de  $T_{std} = 25^\circ C$ . O calor específico da mistura à pressão constante ( $C_p$ ) é retirado das tabelas JANAF [9].

A viscosidade da mistura é determinada através da equação de Sutherland, apresentada como

$$\nu = \frac{b T^{\frac{2}{3}}}{T + S}, \quad (2-9)$$

onde  $b$  e  $S$  são constantes e a temperatura é definida pela equação 2-8. Para o ar, tem-se que  $b = 1,458 \cdot 10^{-6} \frac{kg}{msK^{\frac{1}{2}}}$  e  $S = 110,4K$ .

A difusividade de massa da espécie  $i$  pode ser calculada por [8]

$$D_i = \frac{3}{8} \frac{\sqrt{\pi \cdot M \cdot k_b \cdot T}}{\pi \cdot d^2} \frac{1}{\rho} \propto \frac{T^{\frac{3}{2}}}{P}, \quad (2-10)$$

onde  $d$  é o diâmetro das moléculas,  $M$  é a massa molecular,  $k_B = 5,67 \cdot 10^{-8} \text{ W/m}^2\text{K}^4$  é a constante de Boltzmann,  $T$  a temperatura e  $\rho$  a densidade.

## 2.2

### Modelagem da cinética química com descrição detalhada

Nesta seção será apresentado o mecanismo de cinética química utilizado para representar a reação da queima de metano e etileno no queimador de Gülder. Para modelar o processo de combustão, fez-se uso de um mecanismo de cinética detalhada para descrever a química de combustão de metano e etileno. Diferente da cinética global, esta cinética engloba também as espécies produzidas nos passos intermediários antes da formação dos produtos majoritários.

Na cinética detalhada, é possível seguir múltiplos caminhos entre cada passo de oxidação, e isto dificulta a compreensão do modelo cinético por meios analíticos. Por esse motivo, a modelagem numérica tem sido utilizada para entendimento desse tipo de cinética e das suas complexidades.

Para ilustrar a cinética detalhada e suas complexidades, a figura 2.1 apresenta um exemplo de diagrama de passos que se pode seguir para a combustão de metano ou etileno [8].

Na figura 2.1, as vias de reação no primeiro grupo vertical de sequências são aquelas que não envolvem elementos do tipo  $C_2$  (espécies com dois átomos de carbono) que são importantes em alta pressão ou condições ricas. As vias que envolvem elementos do tipo  $C_2$  são iniciadas a partir da recombinação de  $CH_3 + CH_3 + M \rightarrow C_2H_6 + M$ , e, portanto, são importantes quando a pressão é alta.

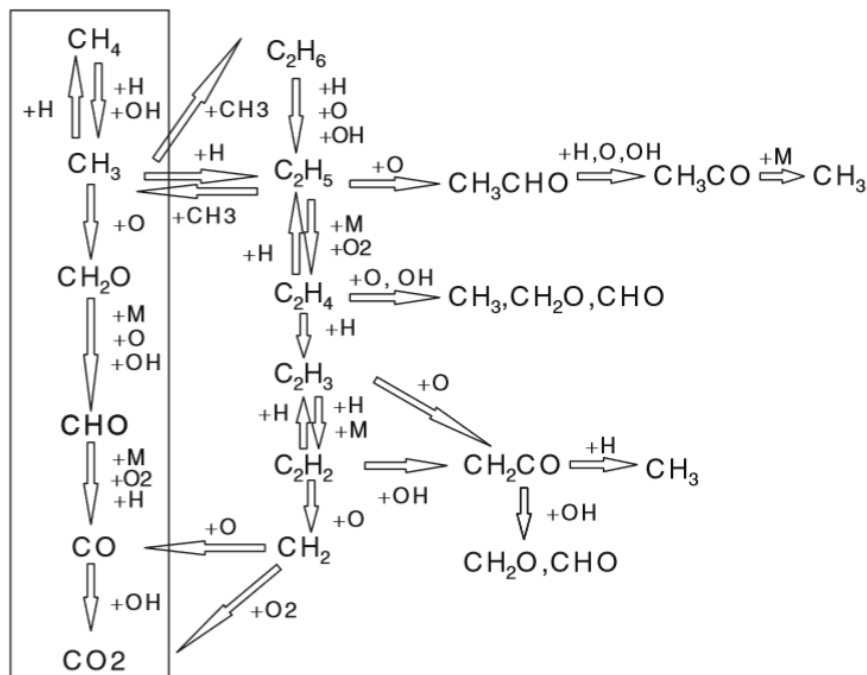


Figura 2.1: Fluxograma com representação simplificada da cinética detalhada para combustão de metano. [8]

É válido observar os passos iniciais deste modelo possuem alta energia de ativação, significando que é necessária uma quantidade de energia significativa para retirar um átomo de hidrogênio do metano.

O modelo de cinética química empregado é o GRI-Mech (Gas Research Institute Mechanism [10]). Este modelo foi inicialmente desenvolvido para descrever oxidação de metano, e assim como outros modelos de cinética química detalhada, se baseia em um grupo de reações elementares, onde os valores atribuídos para as razões dos parâmetros da reação são obtidos associando teoria, experimentos e dados numéricos.

O modelo GRI mais atual foi construído para a combustão de gás natural, e considera 53 espécies e 325 reações reversíveis elementares. A vantagem deste modelo é a representação correta da maioria dos resultados experimentais disponíveis para a combustão de gás natural, além dos hidrocarbonetos constituintes mais importantes, metano e etileno (C1-C2) [13].

No artigo de Orbegoso et al. [13], observou-se que, para gás natural, um grande alcance de previsibilidade é obtido quando se utiliza a cinética química detalhada GRI para a modelagem da combustão. Por este motivo, a modelagem da combustão desenvolvida neste trabalho será feita empregando este modelo de cinética química. Dessa forma será possível analisar o comportamento de variadas espécies envolvidas no processo de combustão.

### 2.3

#### Equações auxiliares

Nesta seção serão apresentadas as equações auxiliares utilizadas para este estudo.

A equação semi-empírica para calcular a altura de uma chama é dada pela equação a seguir [8].

$$L_f = \frac{\dot{V}_c \frac{T_\infty}{T_f}}{4\pi D_\infty \ln 1 + \frac{1}{S}} \left( \frac{T_\infty}{T_p} \right)^{0,67}, \quad (2-11)$$

onde  $T_p$  é a temperatura média da chama,  $\dot{V}_c$  é a vazão volumétrica do combustível,  $D_\infty$  é o coeficiente de difusão médio,  $S$  é a razão estequiométrica de ar combustível, definido pela equação 2.3 para combustíveis do tipo  $C_\alpha H_\beta O_\gamma$  queimando com ar.

$$S = 4,76 \left( \alpha + \frac{\beta}{4} - \frac{\gamma}{2} \right). \quad (2-12)$$

O número de Reynolds do escoamento de combustível é expresso como função da vazão de um fluido por [8]

$$Re = \frac{4\dot{V}_c}{\pi\nu D}, \quad (2-13)$$

onde  $D$  é o diâmetro do tubo,  $\dot{V}_c$  a vazão do combustível e  $\nu$  é a viscosidade dinâmica do combustível, dado por

$$\nu = \frac{\mu}{\rho}, \quad (2-14)$$

onde  $\mu$  é a viscosidade cinética e  $\rho$  é a densidade do combustível.

Estas equações serão utilizadas para determinar valores numéricos para a altura da chama, e assim validar o resultado obtido computacionalmente.

### 3

## Modelagem Computacional

Neste capítulo são apresentadas as características necessárias para modelagem computacional do processo de combustão, utilizando o OpenFOAM, isto é, o domínio computacional, as malhas estudadas, o solver utilizado e as condições de contorno correspondentes.

### 3.1

#### Domínio e blocos computacionais

Nesta seção são apresentados os domínios utilizados para representação computacional do queimador de Gülder.

Dois domínios são utilizados para desenvolver a simulação. Um domínio pré-existente [11] é apresentado na figura 3.1. Em seguida, utilizou-se um novo domínio, que foi desenvolvido visando reduzir o tempo de processamento da simulação sem alterar o escoamento laminar desenvolvido no tubo de entrada de combustível, como apresentado na figura 3.2.

Ambos os domínios são subdivididos em 5 blocos com geometrias simples, visando facilitar o desenvolvimento computacional do modelo. Além disso, ambos utilizando domínio do tipo “wedge” (fatia de pizza), devido à simetria axial presente no queimador.

O domínio A utilizado para os cálculos é definido por 5 blocos distintos, como mostra a figura 3.1. As regiões 1 e 4 possuem dimensões radiais de  $L_{r1} = 5,5$  mm e  $L_{r2} = 43,5$  mm e comprimento de  $L_{z1} = 300$  mm e  $L_{z2} = 50$  mm, iguais as medidas do queimador de Gülder. O comprimento da entrada de combustível é determinado pela necessidade de que o escoamento esteja completamente desenvolvido. O comprimento da região 4 é  $L_{z4} = 50$  mm e é idêntico ao existente no queimador. A região onde ocorre a queima da mistura ar-combustível possui dimensões  $L_{z2} = 200$  mm e  $L_{r2+r3+r5} = 50$  mm.



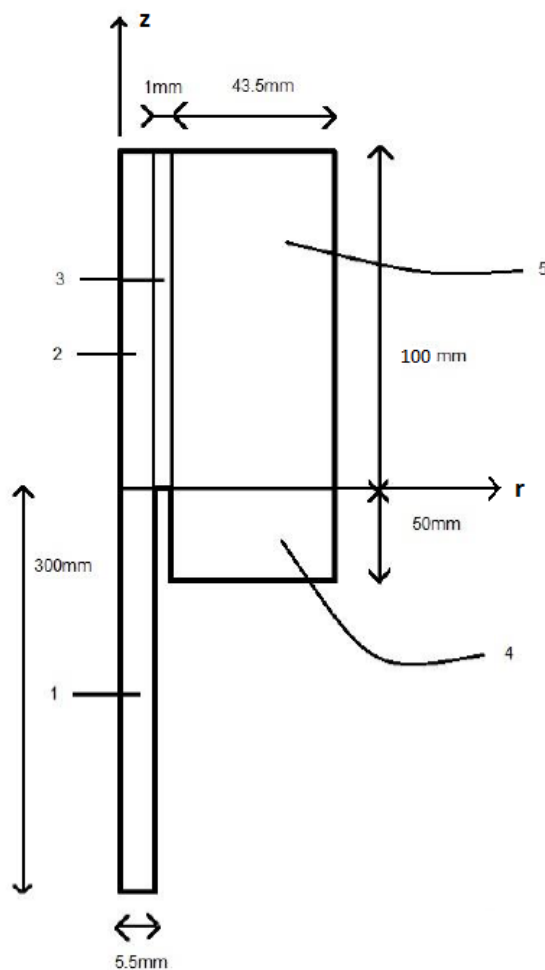


Figura 3.1: Representação dos blocos para o domínio A.

No domínio B reduziu-se apenas o comprimento do tubo de entrada ( $L_{z1}$ ) para 60 mm, alterando conseqüentemente as especificações do bloco 1. As demais dimensões não foram alteradas. O domínio B e suas dimensões estão apresentadas na figura 3.2.

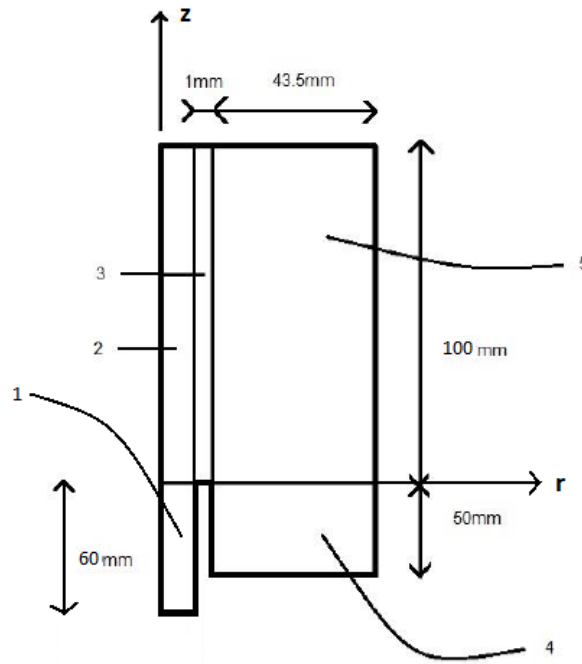


Figura 3.2: Representação dos blocos utilizados para o domínio B.

### 3.2 Malha Computacional

Nesta seção são apresentadas as malhas computacionais utilizadas para modelar a combustão no queimador. Duas malhas são utilizadas, uma aplicada no *domnioA* e outra no *domnioB*, definidos na seção anterior.

Cada um dos blocos definidos para as malhas ( $M_A$  e  $M_B$ ) possuem diferentes números de elementos ( $N_e$ ) e gradiente de espaçamentos ( $\nabla$ ).

Os números de elementos, nas direções  $(r, y, z)$ , para cada um dos blocos de cada uma das malhas ( $N_{e,A}$  e  $N_{e,B}$ ) estão respectivamente apresentados na segunda e terceira coluna da tabela 3.1. Os gradientes de espaçamento, nas direções  $(r, y, z)$ , para cada um dos blocos de cada uma das malhas ( $\nabla_A$  e  $\nabla_B$ ) estão respectivamente apresentados na quarta e quinta coluna da tabela 3.1, ressaltando em **negrito** o que é alterado de uma malha para a outra.

Tabela 3.1: Definição das malhas computacionais

Blocos	$N_{e,A}$	$N_{e,B}$	$\nabla_A$	$\nabla_B$
1	<b>(30 1 250)</b>	<b>(30 1 50)</b>	<b>(0.6 1 0.2)</b>	<b>(0.6 1 0.09)</b>
2	(30 1 250)	(30 1 250)	(0.6 1 3)	(0.6 1 3)
3	(8 1 250)	(8 1 250)	(1 1 3)	(1 1 3)
4	(60 1 150)	(60 1 150)	(12 1 0.5)	(12 1 0.5)
5	(60 1 250)	(60 1 250)	(12 1 3)	(12 1 3)

O comprimento do tubo foi diminuído de forma que seu tamanho seja suficiente para obter um escoamento completamente desenvolvido, ou seja,

maior do que 11 mm aproximadamente [11]. Para garantir com folga que isto seja alcançado, optou-se por manter um comprimento de 60 mm.

O gradiente de espaçamento foi escolhido de forma que a transição do bloco 1 para o bloco 2 seja suave, já que esta é a área onde se observa a iniciação da chama. Por este motivo, o gradiente de espaçamento do eixo  $z$  foi reduzido de 0.2 para 0.09, aproximadamente a metade do valor utilizado na malha A, tal como mostrado na tabela 3.1. Isso pode ser visualizado na figura 3.3.

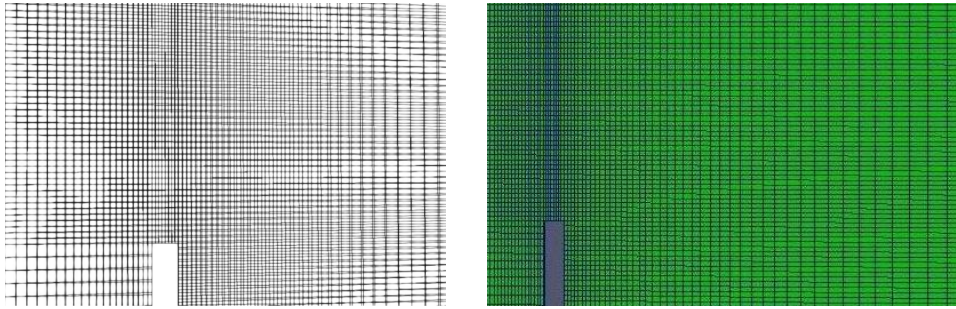


Figura 3.3: Representação do zoom na região de saída do combustível das malhas A e B, utilizadas para as simulações de combustão, visualizadas no Paraview.

### 3.3 Solver

Nesta seção será apresentado o solver utilizado para simular a combustão no queimador a partir das malhas dedescritas nas seções anteriores.

Para simular o processo de combustão para o queimador de Gülder no OpenFOAM, utilizou-se o solver reactingFoam. Este é um solver original da biblioteca OpenFoam, utilizado para modelagem computacional de reações químicas de combustão em escoamentos laminares ou turbulento.

Para o caso de escoamento laminar, o reactingFoam utiliza volumes finitos para resolver as equações de conservação de energia, balanço das espécies químicas e a equação de Arrhenius para balanço de massa das espécies químicas, dadas no capítulo 2.

#### 3.3.1 Procedimento para simulação em paralelo

Visando-se reduzir o tempo de processamento, utilizou-se simulações paralelas com o OpenFOAM, ou seja, distribuiu-se a resolução do modelo simulado em mais de um nó do computador, utilizando um computador de 12 CPU's, com sistema operacional linux (ubuntu), 128 GB de memória, 1600 MHz de velocidade de memória e hardDrive HDD com interface SATA3Gb.

Esta configuração faz com que a resolução da simulação seja feita dividida em diferentes CPU's, que se comunicam entre si.

É possível realizar simulações em paralelo em computadores com mais de uma CPU, podendo-se até escolher o número de nós em que se deseja realizar a simulação. Para isso é necessário seguir o 4 seguintes passos:

1. Criar a malha definida para a simulação. Para isso, utiliza-se o código no OpenFOAM:

```
$ blockMesh
```

2. Criar o arquivo "decomposeParDict", que contém o número de nós e a forma de fazer a divisão da malha para simular o modelo em paralelo. Este arquivo é feito considerando-se que será recebida a malha definida para o modelo e esta será dividida em  $n$  partes, onde cada parte será resolvida em um dos  $n$  nós utilizados em paralelo.

3. Dividir a malha modelada entre os nós em que se deseja simular o modelo. Dessa forma, se utiliza uma nova malha para cada nó, sendo cada uma das malhas, uma parte da malha original. Para isso, utiliza-se o código no OpenFOAM:

```
$ decomposePar
```

4. Usar o comando solver em paralelo para simular o modelo, especificando o solver e o número de nós desejado ( $N$ ). Para isso, utiliza-se o seguinte código:

```
$ mpirun -np N reactingFOAM -parallel
```

5. Reconstruir o resultado da simulação em um único nó para possibilitar o pós-processamento. Para isso, utiliza-se o seguinte código:

```
$ reconstructPar
```

Utilizou-se o solver em paralelo em 4 ou 8 nós para resolver os modelos estudados. Dessa forma, observou-se que, ao utilizar 4 nós ao invés da simulação serial, obteve-se uma redução de 20 para 13 dias no tempo total de duração da simulação, ou seja, reduziu-se aproximadamente 1 semana e meia no tempo de simulação. Além disso, ao utilizar 4 nós, 100% de cada CPU é utilizado. Ao utilizar 8 nós, a redução no tempo de simulação é de aproximadamente 6 dias em relação a simulação serial, e não obteve-se 100% de uso dos 8 CPU's. O

computador utilizado para desenvolver este trabalho possui 12 CPU's, o que possibilita simular mais de um processo em paralelo consecutivamente. Por este motivo, optou-se por utilizar o processamento paralelo em 4 nós, podendo-se assim simular três modelos em um mesmo computador, e isto gerou uma redução no tempo de processamento do modelo computacional.

### 3.3.2

#### Informações auxiliares para uso do OpenFOAM

Para o desenvolvimento dos modelos computacionais e simulações estudadas no openFOAM, foi necessário uma busca por diferentes fontes que permitissem tal desenvolvimento. A tabela 3.2 apresenta uma lista com a localização dos recursos necessários para o desenvolvimento deste trabalho.

Tabela 3.2: Definição das malhas computacionais

Função	Localização do recurso (sites, videos, etc)
Download OpenFOAM versão 5 para Ubuntu e tutorial para teste com o caso simpleFoam	<a href="https://openfoam.org/download/5-0-ubuntu/">https://openfoam.org/download/5-0-ubuntu/</a>
Guia do usuário do OpenFOAM versão 5	<a href="https://cfd.direct/openfoam/user-guide/">https://cfd.direct/openfoam/user-guide/</a>
Simulações em paralelo	<a href="https://cfd.direct/openfoam/user-guide/running-applications-parallel/">https://cfd.direct/openfoam/user-guide/running-applications-parallel/</a>
Simulações em paralelo (vídeo)	<a href="https://www.youtube.com/watch?v=bHMdh_l45M0">https://www.youtube.com/watch?v=bHMdh_l45M0</a>
Tutorial para combustão de $CH_4$ com cinética global para escoamento laminar utilizando <i>reactingFoam</i> com chama de contrafluxo	<a href="https://github.com/OpenFOAM/OpenFOAM-5.x/tree/master/tutorials/combustion/reactingFoam/laminar/counterFlowFlame2D">https://github.com/OpenFOAM/OpenFOAM-5.x/tree/master/tutorials/combustion/reactingFoam/laminar/counterFlowFlame2D</a>
Tutorial para combustão de $CH_4$ com cinética detalhada GRI para escoamento laminar utilizando <i>reactingFoam</i> com chama de contrafluxo	<a href="https://github.com/OpenFOAM/OpenFOAM-5.x/tree/master/tutorials/combustion/reactingFoam/laminar/counterFlowFlame2D_GRI">https://github.com/OpenFOAM/OpenFOAM-5.x/tree/master/tutorials/combustion/reactingFoam/laminar/counterFlowFlame2D_GRI</a>

### 3.4

#### Condições de contorno e iniciais

Nesta seção são apresentadas as condições de contorno e as condições iniciais utilizadas para todos os modelos estudados.

Utilizando as malhas descritas na tabela 3.1, modelou-se a combustão para escoamento laminar desenvolvido para metano ou de etileno utilizando a cinética detalhada (GRI) [13] em diferentes vazões de combustível.

Todas as simulações foram feitas com o intuito de obter resultados comparáveis aos obtidos por Villanueva et al.[4], ou seja, são referentes ao queimador de Gülder, que está disponível no laboratório de combustão da PUC-Rio, mostrado no capítulo 1.

As condições de contorno utilizadas são representativas das experimentais, utilizadas por Villanueva et al.[4], e estas são:

- Entrada de ar com composição de 23% de oxigênio e 77% de nitrogênio.
- Entrada de combustível (metano ou etileno) com composição de 100% de combustível.
- Condições normais de temperatura e pressão, à uma temperatura ambiente de  $T_{\infty} = 300$  K e uma pressão de  $P = 1$  atm.
- Aceleração da gravidade tem valor de  $g = 9,8$  m/s<sup>2</sup>.

As condições iniciais utilizadas são:

- Entrada de ar com ar iniciando a escoar no início da simulação, com vazão  $\dot{V}_{ar}$
- Entrada de combustível com combustível iniciando a escoar no início da simulação, com vazão  $\dot{V}_c$ .
- Temperatura de ar e combustível iniciais igual a 300 K.
- Não há nenhuma outro escoamento dentro domínio computacional.
- Inicialmente a temperatura do queimador é de 2000 K e a pressão é de 0,1 MPa.
- Inicialmente há apenas ar no queimador, com uma composição de 0,23% de  $O_2$  e 0,77% de  $N_2$ .

No total, quatro casos são estudados, variando-se a malha, a velocidade de escoamento de combustível ( $\dot{V}_c$ ) e de ar ( $\dot{V}_{ar}$ ), e o combustível.

Inicialmente, foi modelado o processo de combustão de metano para uma vazão de  $169$  cm<sup>3</sup>/s para o combustível e  $35$  cm<sup>3</sup>/s para o ar, aproximando as condições normais do queimador de Gülder. Em seguida, alterou-se o

comprimento do tubo de entrada de combustível, visto que para se ter um escoamento laminar desenvolvido não é necessário um tubo com mais de 20 mm. Ainda utilizando este combustível, alterou-se as vazões para o metano e para o ar para os mesmos valores utilizados experimentalmente no laboratório de combustão da PUC-Rio [4]. Por fim, utilizou-se etileno como combustível para o modelo, e aplicou-se as mesmas vazões de escoamento de combustível e ar utilizadas em laboratório por Villanueva et al. [4].

A tabela 3.4 apresenta todos os dados relativos a cada uma das quatro simulações, como a malha, a vazão de combustível, a vazão de ar, o combustível utilizado, a altura da chama experimental [4] e a altura da chama calculada através da equação 2-11, apresentada no capítulo 2. Na tabela, destacou-se o que foi alterado de um caso para outro.

Além disso, também calculou-se a altura de chama esperada para cada modelo, utilizando a equação 2-11 e os valores apresentados na tabela 3.3 para  $\mu$  [14],  $\rho$  [14],  $\nu$  utilizando a equação 2-14,  $S$  utilizando a equação 2.3,  $T_p$  [8],  $D_{ar,\infty}$  [8],  $T_\infty$  estabelecido pela condição inicial,  $T_c$  estabelecido pela condição inicial, e  $D$  o diâmetro do tubo de entrada estabelecido no capítulo 1.

Tabela 3.3: Dados utilizados para o calculo da altura da chama para cada combustível e caso.

Dados	$CH_4$	$C_2H_4$
$\mu$ [g/cm - s]	0,00011	0,0001
$\rho$ [kg/m <sup>3</sup> ]	0,00066	0,00115
$\nu$ [Pa/s]	0,1681	0,08947
$S$	9,52	14,28
$T_p$ [K]	2300	2600
$D_{ar,\infty}$ [cm <sup>2</sup> /s]	0,2	0,2
$T_\infty$ [K]	300	300
$T_c$ [K]	300	300
$D$ [cm]	1,065	1,065

Os resultados obtidos para a altura da chama para cada modelo está apresentado na tabela 3.4.

Tabela 3.4: Configurações dos modelos numéricos.

Caso	Malha	$\forall_{comb}$ [cm <sup>3</sup> /s]	$\forall_{ar}$ [cm <sup>3</sup> /s]	Combustível	$h_{f,exp}$ [mm]	$h_{f,calc}$ [mm]
1	A	169	35	$CH_4$	—	30,4
2	B	<b>80</b>	<b>60</b>	$CH_4$	—	13,5
3	B	80	60	$C_2H_4$	23,9	18,4
4	B	<b>121</b>	60	$C_2H_4$	39,7	27,8

## 4

### Resultados e Discussões

Neste capítulo serão apresentados os resultados e análises relativas aos modelos computacionais simulados. Todos os gráficos apresentados neste capítulo foram obtidos utilizando o Paraview, como ferramenta de pós-processamento para o OpenFOAM e o MatLab para processar gráficos.

Serão analisados, entre outros, o tempo de simulação, a temperatura ao longo do eixo de simetria do queimador (eixo  $z$ ) e ao longo do eixo  $r$  (em diferentes alturas na chama), velocidade no eixo  $z$  em diferentes alturas da chama e fração mássica das espécies químicas em diferentes alturas na chama. Para cada caso e estudo apresentado na tabela 3.4 serão analisados os resultados referentes a estas propriedades.

Todas as análises feitas neste capítulo se referem ao tempo final da simulação, onde todas as chamas se encontram completamente desenvolvidas e em regime permanente.

O intuito deste capítulo é, também, permitir a análise comparativa entre os resultados obtidos para os diferentes casos modelados para cada combustível e os resultados experimentais obtidos por Villanueva et al. [4].

#### 4.1

##### Tempo de simulação

Nesta seção será analisado o tempo de duração para que cada caso alcance uma chama completamente desenvolvida em regime permanente. Para isso utilizou-se dois critérios de análise:

1. Invariância entre o comportamento das propriedades entre um momento e outros.
2. Proximidade entre a altura da chama teórica e a obtida pela simulação.

O momento final ( $t_f$  [s]), em tempo fluidodinâmico de cada simulação, assim como o tipo de simulação e o número de nós de processamento paralelo ( $n$ ) utilizados são apresentados na tabela 4.1.



Tabela 4.1: Configurações e tempo final das simulações.

Caso	Tipo de simulação	n	$t_f$ [s]
1	Serial	1	13,8
2	Paralelo	8	7,3
3	Paralelo	4	5,4
4	Paralelo	4	5,2

A partir dos tempos obtidos em cada simulação apresentados na tabela 4.1, é possível verificar que a simulação é mais rápida quando se utiliza simulação em paralelo com quatro núcleos. Já quando se utiliza um ou oito núcleos, o tempo (wallclock) para se concluir a simulação é de 2 á 8 segundos maior.

A análise feita é um tanto superficial, e por esse motivo, futuramente será feita uma análise de "*speedup*", que irá demonstrar com mais precisão, quantos nós irá otimizar o tempo necessário para realizar a simulação.

## 4.2

### Escoamento no canal de combustível

Nesta seção será analisado o comportamento do escoamento de combustível ao longo do tubo de entrada para acompanhar o estabelecimento da condição de escoamento laminar desenvolvido em todos os casos simulados. Para isto, serão analisadas a velocidade de escoamento ao longo do queimador em cada caso.

Para verificar o estabelecimento da condição de escoamento, representou-se, na figura 4.1, a velocidade de escoamento como função raio em diferentes alturas ( $z$ ), onde  $z$  é contado a partir da entrada do tubo de combustível no domínio computacional. A partir no momento final da simulação, isto é, para o regime permanente.

A figura 4.1 também apresenta a velocidade de escoamento para cada uma das malhas estudadas (seção 3.2). As alturas foram escolhidas arbitrariamente ao longo do tubo de entrada de combustível.

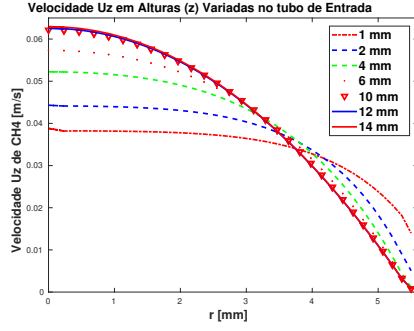
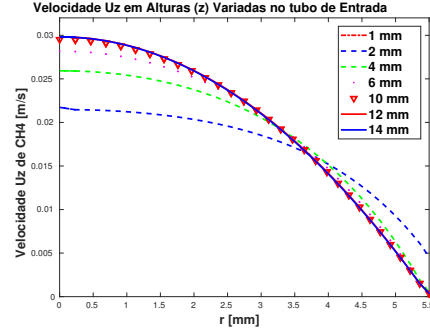
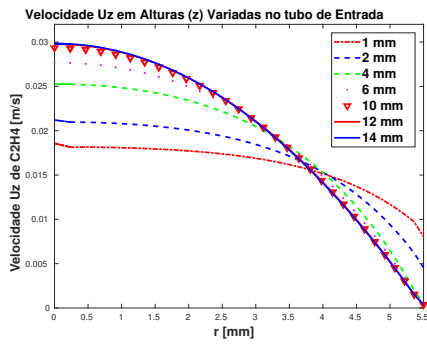
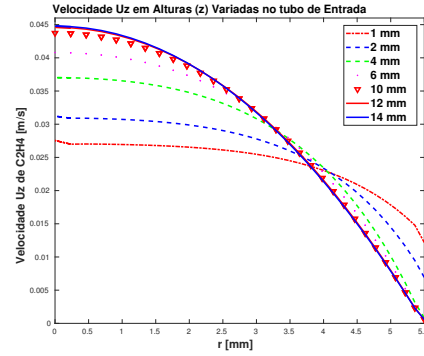
4.1(a): Metano com Malha  $M_A$ 4.1(b): Metano com Malha  $M_B$ 4.1(c): Etileno com Malha  $M_B$ 4.1(d): Etileno com Malha  $M_B$ 

Figura 4.1: Velocidade  $[m/s]$  do escoamento como função do raio  $[mm]$  : (a) Caso 1 para Metano com  $\forall_c=169 \text{ cm}^3/s$  e ar com  $\forall_{ar}=35 \text{ cm}^3/s$ , (b) Caso 2 para Metano com  $\forall_c=80 \text{ cm}^3/s$  e ar com  $\forall_{ar}=60 \text{ cm}^3/s$ , (c) Caso 3 para Etileno com  $\forall_c=80 \text{ cm}^3/s$  e ar com  $\forall_{ar}=60 \text{ cm}^3/s$  e (d) Caso 4 para Etileno com  $\forall_c=121 \text{ cm}^3/s$  e ar com  $\forall_{ar}=60 \text{ cm}^3/s$ .

Analisando a figura 4.1, percebe-se semelhança, para todos os casos, do perfil parabólico da velocidade no tubo ,ao longo de  $r$ , e das camadas limite de velocidade na parte interna do espaço anular. A jusante (em  $z$ ) também há semelhança no aumento de velocidade associada a liberação de calor (como visto na figura 4.2). Já para alturas intermediárias (em  $z$ ), percebe-se semelhança no aumento da velocidade, mas este crescimento é restrito em  $r \cong 3,8 \text{ mm}$ . Percebe-se também que, em todos os casos estudados, o escoamento no tubo é plenamente desenvolvido a montante do final do tubo de injeção do combustível. Isto ocorre pois o perfil radial da velocidade se torna invariante com a distância e assume uma forma parabólica, com valor máximo em  $r = 0 \text{ mm}$  igual ao dobro da velocidade média. Isto garante que a condição de contorno na entrada do tubo não influencia no resultado obtido.

É possível verificar também que, apesar de as malhas não serem iguais em todos os casos, diferenciando apenas o comprimento do tudo de entrada

de combustível, não há nenhuma interferência no desenvolvimento do escoamento de combustível. Dessa forma, todos os casos possuem uma entrada de combustível com escoamento laminar desenvolvido.

### 4.3

#### Estrutura de escoamento reativo

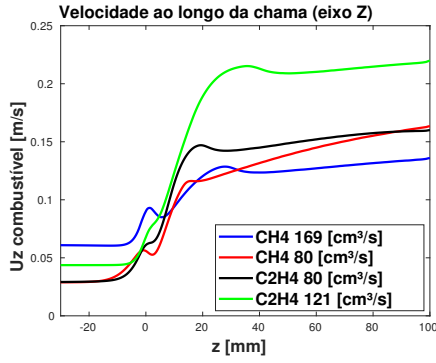
Nesta seção será analisado o comportamento do escoamento ao longo da chama para acompanhar o estabelecimento das regiões reativas e da superfície estequiométrica. Para isso, serão representadas a velocidade de escoamento e a temperatura ao longo da chama para cada caso estudado.

Para acompanhar o desenvolvimento do escoamento reativo, representou-se na figura 4.2(a) a velocidade de escoamento e a temperatura ao longo da chama (eixo  $z$ ) no momento final da simulação de cada caso, ou seja para a chama desenvolvida. A origem do eixo  $z$  é a seção de saída do tubo de combustível. Os gráficos apresentam-se para uma posição próxima ao centro do queimador, com  $r = 0$  m. Além disso, representou-se, também, a velocidade de escoamento e a temperatura em função do raio em diferentes alturas da chama no mesmo momento e para cada caso.

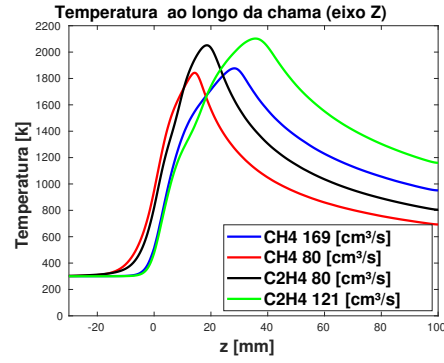
Tabela 4.2: Alturas de análise nas chamas.

Altura ao longo da chama [mm]	Caso 1	Caso 2	Caso 3	Caso 4
Pós	50	25	30	50
Topo ( $h_f$ )	30,4	13,5	18,4	27,8
Meio	10	8	8	15
Base	0	0	0	0

A figura 4.2 apresenta a velocidade de escoamento e a temperatura ao longo da chama (eixo  $z$ ), no momento final de cada caso simulado, para  $r = 0$  mm.



4.2(a): Velocidade de escoamento em função de  $z$ .



4.2(b): Temperatura em função de  $z$ .

Figura 4.2: Velocidade e temperatura do escoamento ao longo de  $z$  [mm] para o tempo  $t = t_{final}$  de cada caso simulado, para  $r = 0$  mm.

Analisando a figura 4.2, percebe-se em todos os casos estudados, que a velocidade e a temperatura do escoamento na região final do tubo de entrada de combustível, isto é, para  $z < 0$ , aumentam ligeiramente. Isto ocorre pois há condução dos gases queimados após a região reativa da chama. Este aumento é maior quanto menor a vazão do combustível. A temperatura aumenta continuamente até passar pela região estequiométrica da chama, a qual é situada, aproximadamente, na posição de máxima temperatura. Após a superfície estequiométrica, a temperatura decresce monotonicamente, enquanto a velocidade decresce ligeiramente e tende a crescer lentamente com o aumento de  $z$ . Este aumento de velocidade na região de pós-chama é devido ao efeito do empuxo de Arquimedes sobre os gases quentes. Para os casos de estudo com metano ( $CH_4$ ), verifica-se que a velocidade é reduzida próximo a saída do tubo de entrada ( $z \cong 0$ ), e em seguida volta a crescer. Acredita-se que este efeito aconteça pois a força feita pelo escoamento de combustível não é suficiente para vencer empuxo de Arquimedes.

A figura 4.3 e a figura 4.4 apresentam respectivamente a componente longitudinal da velocidade de escoamento e temperatura como função do raio para as diferentes alturas ao longo da chama, as quais são dadas na tabela 4.2, no estado estacionário. Visto que cada um dos modelos computacionais simulados gerou uma chama com comprimento diferente, as alturas escolhidas para analisar as propriedades da chama também foram diferentes. As alturas foram escolhidos de forma distribuída para cada caso, de forma que obtenha-se um ponto na base, no meio, no topo (equivalente a altura teórica da chama,  $h_f$ , definida na seção 3.4) e a jusante da superfície estequiométrica. Na tabela 4.2 apresentam-se as alturas ao longo da chama (eixo  $z$ ) utilizado em cada caso.

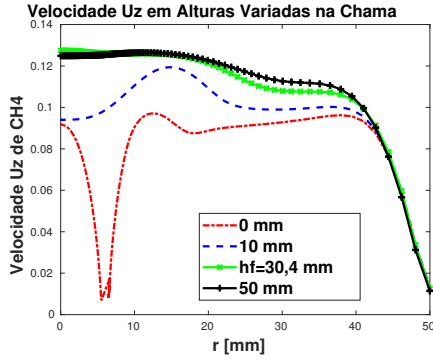
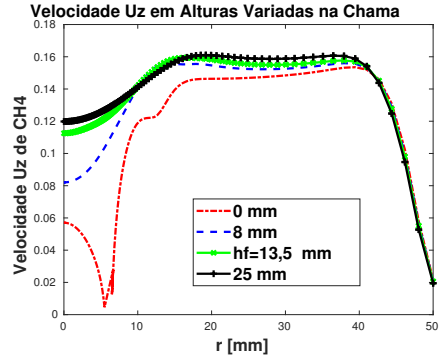
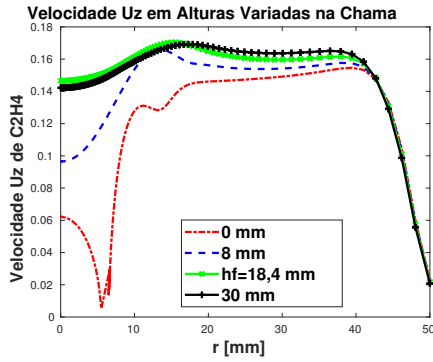
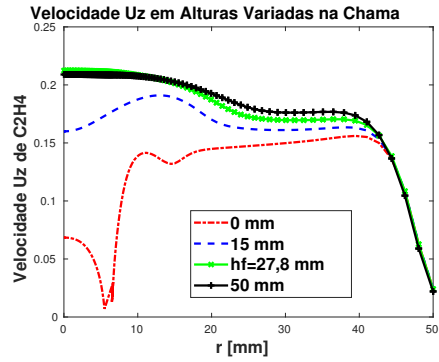
4.3(a): Metano com Malha  $M_A$ 4.3(b): Metano com Malha  $M_B$ 4.3(c): Etileno com Malha  $M_B$ 4.3(d): Etileno com Malha  $M_B$ 

Figura 4.3: Componente  $z$  da velocidade [m/s] do escoamento como função do raio [mm] em diferentes alturas para todos os casos estudados. (a) Caso 1 para Metano com  $\dot{V}_c = 169 \text{ cm}^3/\text{s}$  e ar com  $\dot{V}_{ar} = 35 \text{ cm}^3/\text{s}$ , (b) Caso 2 para Metano com  $\dot{V}_c = 80 \text{ cm}^3/\text{s}$  e ar com  $\dot{V}_{ar} = 60 \text{ cm}^3/\text{s}$ , (c) Caso 3 para Etileno com  $\dot{V}_c = 80 \text{ cm}^3/\text{s}$  e ar com  $\dot{V}_{ar} = 60 \text{ cm}^3/\text{s}$  e (d) Caso 4 para Etileno com  $\dot{V}_c = 121 \text{ cm}^3/\text{s}$  e ar com  $\dot{V}_{ar} = 60 \text{ cm}^3/\text{s}$ .

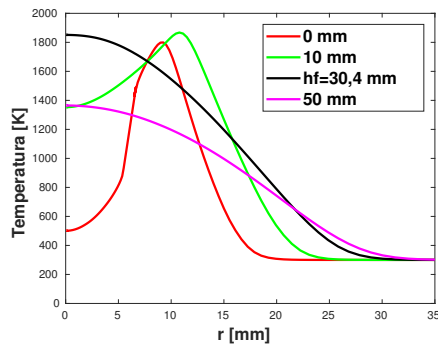
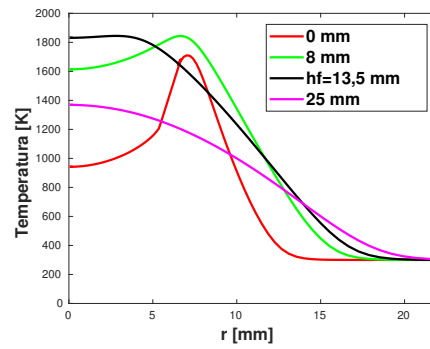
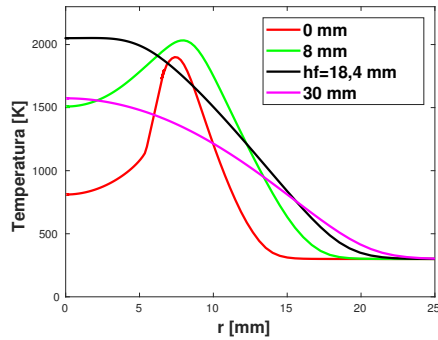
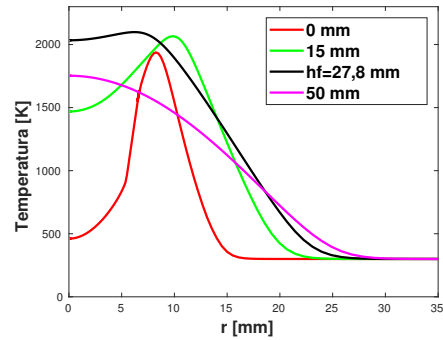
4.4(a): Metano com Malha  $M_A$ 4.4(b): Metano com Malha  $M_B$ 4.4(c): Etileno com Malha  $M_B$ 4.4(d): Etileno com Malha  $M_B$ 

Figura 4.4: Temperatura [K] do escoamento como função do raio [mm] em diferentes alturas para todos os casos estudados. (a) Caso 1, (b) Caso 2, (c) Caso 3 e (d) Caso 4.

Na figura 4.3 é possível verificar em todos os casos, que a velocidade de combustível e ar após a saída tendem a estabilizar. Na saída do tubo de entrada de combustível ( $z \cong 0$  e  $r < 0.0055$  m), percebe-se o perfil parabólico de velocidade ao longo de  $r$  para todos os casos estudados. Na região onde escoar ( $r > 0.0055$  m), ainda para  $z \cong 0$ , percebe-se que a componente velocidade inicialmente cresce com o aumento de  $r$ , tende a estabilizar, e decresce após a entrada de combustível, até atingir a parede do queimador ( $r \cong 0$  m). Após a saída de combustível, percebe-se que a velocidade em  $z$  tende a estabilizar, e decresce para  $r$  próximo a parede do queimador ( $r \cong 0$  m).

Analisando a figura 4.4, percebe-se que,  $z \cong 0$ , a temperatura no centro da chama ( $r < 5$  mm) é menor, cresce até atingir um máximo de temperatura, explicitando a região estequiométrica, e tende a decrescer até atingir a temperatura ambiente ( $T_\infty = 300$  K). Para as alturas intermediárias em  $z$  percebe-se um aumento na temperatura, porém comportamento da curva de temperatura é similar ao encontrado em  $z = 0$ . Para  $z = h_f$ , a temperatura apresenta um perfil parabólico, onde a máxima temperatura é encontrada no centro do queimador, na região estequiométrica, e decresce à medida que o  $r$  aumenta. À jusante da altura da chama ( $z > h_f$ ), percebe-se que a temperatura decresce mantendo o perfil parabólico. A tendência da redução de temperatura de após a região estequiométrica se dá devido à condução dos gases queimados na direção radial à jusante desta região. Este resultado é similar ao resultado experimental encontrado por Villanueva et al. [4], que está apresentado na figura 1.4.

#### 4.4

#### Comparação das chamas de metano

Nesta seção será analisado o comportamento de espécies químicas representativas ao longo das chamas de metano. O comportamento das espécies é apresentado ao longo da chama, nas alturas referentes à base, ao meio, ao topo e após a chama, especificadas na tabela 4.2. Isto permite acompanhar o desenvolvimento das reações existentes no processo e da estequiometria. Para isso, serão representadas as frações mássicas das espécies majoritárias ( $CH_4$ ,  $CO_2$ ,  $CO$ ,  $O_2$  e  $H_2O$ ), minoritárias ( $H$ ,  $OH$ ,  $HCCO$  e  $H_2$ ) e a fração mássica de acetileno ( $C_2H_2$ ), ao longo da chama para cada caso estudado. Acetileno será representado separadamente, pois este é o principal precursor da formação da fuligem.

Quatro pontos de análise são escolhidos ao longo de cada uma das chamas de metano. Nas seções 4.4.1, 4.4.2 e 4.4.3 são apresentados os resultados referentes aos casos 1 e 2 com metano. A partir da análise destas figuras,

será possível compreender a estrutura detalhada de cada uma das chamas.

#### 4.4.1

##### Distribuição das espécies majoritárias

Nesta seção, são discutidos os resultados mostrados nas figuras 4.5 e 4.6, que representam a fração mássica em função do raio (mm) das espécies majoritárias ( $CH_4$ ,  $CO_2$ ,  $CO$ ,  $O_2$  e  $H_2O$ ) para queima de metano nos casos 1 e 2, apresentados na tabela 3.4.

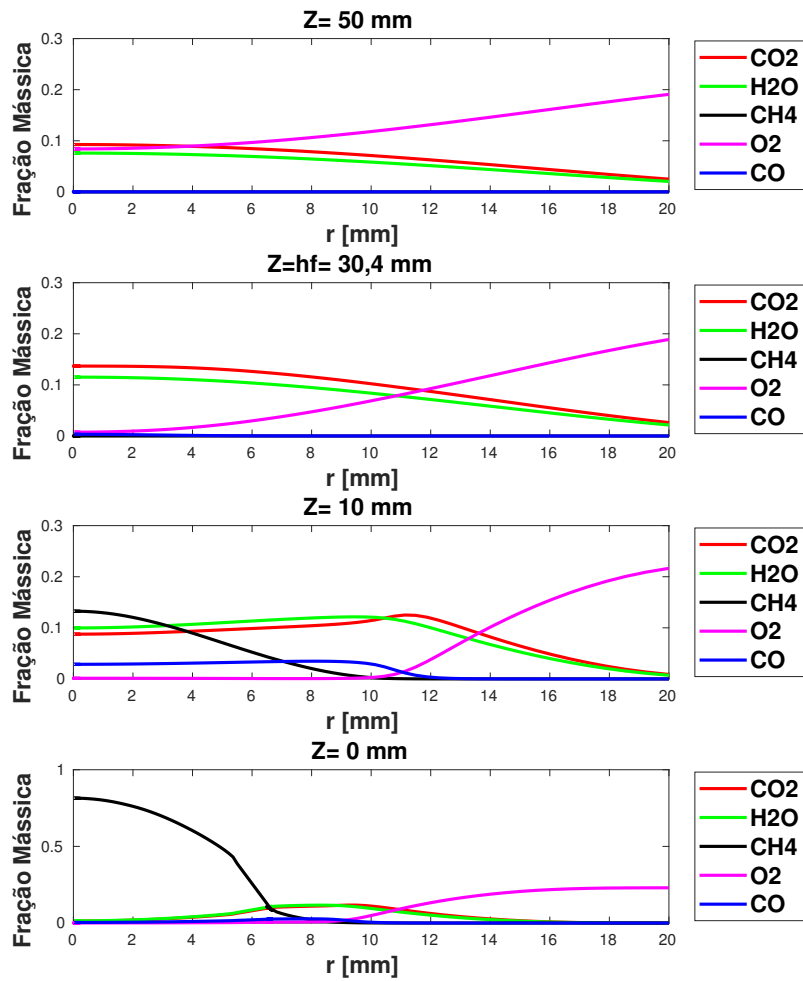


Figura 4.5: Fração mássica das espécies majoritárias em função do raio [mm], ao longo da chama, para metano com  $\dot{V}_c = 169 \text{ cm}^3/\text{s}$  e ar com  $\dot{V}_{ar} = 35 \text{ cm}^3/\text{s}$ , Caso 1



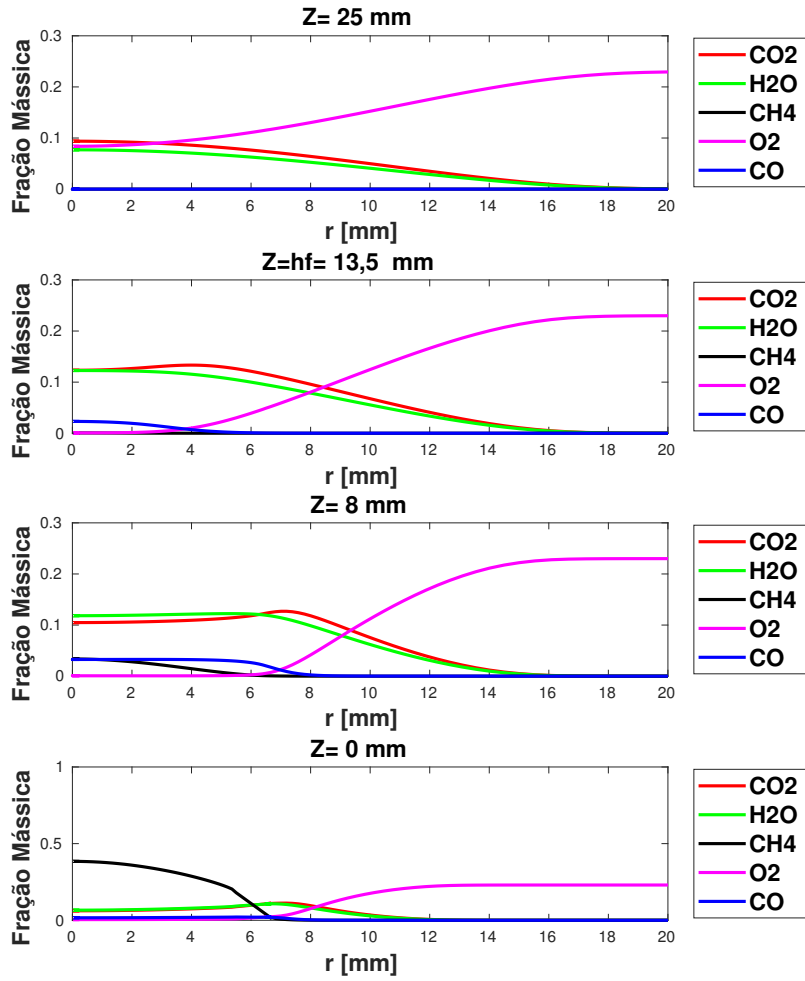


Figura 4.6: Fração mássica das espécies majoritárias em função do raio [mm], ao longo da chama, para metano com  $\dot{V}_c=80 \text{ cm}^3/\text{s}$  e ar com  $\dot{V}_{ar}=60 \text{ cm}^3/\text{s}$ , Caso 2

Nas figuras 4.5 e 4.6 a superfície estequiométrica se encontra na região onde as espécies produtos de combustão ( $\text{CO}_2$ ,  $\text{H}_2\text{O}$ ) estão sendo produzidas e os reagentes ( $\text{O}_2$ ,  $\text{CH}_4$ ) consumidos, ou seja, a fração mássica é crescente ou decrescente para algumas espécies químicas presentes pois há queima de gases.

Também é possível perceber que, em  $z = 0 \text{ mm}$ ,  $\text{CH}_4$  possui alta fração mássica, enquanto  $\text{CO}_2$ ,  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{O}_2$  e  $\text{CO}$  possuem fração mássica próximas de zero. A jusante de  $z = 0$ , percebe-se que começa a haver reação e  $\text{CH}_4$  é consumido, atingindo uma fração mássica nula, enquanto  $\text{CO}_2$  e  $\text{H}_2\text{O}$  começam a ser produzidos próximo a superfície estequiométrica.

Para um valor de  $z$  intermediário, a fração mássica de  $\text{CH}_4$  reduz, enquanto  $\text{CO}_2$ ,  $\text{H}_2\text{O}$  e  $\text{CO}$  possuem um aumento na fração mássica antes da superfície estequiométrica. Para grandes valores de  $r$ , percebe-se que  $\text{CH}_4$ ,

$CO_2$  e  $H_2O$  são reduzidos, atingindo uma fração mássica aproximadamente nula, enquanto  $O_2$  aumenta a fração mássica e  $CO$  é praticamente nulo no interior da superfície estequiométrica.

Na altura da chama teórica ( $z = h_f$ ), percebe-se que  $CH_4$  e  $CO$  possuem fração mássica aproximadamente nula. Já  $CO_2$  e  $H_2O$  possuem aumento na fração mássica em grande parte do raio do queimador, já  $O_2$  continua a aumentar sua fração mássica quando  $r$  cresce.

Após a superfície estequiométrica da chama ( $z > h_f$ ), percebe-se que  $CH_4$  e  $CO$  mantêm fração mássica aproximadamente nula, enquanto  $CO_2$  e  $H_2O$  reduzem a fração mássica e  $O_2$  continua a aumentar.

A partir da comparação das figuras 4.5 e 4.6 percebe-se que há diferença na fração mássica de  $CH_4$ , onde a mesma é maior para o escoamento de combustível com  $\dot{V}_c=169 \text{ cm}^3/s$  e ar com  $\dot{V}_{ar}=35 \text{ cm}^3/s$  (figura 4.5), e menor para o escoamento de combustível com  $\dot{V}_c=80 \text{ cm}^3/s$  e ar com  $\dot{V}_{ar}=60 \text{ cm}^3/s$  (figura 4.6).

#### 4.4.2

##### Distribuição das espécies minoritárias

Nesta seção, as figuras 4.7 e 4.8, que representam a fração mássica em função do raio (mm) das espécies minoritárias ( $H$ ,  $OH$ ,  $HCCO$  e  $H_2$ ) para queima de metano nos casos 1 e 2, apresentados na tabela 3.4.

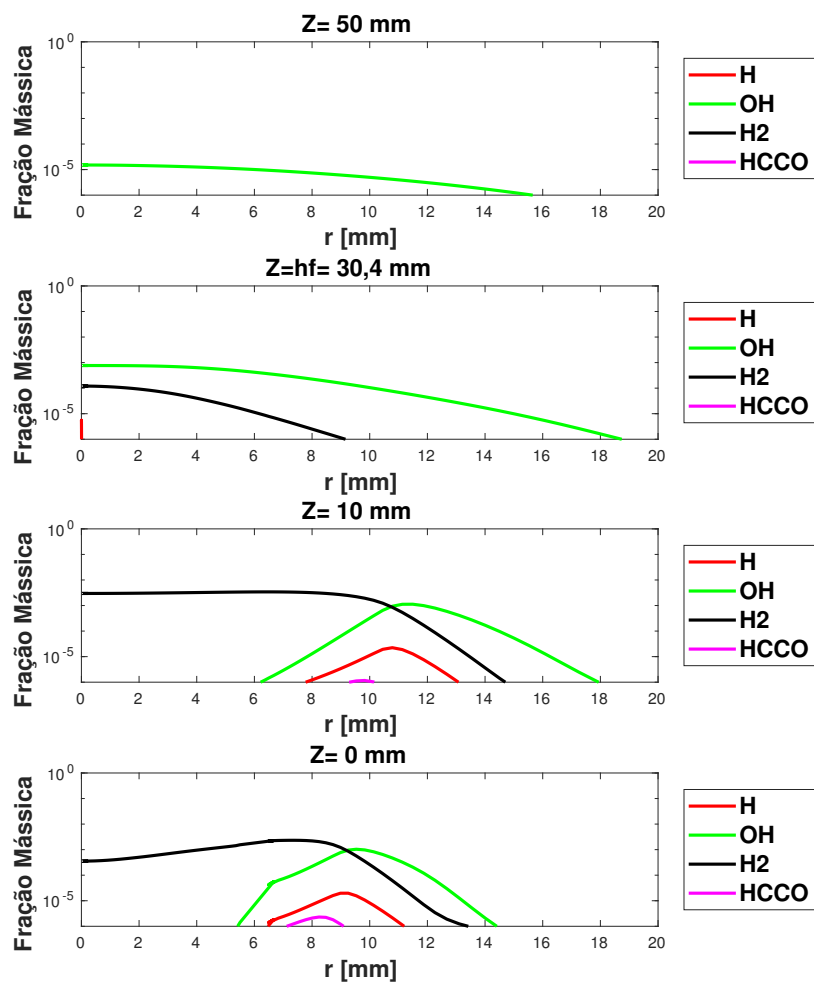


Figura 4.7: Fração mássica das espécies minoritárias em função do raio [mm], ao longo da chama, para metano com  $\dot{V}_c = 169 \text{ cm}^3/\text{s}$  e ar com  $\dot{V}_{ar} = 35 \text{ cm}^3/\text{s}$ , Caso 1

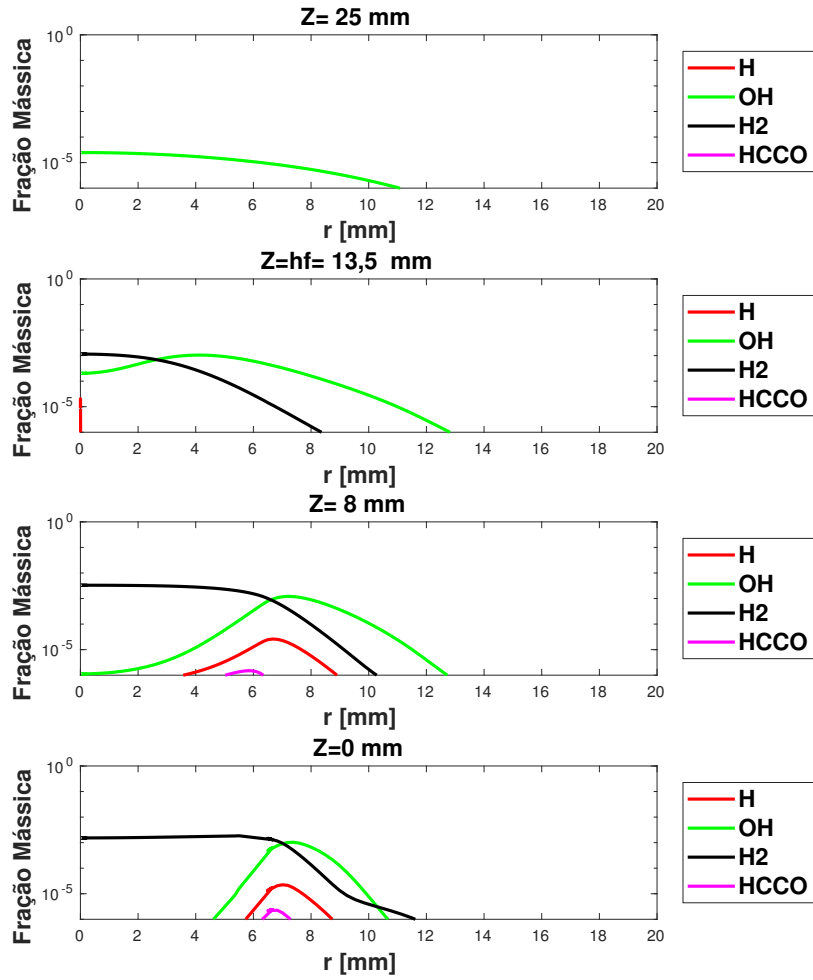


Figura 4.8: Fração mássica das espécies minoritárias em função do raio [mm], ao longo da chama, para metano com  $\dot{V}_c = 80 \text{ cm}^3/\text{s}$  e ar com  $\dot{V}_{ar} = 60 \text{ cm}^3/\text{s}$ , Caso 2

Nas figuras 4.7 e 4.8 também é possível perceber que a superfície estequiométrica se encontra na região onde as espécies estão sendo produzidas ou consumidas, ou seja, a fração mássica é crescente ou decrescente para algumas espécies químicas presentes pois há queima de gases.

Percebe-se também que, em  $z = 0$  mm,  $H_2$  possui maior fração mássica a montante superfície estequiométrica, e decresce a jusante da mesma.  $OH$ ,  $H$  e  $HCCO$  começam a ser produzidos ao se aproximar da zona reativa (no eixo  $r$ ), e consumidos após a mesma.

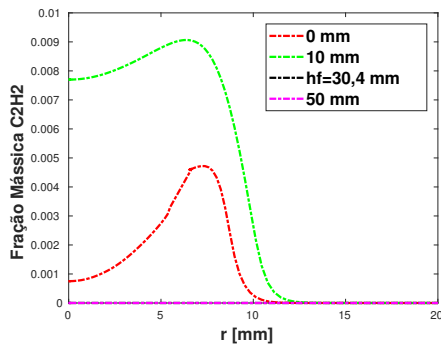
Para  $z$  intermediário,  $H_2$  continua a apresentar fração mássica alta, sendo decrescente a jusante da superfície estequiométrica (no eixo  $r$ ). A fração mássica de  $OH$  e de  $H$  mantém-se crescente nas proximidades da superfície estequiométrica, e decresce a após a mesma.

Na altura da chama teórica ( $z = h_f$ ), percebe-se que a fração mássica de  $H_2$  decresce, enquanto a de  $OH$  cresce.  $H$  e  $HCCO$  atingem uma fração mássica aproximadamente nula ao longo do raio do queimados ( $r$ ). A jusante, percebe-se que  $OH$  apresenta redução na fração mássica, enquanto todas as outras espécies químicas possuem fração mássica aproximadamente nulas.

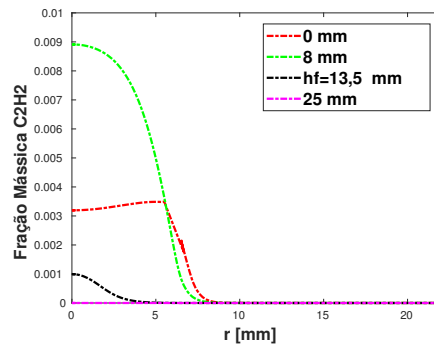
#### 4.4.3

##### Distribuição de $C_2H_2$

As figuras 4.9(a) e 4.9(b) representam a fração mássica de acetileno ( $C_2H_2$ ) em função raio (mm) para queima de metano nos casos 1 e 2, apresentados na tabela 3.4.



4.9(a): Metano com  $\dot{V}_c=169 \text{ cm}^3/\text{s}$  e com  $\dot{V}_{ar}=35 \text{ cm}^3/\text{s}$



4.9(b): Metano com  $\dot{V}_c=80 \text{ cm}^3/\text{s}$  e com  $\dot{V}_{ar}=60 \text{ cm}^3/\text{s}$

Figura 4.9: Fração mássica de Acetileno em função do raio [mm], ao longo da chama.

Nas figuras 4.9(a) e 4.9(b) percebe-se que, em  $z = 0$  mm,  $C_2H_2$  (acetileno) já apresenta fração mássica maior do que zero, ou seja, já está sendo formado. É possível perceber que a fração mássica cresce a medida que se aproxima da

superfície estequiométrica (no eixo  $r$ ), e decresce após a mesma. A jusante (no eixo  $z$ ), percebe-se que a fração mássica é crescente até a superfície estequiométrica ( $z < h_f$ ), tendendo a zero a medida que se afasta da mesma ( $z \geq h_f$ ).

Em combustão, devido a não linearidade da taxa de produção (Arrhenius), não é habitual encontrar "*parabólico*", *linear*, etc.

## 4.5

### Comparação das chamas de etileno

Nesta seção será analisado o comportamento de espécies químicas representativas ao longo das chamas de etileno. Isto permite acompanhar o desenvolvimento das reações existentes no processo e da estequiometria. Para isso, serão representadas as frações mássicas das espécies majoritárias ( $C_2H_4$ ,  $CO_2$ ,  $CO$ ,  $O_2$  e  $H_2O$ ), minoritárias ( $H$ ,  $OH$ ,  $HCCO$  e  $H_2$ ) e a fração mássica de acetileno ( $C_2H_2$ ), ao longo da chama para cada caso estudado. Acetileno será representado separadamente pois este é o principal precursor da formação da fuligem.

Quatro pontos de análise são escolhidos ao longo de cada uma das chamas de metano. Nas seções 4.5.1, 4.5.2 e 4.5.3 são apresentados os resultados referentes aos casos 3 e 4 com metano. A partir da análise destas figuras, será possível compreender a estrutura detalhada de cada uma das chamas.

O comportamento das espécies é apresentado ao longo da chama, nas alturas referentes a base, ao meio, ao topo e após a chama, especificadas na tabela 4.2.

#### 4.5.1

##### Distribuição das espécies majoritárias

Nesta seção, são apresentadas as figuras 4.10 e 4.11, que representam a fração mássica em função do raio (mm) das espécies majoritárias ( $C_2H_4$ ,  $CO_2$ ,  $CO$ ,  $O_2$  e  $H_2O$ ) para queima de etileno nos casos 3 e 4, apresentados na tabela 3.4.

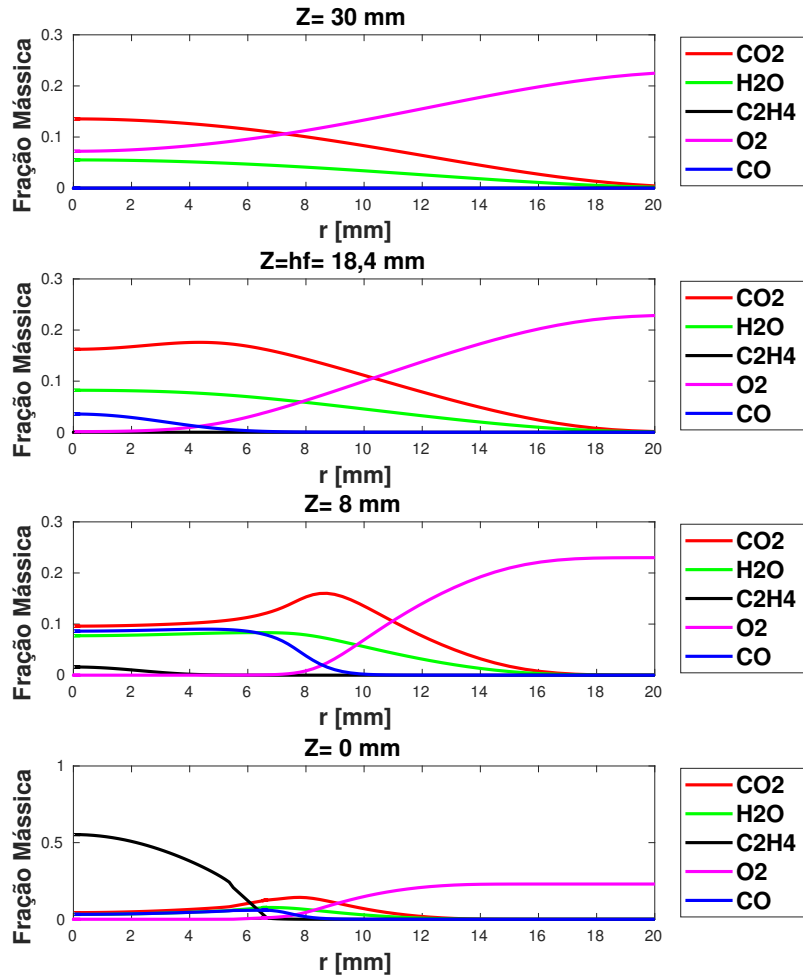


Figura 4.10: Fração mássica das espécies majoritárias em função do raio [mm], ao longo da chama, para etileno com  $\dot{V}_c = 80 \text{ cm}^3/\text{s}$  e ar com  $\dot{V}_{ar} = 60 \text{ cm}^3/\text{s}$ , Caso 2

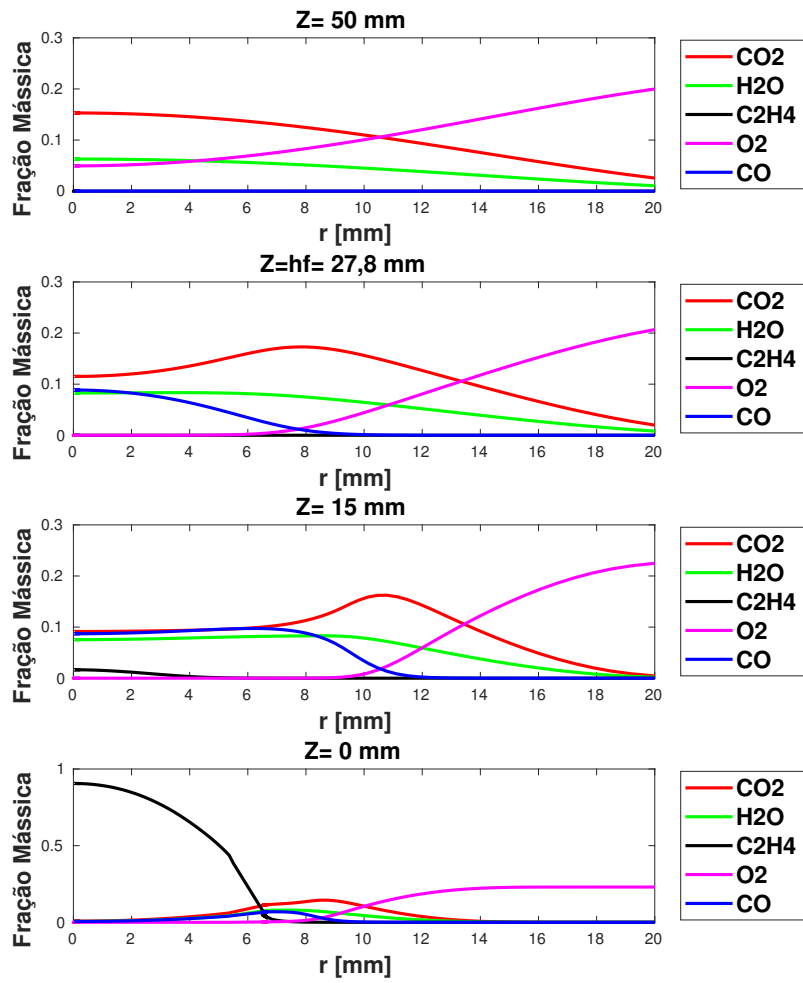


Figura 4.11: Fração mássica das espécies majoritárias em função do raio [mm], ao longo da chama, para etileno escoando com  $\dot{V}_c = 121 \text{ cm}^3/\text{s}$  e ar escoando com  $\dot{V}_{ar} = 60 \text{ cm}^3/\text{s}$ , Caso 4.



Nas figuras 4.10 e 4.11 percebe-se que a superfície estequiométrica se encontra na região onde as espécies estão sendo produzidas ou consumidas, ou seja, a fração mássica é crescente ou decrescente para algumas espécies químicas presentes pois há queima de gases.

Também é possível perceber que, em  $z = 0$  mm,  $C_2H_4$  possui alta fração mássica antes da região estequiométrica, enquanto  $CO_2$ ,  $H_2O$ ,  $O_2$  e  $CO$  possuem fração mássica próximas de zero. A montante de  $r$ , percebe-se que começa a haver reação e  $C_2H_4$  é consumido, atingindo uma fração mássica nula, enquanto  $CO_2$  e  $H_2O$  começam a ser produzidos próximo a superfície estequiométrica,  $O_2$  é produzido após a superfície estequiométrica e  $CO$  praticamente não é produzido.

Para um  $z$  intermediário, a fração mássica de  $C_2H_4$  reduz, enquanto  $CO_2$ ,  $H_2O$  e  $CO$  possuem um aumento na fração mássica antes da superfície estequiométrica. A jusante de  $r$ , percebe-se que  $C_2H_4$ ,  $CO_2$  e  $H_2O$  são reduzidos, atingindo uma fração mássica aproximadamente nula, enquanto  $O_2$  aumenta a fração mássica e  $CO$  é praticamente nulo após a superfície estequiométrica.

Na altura da chama teórica ( $z = h_f$ ), percebe-se que  $C_2H_4$  possui fração mássica aproximadamente nula e  $CO$  tem fração mássica mas alta a montante da superfície estequiométrica. Já  $CO_2$  e  $H_2O$  possuem aumento na fração mássica em grande parte do raio do queimador.  $O_2$  continua a aumentar a fração mássica após a superfície estequiométrica (no eixo  $r$ ).

Após a superfície estequiométrica da chama ( $z > h_f$ ), percebe-se que  $C_2H_4$  e  $CO$  possuem fração mássica aproximadamente nula, enquanto  $CO_2$  e  $H_2O$  reduzem a fração mássica e  $O_2$  continua a aumentar.

A partir da comparação das figuras 4.5 e 4.6 percebe-se que há diferença na fração mássica de  $C_2H_4$ , onde a mesma é menor para o escoamento de combustível com  $\dot{V}_c=80 \text{ cm}^3/\text{s}$  e ar com  $\dot{V}_{ar}=60 \text{ cm}^3/\text{s}$  (figura 4.10), e maior para o escoamento de combustível  $\dot{V}_c=121 \text{ cm}^3/\text{s}$  e ar com  $\dot{V}_{ar}=60 \text{ cm}^3/\text{s}$  (figura 4.11).

#### 4.5.2

##### Distribuição das espécies minoritárias

Nesta seção, as figuras 4.12 e 4.13, que representam a fração mássica em função do raio (mm) das espécies minoritárias ( $H$ ,  $OH$ ,  $HCCO$  e  $H_2$ ) para queima de etileno nos casos 3 e 4, apresentados na tabela 3.4.

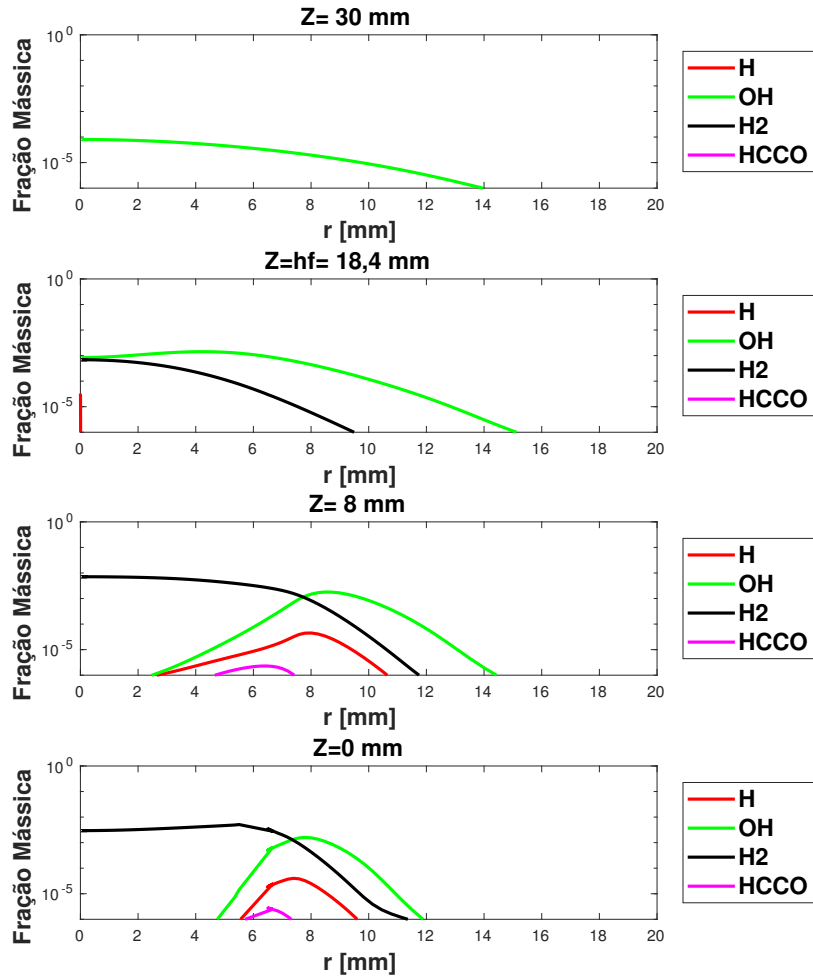


Figura 4.12: Fração mássica das espécies minoritárias em função do raio [mm], ao longo da chama, para etileno com  $\dot{V}_c = 80 \text{ cm}^3/\text{s}$  e ar com  $\dot{V}_{ar} = 60 \text{ cm}^3/\text{s}$ , Caso 2.

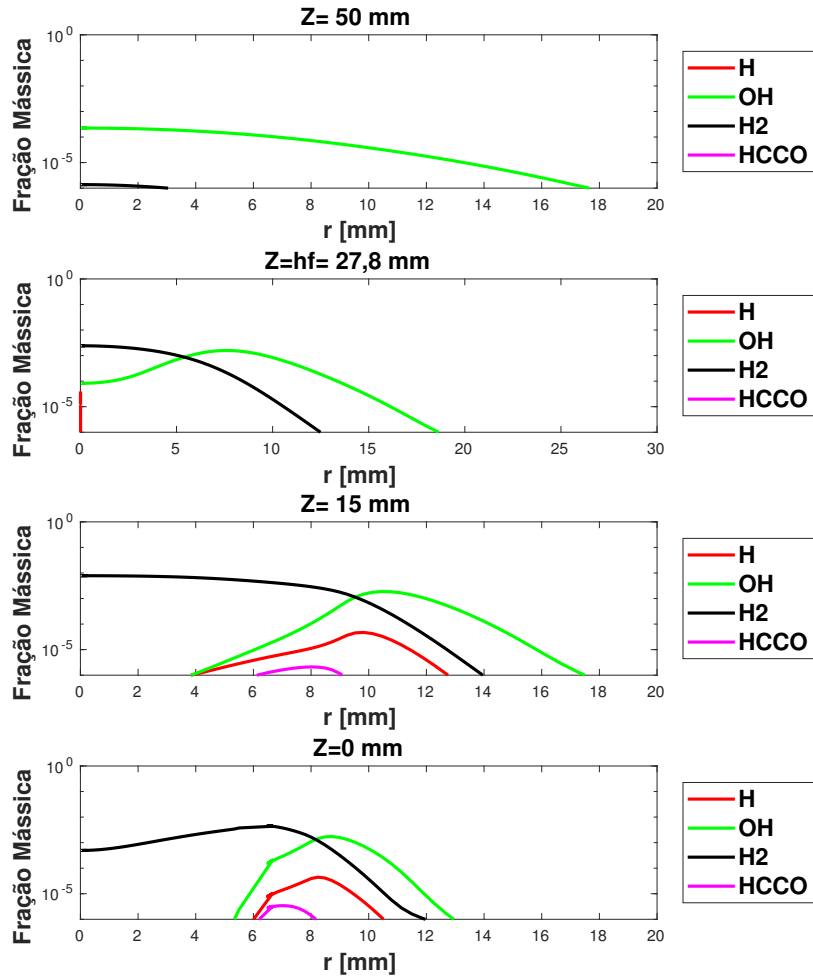


Figura 4.13: Fração mássica das espécies minoritárias em função do raio [mm], ao longo da chama, para etileno com  $\dot{V}_c = 121 \text{ cm}^3/\text{s}$  e ar com  $\dot{V}_{ar} = 60 \text{ cm}^3/\text{s}$ , Caso4.

Nas figuras 4.12 e 4.13 percebe-se grande semelhança com as figuras 4.7 e 4.8. Nas figuras 4.12 e 4.13 percebe-se também que, em  $z = 0$  mm,  $H_2$  possui maior fração mássica a montante da superfície estequiométrica, e decresce a jusante da mesma.  $OH$ ,  $H$  e  $HCCO$  começam a ser produzidos ao se aproximar da zona reativa (no eixo  $r$ ), e consumidos após a mesma.

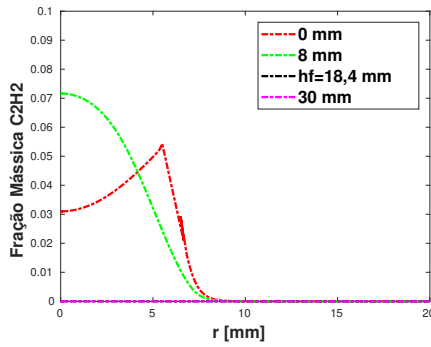
Para  $z$  intermediário,  $H_2$  continua a apresentar fração mássica alta, sendo decrescente a jusante da superfície estequiométrica (no eixo  $r$ ). A fração mássica de  $OH$  e de  $H$  mantém-se crescente nas proximidades da superfície estequiométrica, e decresce a após a mesma.

Na altura da chama teórica ( $z = h_f$ ), percebe-se que a fração mássica de  $H_2$  decresce, enquanto a de  $OH$  cresce.  $H$  e  $HCCO$  atingem uma fração mássica aproximadamente nula ao longo do raio do queimados ( $r$ ). A jusante, percebe-se que  $OH$  apresenta redução na fração mássica, enquanto todas as outras espécies químicas possuem fração mássica aproximadamente nulas.

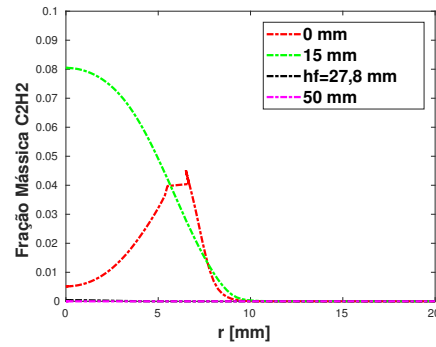
### 4.5.3

#### Distribuição de $C_2H_2$

As figuras 4.14(a) e 4.14(b) representam a fração mássica de acetileno ( $C_2H_2$ ) em função raio (mm) para queima de etileno nos casos 3 e 4, apresentados na tabela 3.4.



4.14(a): Etileno com  $\dot{V}_c=80 \text{ cm}^3/\text{s}$  e com  $\dot{V}_{ar}=60 \text{ cm}^3/\text{s}$



4.14(b): Etileno com  $\dot{V}_c=121 \text{ cm}^3/\text{s}$  e  $\dot{V}_{ar}=60 \text{ cm}^3/\text{s}$

Figura 4.14: Fração mássica de Acetileno em função do raio [mm], ao longo da chama, para (a) Caso 2 (b) Caso 4.

Nas figuras 4.14(a) e 4.14(b) percebe-se que, em  $z = 0$  mm,  $C_2H_2$  (acetileno) já apresenta fração mássica não nula, ou seja, já está sendo formado. É possível perceber que a fração mássica cresce a medida que se aproxima da superfície estequiométrica (no eixo  $r$ ), e decresce após a mesma, assumindo um perfil parabólico. A jusante (no eixo  $z$ ), percebe-se que a fração mássica é

crescente até a superfície estequiométrica ( $z < h_f$ ), tendendo a zero a medida que se afasta da mesma ( $z \geq h_f$ ).

A partir das figuras 4.9 e 4.14, percebe-se que há diferença na fração mássica de acetileno ( $C_2H_2$ ) produzidas, onde a queima de metano (figura 4.9) produz aproximadamente 10 vezes menos  $C_2H_2$  do que a queima de etileno (4.14). Isso permite explicar porque a combustão de etileno produz mais fuligem do que a combustão de metano, já que  $C_2H_2$  é o precursor da formação da fuligem.

## 5

### Conclusões e perspectivas

Neste capítulo serão apresentadas as conclusões e as perspectivas deste trabalho. As conclusões baseiam-se nas análises dos tempos de simulação, do escoamento do canal de combustível, da estrutura do escoamento ao longo da chama, e do comportamento das espécies ao longo de todos os casos estudados e uma análise geral dos resultados obtidos.

#### 5.1

##### Conclusão

O modelo computacional criado para verificar o comportamento de um processo de combustão utilizando o OpenFOAM foi empregado para descrever a queima de metano e de etileno com o modelo GRI de cinética química detalhada.

Duas malhas foram utilizadas neste estudo, o que resultou na redução de aproximadamente uma semana no tempo "wallclock" de simulação, sem alterar o comportamento dos modelos estudados. Além disso, diferentes vazões de combustível foram estudadas, o que demonstrou que quanto maior a vazão de combustível, maior a fração mássica de combustível na saída do queimador e maior a altura da chama no regime permanente.

A partir dos tempos obtidos para cada simulação estudada, demonstrou-se que a simulação é mais rápida quando realizada em paralelo utilizando quatro núcleos. Encontrou-se uma diferença de aproximadamente 2s da simulação em paralelo com 8 núcleos para as simulações em paralelo com 4 núcleos. Isso mostra que, ao variar a quantidade de núcleos em simulações em paralelo, pode-se otimizar o tempo fluidodinâmico da mesma.

Foi demonstrado que, em todos os casos estudados, o escoamento de entrada de combustível é plenamente desenvolvido a montante da chama, pois o perfil radial de velocidade se torna invariante com a distância no interior do tudo.

Em cada caso estudado, foi observado que a temperatura ao longo da chama é mais alta na superfície estequiométrica, atingindo um valor máximo na região central da chama, próximo a altura de chama teórica ( $h_f$ ). Mostrou-se também que a velocidade de combustível e ar tendem a estabilizar depois da chama.

Observou-se também, em todos os casos estudados, que a distribuição da fração mássica das espécies majoritárias ( $CH_4$ ,  $C_2H_4$ ,  $CO_2$ ,  $CO$ ,  $O_2$  e

$H_2O$ ) e minoritárias ( $H$ ,  $OH$ ,  $HCCO$  e  $H_2$ ) são semelhantes. Para as espécies majoritárias, o combustível possui fração mássica máxima próximo a saída do tubo de combustível ( $z = 0$ ), e ente a zero a jusante da chama. Já  $CO_2$ ,  $O_2$  e  $H_2O$  possuem fração mássica aproximadamente nula para  $z = 0$ , e tendem a crescer a jusante. A fração mássica de  $CO$  é aproximadamente nula para  $z = 0$ , cresce na região intermediária da chama e tende a zero a jusante da mesma. Para as espécies minoritárias,  $H_2$  e  $OH$  possuem maior fração mássica máxima em  $z = 0$ , e decresce a jusante chama. Já  $H$  e  $HCCO$  possuem fração mássica na região inferior da chama ( $0 \leq z \leq h_f$ ), e a jusante tendem a zero.

Dois combustíveis foram investigados, metano e etileno, e demonstrou-se que, para as mesmas vazões, etileno possui maior altura de chama no regime permanente. Além disso, mostrou-se também que a chama de etileno produz aproximadamente dez vezes mais acetileno ( $C_2H_2$ ) do que a chama de metano, o que explica porque, a combustão de etileno produz mais fuligem do que a de metano.

O uso do mecanismo detalhado para cinética química da combustão permitiu a análise de variadas espécies químicas, como  $C_2H_2$  e  $OH$  por exemplo. Isto permite fazer um estudo mais aprofundado da chama, dando margem para, futuramente, estudar a formação da fuligem.

## 5.2

### Perspectivas

Este trabalho abre portas para o estudo computacional da cinética de formação se fuligem, e para isso serão realizados os seguintes passos:

- Fazer o teste de "*speedup*" para otimizar a simulação dos modelos que serão estudados futuramente. Este teste permite encontrar a quantidade ótima de núcleos que devem ser utilizados para otimizar o tempo das simulações.
- Aprender o mecanismo de formação de fuligem.
- Modelar a cinética química da combustão incluindo a formação de fuligem.

## Referências Bibliográficas

- [1] Balanço energético Nacional: Ministério de Minas e Energia. Disponível em: <<https://ben.epe.gov.br/>>. Acesso em 26 jul. 2017.
- [2] CONAMA: Lei, <<http://www.mma.gov.br/port/conama/legi.cfm>>. acesso em 24 jul. 2017.
- [3] MERGULHÃO, C. S.; CACELLA, N. L. S.; NASCIMENTO, S. P. S. **Estudo experimental da formação de fuligem em chamas laminares de hidrocarbonetos e ar**. Rio de Janeiro, 2016. 96 p. Trabalho de Conclusão de Curso – Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro.
- [4] VILLANUEVA, J. J. C.; SILVA, L. F. F., Experimental study of laminar non premixed ethylene/air flames using laser induced incandescence and fluorescence. **Cobem–2017–1593**, ABCM, Curitiba, 2017.
- [5] EAVES, N. A. et al. CoFlame: A refined and validated numerical algorithm for modeling sooting laminar coflow diffusion flames. **Computer Physics Communications**, v. 207 , p. 464-477, 2016.
- [6] SANTORO R. J. et al. **Combustion Science and Technology**, v. 53, p. 89-115, 1987.
- [7] KENNEDY I. M. et al. **Combustion Flame**. v. 107, p. 368-382, 1996.
- [8] MCALLISTER S.; CHEN, J.; FERNANDEZ-PELLO A. C. **Fundamentals of Combustion Processes**, USA, Springer, 2011, 327 p.
- [9] NIST-JANAF Tabelas Termodinâmicas. Disponível em: <<http://kinetics.nist.gov/janaf/>>. Acesso em 15 out. 2017.
- [10] MANSHA, M et al. Development and testing of a detailed kinetic mechanism of natural gas combustion in internal combustion engine. **Journal of Natural Gas Chemistry**, v. 19, p. 97-106, 2017.
- [11] COIMBRA A., *Modelagem computacional de chamas laminares não pré misturadas, utilizando OpenFoam*, Trabalho de Conclusão de Curso, Departamento de Engenharia Mecânica, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, 2017.
- [12] Equação de Navier Stokes. Disponível em: < [https://www.cfd-online.com/Wiki/NavierStokes\\_equations](https://www.cfd-online.com/Wiki/NavierStokes_equations)>. Acesso em 2 ago. 2017.



- [13] ORBEGOSO, E. M.; SILVA L. F. F.; NOVGORODCEV Junior A. R. On The Predictability of Chemical Kinetics for the Description of the Combustion of Simple Fuels. **Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering**, v. 33, no. 4, Rio de Janeiro, 2011.
- [14] OPERATING MANUAL: Precision Gas Mass Flow Controllers. **Alicat Scientific**, p. 98, 2017.