



**Nicole Lopes Monteiro de Barros Junqueira**

**Modelos de ordem reduzida aplicados a uma  
configuração representativa da combustão**

**Projeto de Graduação**

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

Orientador : Luís Fernando Figueira da Silva  
Co–Orientador: Louise da Costa Ramos

Rio de Janeiro  
Dezembro de 2019

## Agradecimentos

Agradeço aos meus pais, Dinorá Cristina Lopes e Claudio Junqueira, e a minha irmã querida Livia Junqueira, pelo suporte, incentivo, amizade e amor incondicional. Não existem palavras para agradecê-los o suficiente, sem eles eu não alcançaria nem metade dos meus sonhos.

Agradeço especialmente ao meu orientador, professor Luís Fernando Figueira da Silva, e minha coorientadora Louise da Costa Ramos, por todo o conhecimento passado, experiência, aprendizado, apoio e, sobretudo, pela paciência.

Aos meus amigos de infância, Karina Riccio, Lays Santos, Matheus Sucnaick e aos amigos que fiz durante esses últimos cinco anos, Matheus Hoffmann, Mike Valente, Amanda Stage, Flávia Sanfins e Deysiane Marques. Obrigada por todos os momentos de descontração e companherismo sempre.

Aos meus colegas de laboratório, que em pouco tempo se tornaram amigos que pretendo levar para a vida inteira, Ricardo Rabello, Alain Coimbra e Maria Clara Vieira, obrigada pelo empenho, ajuda, sorrisos e apoio.

À PUC-Rio e à agência CNPq, pela oportunidade de desenvolver esse trabalho e pela colaboração e incentivo à pesquisa.

## Resumo

### Modelos de ordem reduzida aplicados a uma configuração representativa da combustão

A combustão é um processo que está presente em diversos setores econômicos, pois, 85% da energia consumida no mundo é dele proveniente. Apesar dos benefícios que a combustão proporciona ao homem, também traz a poluição ambiental associada à produção de gases tóxicos e de material particulado. O estudo da combustão e de modelagens computacionais pode auxiliar na redução da emissão destes efluentes. Entretanto, estes modelos ainda tem um alto custo computacional. Modelos de ordem reduzida (ROM) visam diminuir o custo computacional associado à exploração paramétrica de problemas. Por isto, neste trabalho, objetiva-se estudar a criação de um modelo reduzido para uma configuração representativa da chama de difusão estabilizada no queimador do tipo Gülder. Para construir o ROM, utiliza-se os dados obtidos por meio da dinâmica dos fluidos computacional, onde somente um parâmetro é variado. Estudaram-se assim, seis casos isotérmicos usando a dinâmica dos fluidos computacional, visando criar uma base de dados para construir os modelos de ordem reduzida de fração mássica de combustível e da componente axial da velocidade. A comparação entre os resultados obtidos mostram que o modelo de ordem reduzida levou a resultados similares ao do modelo do *Fluent*, mas o custo computacional ordens de grandezas menor.

### Palavras-chave

Chamas laminares não pré-misturadas; queimador Gülder; CFD; *Fluent*; modelos de ordem reduzida.

## Abstract

### Reduced order models applied to a representative configuration of combustion

Combustion is a process which is present in many different economic sectors, since 85% of the energy consumed in the world is generated by this process. Although it brings multiple benefits to mankind, combustion also brings environmental pollution due to the release of toxic gases and soot. The study of combustion and computational modeling can help reduce the emission of pollutant gases, however, it has a substantial computational cost. Reduced order models (ROM) intends to decrease the computational cost associated with parametric exploration of problems. This project aims to construct a reduced model for a representative configuration of a stabilized diffusion flame in the Gülder burner. In order to accomplish this goal, data obtained through the computational fluid dynamics (CFD), where only one parameter changes, is used to construct the ROM. In this project, six isothermal cases were studied using the CFD, aiming to create a database to create the reduced order models of fuel mass fraction and axial velocity. Comparison between the results shows that the reduced order model led to similar results to the Fluent model, but the computational cost orders were smaller.

## Keywords

Laminar non premixed flames; Gülder burner; CFD; *Fluent*; reduced order models.

## Sumário

1	Introdução	<b>8</b>
1.1	Revisão bibliográfica	10
1.2	Objetivos	12
2	Fundamentos teóricos	<b>13</b>
2.1	Chamas laminares não pré-misturadas	13
2.2	Modelos de ordem reduzida	17
3	Metodologia numérica	<b>20</b>
3.1	Dinâmica dos fluidos computacional	20
3.2	Modelo de ordem reduzida	24
4	Resultados e discussão	<b>25</b>
4.1	Estrutura do escoamento isotérmico	25
4.2	Modelo de ordem reduzida	31
4.3	Comparação entre os modelos	37
5	Conclusões e perspectivas	<b>39</b>
5.1	Conclusões	39
5.2	Perspectivas	40

## Lista de figuras

1.1	Chama de difusão etileno/ar obtida experimentalmente no queimador de tipo Gülder do Laboratório de combustão e turbulência da PUC-Rio.	10
1.2	Representação do queimador Gülder (esquerda) e das suas dimensões (direita) [1].	11
2.1	Representação da frente de chama e dos eixos no queimador Gülder.	17
2.2	Procedimento de construção de modelos de ordem reduzida para sistemas estáticos.	18
3.1	Dimensões do domínio desse trabalho.	21
3.2	Fronteiras do domínio e os eixos usados nesse trabalho.	22
4.1	Propriedades que descrevem o escoamento isotérmico de $\text{CH}_4$ para o caso 5: (a) Componente axial da velocidade [m/s]; (b) Componente radial da velocidade [m/s]; (c) Fração mássica de $\text{CH}_4$ .	26
4.2	Componente axial da velocidade [m/s] do escoamento de metano em função do raio [mm] para diferentes alturas ao longo do tubo.	28
4.3	Fração mássica de $\text{CH}_4$ em função do raio [mm] para diferentes alturas ao longo do domínio, onde $z = 60$ mm se encontra na saída do tubo de alimentação de combustível.	30
4.4	Erro dos campos de velocidade depois da aplicação da SVD para diferentes números de modos.	32
4.5	Erro dos campos de fração mássica de $\text{CH}_4$ depois da aplicação da SVD para diferentes números de modos.	33
4.6	Componente axial da velocidade [m/s] obtidas com ROM para o escoamento de metano em função do raio [mm] para diferentes alturas ao longo do tubo, para os casos de validação.	35
4.7	Fração mássica de $\text{CH}_4$ em função do raio [mm] para diferentes alturas ao longo do domínio, obtidas com ROM para os casos de validação.	36
4.8	Campos da componente axial de velocidade obtidos com <i>Fluent</i> (esquerda) e com ROM (direita) , para aos casos de validação.	37
4.9	Campo da fração mássica de $\text{CH}_4$ obtidos com o <i>Fluent</i> (esquerda) e com o ROM (direita) para os casos de validação.	38

## Lista de tabelas

3.1	Propriedades do combustível.	23
4.1	Velocidades média de entrada, número de Reynolds e comprimento da região de desenvolvimento para o combustível ( $\text{CH}_4$ ) de cada um dos seis casos estudados.	26
4.2	Dados dos modelos de ordem reduzida.	34

# 1

## Introdução

A combustão é um processo complexo que envolve transferência de calor e massa, cinética química, termodinâmica e fluidodinâmica. Esse processo envolve uma reação química exotérmica entre um combustível e um comburente que libera energia em forma de calor. Processos de combustão são responsáveis por gerar 85% da energia consumida no mundo, se tornando um ponto estratégico para a economia de vários países. No Brasil, mais de 80% da geração de energia é devido à combustão de derivados de petróleo, gás natural, lenha, carvão vegetal e mineral, e derivados da cana de açúcar [2].

A energia térmica liberada pode ser transformada em energia elétrica ou mecânica, por isso esse processo está presente em diversos setores, desde o setor doméstico até nos principais setores que movem a economia, como o industrial, o de transporte e o de geração de energia. O setor industrial se destaca no uso da combustão de hidrocarbonetos e de gás natural em seus processos de fabricação [3]. No setor de transporte, a queima de derivados de petróleo é usada para o funcionamento de motores, como nos carros, navios e aviões.

Um dos temas de preocupação na área de combustão é a emissão de efluentes oriundos do processo de combustão de combustíveis fósseis, que são prejudiciais à saúde humana e ao meio ambiente [4], como o monóxido de carbono (CO), que é altamente tóxico aos animais e aos seres humanos, e como o material particulado, que é um dos maiores componentes da poluição atmosférica.

O material particulado sólido proveniente do processo de combustão é denominado fuligem, tem formação dependente tanto do combustível fóssil usado quanto das condições em que o processo ocorre [5]. Dentre os poluentes formados durante o processo de combustão, este é um dos mais preocupantes, devido a sua alta produção e aos efeitos nocivos associados à saúde humana [6]. Do ponto de vista mecânico, a presença de fuligem nas turbinas a gás afeta o tempo de vida das pás e, conseqüentemente, o tempo de vida da máquina [7]. Entretanto, em determinadas aplicações, como em equipamentos térmicos industriais, a formação de fuligem é incentivada por aumentar a transferência de calor por radiação térmica [8].

Estudos numéricos veem sendo aplicados na otimização dos processos de combustão como, por exemplo, na diminuição da emissão de efluentes, principalmente da fuligem. O uso da dinâmica dos fluidos computacional



(CFD) permite analisar diversas propriedades da chama, como a temperatura e a fração mássica das espécies químicas, entretanto essas simulações são complexas e demandam um alto custo computacional [9].

O Modelo de ordem reduzida (ROM) é uma técnica visando a representação simplificada, de alta fidelidade, de sistemas complexos e que permite a preservação dos principais comportamentos característicos. Este tipo de modelo vem sendo aplicado em diversos sistemas como, por exemplo, sistemas térmicos, mecânicos e em escoamentos de fluidos [10]. O ROM visa aprender o funcionamento do problema estudado computacionalmente, de forma rápida e com baixo custo computacional associado à explorações paramétricas do sistema [11]. Como o estudo da combustão demanda modelos de alta complexidade, a aplicação de um modelo reduzido para sistemas reativos é a principal motivação que levou ao desenvolvimento deste trabalho.

Este trabalho foi desenvolvido no contexto de uma parceria entre *ANSYS/France* e a PUC-Rio, no âmbito do projeto *Magister* (Machine learning for advanced gas turbine injection systems to enhance combustor performance). O objetivo geral desta parceria é o desenvolvimento de modelos de ordem reduzida para processos de combustão representativos daqueles que podem ser encontrados em motores aeronáuticos.

Neste trabalho serão desenvolvidos modelos de uma configuração representativa de chamas laminares difusivas, configuração esta que não envolve, ainda, reação química. Com os resultados deste projeto, almeja-se criar uma base metodológica para o estudo de chamas turbulentas, que são as mais aplicadas nas condições reais de turbinas e câmara de combustão.

O manuscrito está dividido em três partes. Primeiro é apresentada a revisão bibliográfica para a compreensão do sistema estudado e o objeto de estudo deste trabalho, em seguida as equações necessárias para a solução numérica, o modelo de cinética química usado e o processo de construção do modelo de ordem reduzida. Mais a frente, são descritos o domínio e malha usados nas simulações, e a metodologia usada nos softwares de CFD e do ROM, seguido dos resultados e análise obtidos através da dinâmica dos fluidos computacional e do modelo de ordem reduzida, além da comparação entre estes. Por fim, são apresentadas as conclusões e as perspectivas para trabalhos futuros.

## 1.1

### Revisão bibliográfica

Nessa seção é introduzido o queimador utilizado neste trabalho e os últimos experimentos realizados em laboratório neste queimador.

#### 1.1.1

##### Queimador Gülder

Desenvolvido em 1993 por Ömer L. Gülder, o queimador de Gülder foi criado para estudar a influência da diluição de etileno com um gás inerte na formação de fuligem [12]. Este queimador é muito utilizado para o estudo de chamas não pré-misturadas de diversos combustíveis, tais como mostrada na Fig.1.1. Sua geometria possui um tubo de alimentação de combustível localizado no centro e uma entrada de ar na região anular exterior, permitindo assim que os escoamentos sejam paralelos.

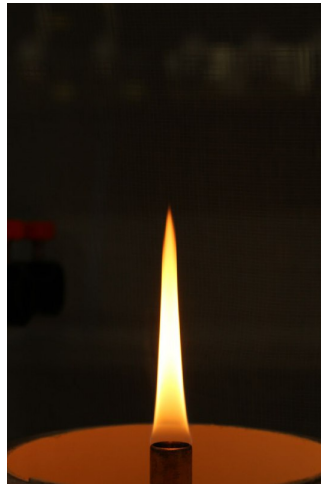


Figura 1.1: Chama de difusão etileno/ar obtida experimentalmente no queimador de tipo Gülder do Laboratório de combustão e turbulência da PUC-Rio.

As dimensões do queimador Gülder disponível no laboratório de combustão e de turbulência da PUC-Rio estão apresentadas na Fig. 1.2. Os tubos de alimentação de combustível e de ar são concêntricos, com diâmetros internos de 11 mm e 100 mm, respectivamente. Além disso, o tubo de transporte de combustível é suficientemente longo (355 mm) para garantir que o escoamento seja desenvolvido ao deixar o queimador. Esse queimador foi inicialmente usado para o estudo de formação de fuligem durante o processo de combustão realizado [1].

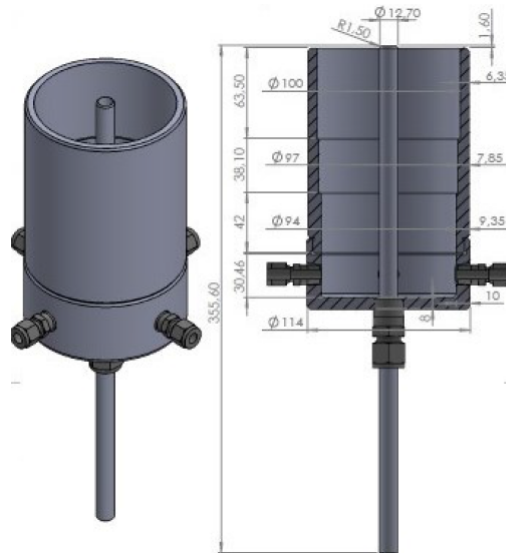


Figura 1.2: Representação do queimador Gülder (esquerda) e das suas dimensões (direita) [1].

A escolha deste objeto de estudo se dá devido a sua simplicidade e a sua representatividade de queimadores industriais, no que diz respeito aos processos de formação e oxidação da fuligem. Além disso, quando comparado a outros, este queimador produz uma fração volumétrica de fuligem alta, da ordem da parte por milhão. No Laboratório de Combustão e turbulência da PUC-Rio foram realizados estudos numéricos e experimentais deste queimador, objetivando a compreensão da formação de fuligem e de hidrocarbonetos aromáticos policíclicos [13][1]. Tal queimador também foi adaptado para realizar experimentos com vazões de ar diversificadas. Nestes estudo foram analisados os campos de temperatura e fração volumétrica da fuligem através das técnicas de pirometria duas cores e de extinção [14].

No âmbito computacional, o software OpenFOAM foi usado previamente para modelar a chama de difusão em escoamentos laminares de metano e ar, com mecanismo de cinética global, obtendo-se os perfis de temperatura e de velocidade axial, além da fração mássica das espécies químicas envolvidas e da taxa de liberação de calor [15]. Com o uso do mesmo software, simulações em paralelo de chamas de metano e etileno foram realizadas, com mecanismo de cinética química detalhada (GRI 3.0). Estas envolveram variadas configurações, como o uso de duas geometrias e diferentes vazões de combustível [16]. Neste modelo foram analisadas diversas substâncias relacionadas ao processo de combustão, como os radicais OH, CH<sub>2</sub> e H<sub>2</sub>, dentre outras propriedades físicas, ilustrando a riqueza da utilização de modelos de cinética química detalhada.

## 1.2

### Objetivos

Neste trabalho se objetiva estudar uma configuração representativa de chamas de difusão em escoamentos laminares de metano e de ar no queimador de Gülder. Este estudo, feito com as ferramentas *ANSYS*: *Fluent*, *Twin Builder* e *Static ROM*, visa desenvolver simulações de CFD e de modelos de ordem reduzida (ROM) para os casos isotérmicos do escoamento de metano no queimador Gülder, com diferentes velocidade de injeção de combustível. Objetiva-se, principalmente, comparar os resultados do modelo de dinâmica dos fluidos computacional com os resultados obtidos por meio do ROM.

Os objetivos específicos deste trabalho são:

1. Desenvolver simulações isotérmicas de escoamentos de metano e de ar;
2. Construir o modelo de ordem reduzida para o caso isotérmico;
3. Comparar os resultados dos modelos CFD e ROM para fins de validação deste último.

## 2

## Fundamentos teóricos

Os fundamentos teóricos que são a base para o desenvolvimento deste trabalho serão apresentados no decorrer deste capítulo. Serão abordados os conteúdos de chamas laminares de difusão e de modelos de ordem reduzida.

### 2.1

#### Chamas laminares não pré-misturadas

Para descrever qualquer processo de combustão, é necessário definir as propriedades características das chamas laminares, como a razão estequiométrica do combustível com o ar, o regime do escoamento e o tipo de combustível (pré-misturado ou não). Neste trabalho será desenvolvido o estudo de chamas não pré-misturadas laminares, também conhecidas como chamas de difusão, onde o transporte de combustível e oxidante se dá principalmente por difusão de calor e de massa. Consequentemente, a taxa de queima da chama é limitada por este processo, e não pela cinética química. Devido à sua estabilidade, esta chama pode ser empregada para diversas aplicações, como nas turbinas de avião, entretanto, a produção de uma grande quantidade de fuligem é uma preocupação, pois essa substância é altamente poluente e degrada as máquinas utilizadas nos processos de combustão [17].

A fim de descrever o processo de combustão em chamas laminares não pré-misturadas e de controlar a emissão de gases poluentes, é necessário fazer a descrição matemática desta chama. Para isso, usam-se as equações governantes do sistema, entre elas a equação de Navier-Stokes. Outras equações auxiliares, como o comprimento da região de entrada do escoamento interno laminar, serão utilizadas para corroborar os resultados numéricos.

#### 2.1.1

##### Equações Governantes

No processo de queima de combustível não ocorre a criação nem a destruição de massa, apenas a transformação das espécies químicas. Ou seja, a lei da conservação de massa é válida [18].

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

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

A equação de conservação de quantidade de movimento, também conhecida como equação de Navier-Stokes, é apresentada como [18]:

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

onde  $p$  é a pressão,  $\vec{g}$  é a aceleração da gravidade e  $\tau$  o tensor de tensões viscosas. Para fluidos incompressíveis, o tensor de tensões é dado por [18]:

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

onde  $\mu$  é a viscosidade cinemática do fluido newtoniano, determinada através da equação de Sutherland [18]:

$$\mu = \frac{bT^{3/2}}{T + S'}, \quad (2-4)$$

onde  $b$  e  $S'$  são constantes e a temperatura é obtida pela equação estado de calor. Para o ar,  $b = 1,458 \cdot 10^{-6} \frac{kg}{msK^{1/2}}$  e  $S' = 110,4K$ .

O balanço de massa de cada uma das  $I$  espécies químicas é descrito como [17]:

$$\frac{\partial(\rho Y_i)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\vec{u}Y_i) = \nabla \cdot (\rho D_{im} \nabla Y_i) + \dot{\omega}_i, \quad i = 1, \dots, I, \quad (2-5)$$

onde,  $Y_i$  é a fração mássica de cada espécie,  $D_{im}$  é a difusividade de massa com respeito ao resto da mistura gasosa e  $\dot{\omega}_i$  é a taxa de produção mássica da espécie  $i$  devido às reações químicas, que é expressa pela lei de Arrhenius.

Para a equação estequiométrica  $aA + bB \rightarrow cC + dD$ , onde  $a, b, c$  e  $d$  são os coeficientes estequiométricos da reação, a taxa de produção dos produtos de combustão é dada por [17]:

$$\omega = k[C]^c[D]^d, \quad (2-6)$$

onde,  $[C]$  e  $[D]$  são as concentrações dos reagentes e  $k$  é uma função da temperatura. A equação de Arrhenius descreve a cinética química da combustão, pois ela permite determinar a variação da constante de velocidade de uma reação com a temperatura, através da equação [17]:

$$k = A_0 e^{\left(\frac{-T_a}{T}\right)}, \quad (2-7)$$

onde  $A_0$  é uma constante pré-exponencial,  $T_a = \frac{E_a}{R_u}$  é a razão entre a energia de ativação e a constante universal dos gases ( $R_u = 1,987 \text{ cal/mol} - K$ ).

Como na chama de difusão a mistura dos gases ocorre pelo processo de difusão, a difusividade de massa da espécie  $i$  é dada por [17]:

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

sendo  $d$  o diâmetro das moléculas,  $M$  a massa molar,  $k_b = 5,67 \cdot 10^{-8} \frac{W}{m^2 K^4}$  é a constante de Boltzmann,  $T_a$  a temperatura e  $\rho$  a densidade.

Por fim, o balanço de energia é definido como [18]:

$$\frac{\partial \rho h}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u} h) = \nabla \cdot (\rho \alpha \nabla h) + \sum_{i=1}^I \{ \nabla \cdot [h_i (\rho D_i - \alpha)] \nabla Y_i \} + \frac{\partial p}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla p, \quad (2-9)$$

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

Na análise do processo de combustão, assume-se que todos os gases se comportam como gases perfeitos [18]:

$$p = \rho R_u T \sum_{i=1}^I \left( \frac{Y_i}{M_i} \right), \quad (2-10)$$

onde  $R_u$  é a constante universal dos gases,  $M_i$  é a massa molar da espécie  $i$ , e  $T$  é a temperatura, obtida pela equação estado de calor [18]:

$$h = \int_{T_{std}}^T C_p dT, \quad (2-11)$$

onde  $T_{std}$  é a temperatura padrão em que a entalpia de formação é definida, que normalmente assume o valor de  $T_{std} = 298,15 K$  e  $C_p$  é o calor específico da mistura à pressão constante, sendo que o calor específico à pressão constante de cada espécie ( $C_{p,i}$ ) é retirado das tabelas JANAF [19].

$$C_p = \sum_{i=1}^I Y_i C_{p,i} . \quad (2-12)$$

### 2.1.2

#### Equações auxiliares

As equações auxiliares descritas abaixo tem o objetivo de complementar os resultados numéricos e corroborar com os resultados experimentais.

A velocidade do escoamento pode ser expressa em função do número de Reynolds. Para o escoamento do tubo de alimentação de combustível, este é definido em função da vazão volumétrica do fluido [18]:

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

$$(2-14)$$

onde,  $\dot{V}_c$  é a vazão volumétrica do combustível ( $\dot{V}_c = v_{z|f,in} A_t$ ),  $v_{z|f,in}$  é a velocidade média de entrada de combustível,  $A_t$  é a área da seção transversal,  $\nu$  é a viscosidade dinâmica do combustível e  $D$  é o diâmetro do tubo. O comprimento mínimo do tubo para que o escoamento seja hidrodinamicamente desenvolvido na saída, é estimado utilizando a relação entre o comprimento da região de entrada ( $L_e$ ), o diâmetro do tubo ( $D$ ) e o número de Reynolds para o caso laminar ( $Re < 2300$ ) [18]:

$$\frac{L_e}{D} \cong 0,06 Re. \quad (2-15)$$

A Fig.2.1 é uma representação da chama de difusão no queimador Gülder, e nela estão indicados a altura da chama e os eixos coordenados. A altura da chama pode ser obtida pela equação semi-empírica [17]:

$$L_f = \frac{\dot{V}_c \left( \frac{T_\infty}{T_f} \right)}{4\pi D_\infty \ln(1 + 1/S)} \left( \frac{T_\infty}{T_p} \right)^{0,67}, \quad (2-16)$$

onde  $T_p$  é a temperatura média da chama,  $\dot{V}_c$  a vazão volumétrica do combustível,  $D_\infty$  o coeficiente de difusão médio, e  $S$  a razão estequiométrica ar/combustível. Para o combustível genérico  $C_\alpha H_\beta O_\gamma$  queimando com ar tem-se [17]:



$$S = 4,76 \left( \alpha + \frac{\beta}{4} - \frac{\gamma}{2} \right). \quad (2-17)$$

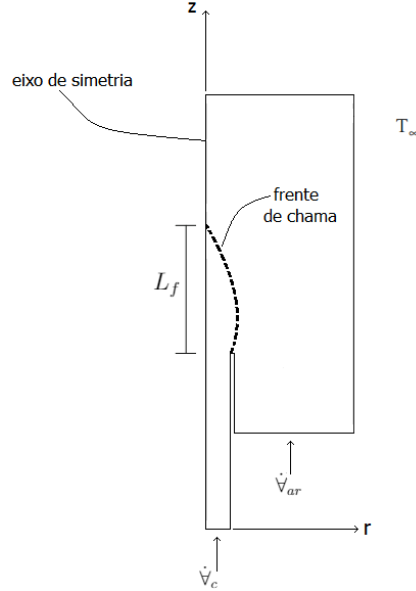


Figura 2.1: Representação da frente de chama e dos eixos no queimador Glder.

## 2.2

### Modelos de ordem reduzida

Um modelo de ordem reduzida (ROM) consiste na modelagem simplificada de um sistema esttico ou dinmico de alta complexidade, preservando o comportamento e os fenmenos dominantes do sistema [11]. Sendo assim, ele visa reduzir o custo computacional e a memria associada a explorao paramtrica destes sistemas. Vale ressaltar que, para cada propriedade analisada, se cria um modelo de ordem reduzida, ou seja, para analisar a temperatura, se desenvolve o ROM de temperatura.

Neste projeto ser desenvolvido um modelo reduzido esttico utilizando a ferramenta *Static ROM*, do *Twin Builder*. Tal ferramenta desenvolvida ainda na ltima dcada pela empresa *ANSYS*, consiste em quatro etapas, como apresentado na Fig.2.2.

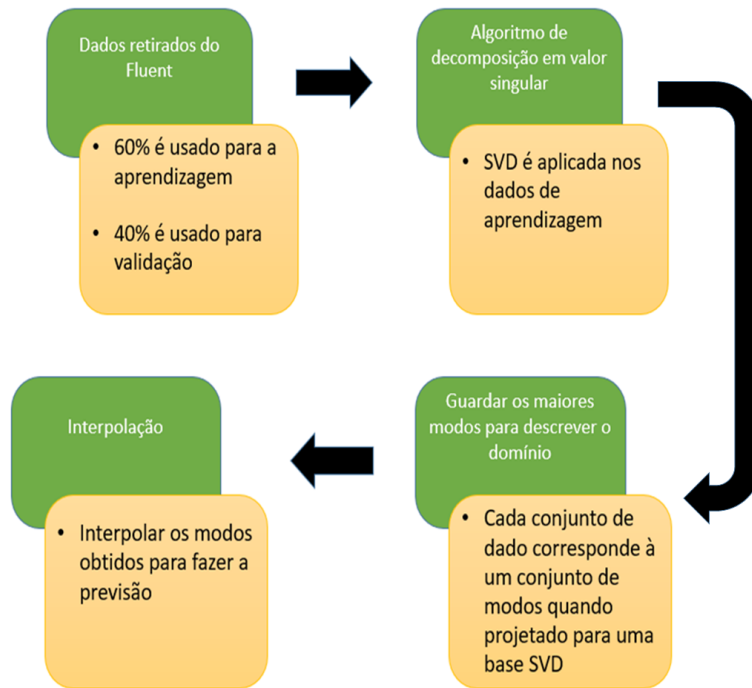


Figura 2.2: Procedimento de construção de modelos de ordem reduzida para sistemas estáticos.

O primeiro passo consiste na obtenção de dados representativos do sistema, dos quais 60% são utilizados para aprendizagem do modelo e os outros 40% para sua validação. A escolha dos dados de aprendizagem deve incluir os pontos extremos do parâmetro variável, garantindo assim que não seja feita uma extrapolação na previsão dos pontos de validação. Para a escolha dos outros pontos de aprendizagem deve-se utilizar pontos distribuídos no conjunto de dados.

No segundo passo, o ROM estático utiliza a decomposição em valores singulares (SVD) para decompor e obter os modos do sistema. A SVD organiza os modos de forma decrescente, sendo os primeiros os que carregam as informações mais importantes [20]. Já no passo 3, o sistema decomposto é filtrado, mantendo apenas as suas características principais, ou seja, os modos de maior valor. Esse procedimento é feito com a intenção de criar uma base reduzida dos dados que consiga descrever todo o sistema.

Por fim, é feita uma interpolação do tipo GARS (Genetic Aggregation Response Surface), com os modos de maior valor, para criar o modelo [21]. Esta interpolação é a responsável pela aprendizagem do ROM, onde se descreve um modelo de previsão para o comportamento do sistema para um valor arbitrário do parâmetro variável. Após a criação do modelo, a previsão dos pontos de validação é feita, obtendo assim um perfil do sistema a partir do ROM.

### 2.2.1

#### Decomposição em valores singulares

A decomposição em valores singulares, comumente conhecida como SVD, é a fatoração de uma matriz real ou complexa, que pode ser aplicada em diversas áreas. Uma das principais aplicações é a simplificação de matrizes representativas de sistemas reais, como processamento de sinais e estatística, permitindo a análise e compreensão de sistemas complexos. A SVD permite afirmar que toda matriz  $A$  pode ser diagonalizada, sendo fatorada como [22]:

$$A_{m \times n} = U \Sigma V^T \quad (2-18)$$

onde,  $U_{m \times m}$  e  $V_{n \times n}^T$  são matrizes unitárias, com autovetores ortonormais calculada a partir das respectivas matrizes,  $AA^T$  e  $A^T A$ ;  $\Sigma_{m \times n}$  é uma matriz diagonal com  $r$  igual a raiz quadrada dos autovalores não nulos das matrizes  $AA^T$  ou  $A^T A$ , onde esses  $r$  elementos são os valores singulares da matriz  $A$ .

A SVD parte da ideia de que a imagem da esfera unitária sob a transformação provocada por qualquer matriz é uma hiper-elipse. Aplicando a matriz  $A$  a um vetor  $x$ , pode ser visualizado como uma rotação ( $V^T$ ), um esticamento ( $\Sigma$ ) e por fim outra rotação ( $U$ ). Ou seja, os vetores singulares a esquerda ( $u_i$ ) e a direita ( $v_i$ ) de  $A$  tem unidade de comprimento, e o valor singular ( $\sigma_i$ ) é um escalar, sendo assim, é o fator que determina a importância de cada termo. Os valores singulares da SVD, quando ordenados de forma decrescente, permite a análise das principais características do sistema estudado, representada pelos valores singulares de maior módulo. Dessa forma, valores singulares com módulos muito pequenos, podem ser ignorados, possibilitando a representação simplificada do sistema estudado pelos valores singulares de maior módulo.

### 3

## Metodologia numérica

Neste capítulo são apresentadas as características necessárias para modelar computacionalmente o processo de combustão no queimador de Gülder e criar modelos de ordem reduzida estáticos, utilizando as seguintes ferramentas *ANSYS*:

1. *SpaceClaim*, para construir o domínio;
2. *Meshing* de *Workbench*, para criar a malha;
3. *Fluent*, para analisar o escoamento;
4. *Static ROM* do *Twin Builder*, para construir o ROM.

A escolha destas ferramentas se deve à parceria com a *ANSYS/France* no âmbito do projeto Magister.

### 3.1

#### Dinâmica dos fluidos computacional

A dinâmica dos fluidos computacional (CFD) é a análise de sistemas envolvendo escoamentos de fluidos, transferência de calor e fenômenos associados (tais como reações químicas), utilizando simulações computacionais [23]. Estas simulações dependem da configuração geométrica, das propriedades do fluido e das condições de contorno e iniciais, que serão detalhadas ao longo dessa seção.

O software utilizado é o *Fluent* R1, que aplica o método de volumes finitos para calcular as equações de conservação de massa, energia e quantidade de movimento linear já apresentadas no capítulo 2.

Nas simulações da dinâmica dos fluidos computacional, foi usado as configurações *default* para os controles da solução, e foi usado o esquema PISO para discretização e SIMPLE para o acoplamento velocidade-pressão.

### 3.1.1

#### Domínio e blocos computacionais

Para representar o queimador é usada uma configuração geométrica bidimensional, o que é possível devido à simetria axial observada no queimador. Esta configuração, dividida em 2 blocos separa a região da chama, de maior interesse na modelagem, visando reduzir o custo computacional.

O domínio utilizado é apresentado na Fig. 3.1, sendo suas medidas iguais às do queimador de Gülder disponível no Laboratório de Combustão da PUC-Rio. As dimensões radiais da entrada de comburente e de oxidante respectivamente são de 5,5 mm e 43,5 mm. O comprimento do tubo de alimentação de combustível é de 60 mm e a entrada de ar tem um comprimento de 50 mm. A região que começa a partir das entradas no domínio dos fluidos reagentes até a saída de gases queimados tem um comprimento de 100 mm, com um raio de 50 mm.

A zona de mistura dos gases, onde ocorre o processo de combustão, pertence ao bloco interno, juntamente com o tubo de entrada de combustível. As medidas dessa zona são estimadas devido ao processo de difusão de massa, onde a chama está localizada, e têm uma distância radial de 27 mm e uma altura de 47,5 mm. O bloco externo, corresponde ao resto do domínio, onde se tem somente escoamentos de ar e gases queimados.

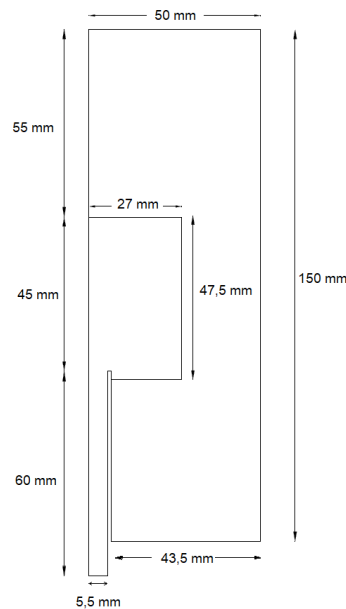


Figura 3.1: Dimensões do domínio desse trabalho.

### 3.1.2

#### Malha computacional

O domínio computacional desse trabalho usa somente dois blocos, cada qual com seu respectivo refinamento, permitindo assim reduzir o custo computacional final, e concentrando, assim, o custo do cálculo na região de interesse, a região reativa, que é o bloco interno.

O bloco interno, que engloba o tubo de alimentação de combustível e a região de mistura tem uma malha mais refinada. A dimensão característica desta é de 0,1 mm, escolhida devido à influência da camada limite no escoamento de combustível e da zona de reação. O bloco externo, por sua vez, é onde há apenas escoamento de ar ou de produtos da combustão; por isso a malha nessa região tem dimensão característica de 1 mm, sendo dez vezes maior do que a da região interna.

### 3.1.3

#### Condições de contorno e iniciais

Na Fig.3.2, todas as fronteiras do domínio são representadas. As entradas dos gases na parte inferior do domínio e estão coloridas em azul, a saída dos gases queimados está na parte superior e é colorida em vermelho. O eixo de simetria é na cor laranja e se localiza na lateral esquerda do domínio. Já as paredes são pretas e ao todo são quatro, três são denominadas parede do queimador e tem as mesmas propriedades e a outra é chamada de tubo de ar. Trata-se de uma fronteira numérica que apenas representa o fim do domínio computacional.

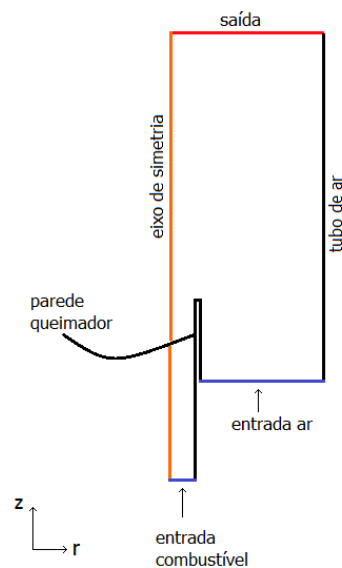


Figura 3.2: Fronteiras do domínio e os eixos usados nesse trabalho.

Para todos os casos discutidos neste trabalho, tem-se que as condições de contorno utilizadas são:

- a entrada de ar possui uma composição de 21,08% de oxigênio e 78,92% de nitrogênio;
- a entrada de combustível possui uma composição de 100% de metano;
- as paredes do queimador são não deslizantes;
- a fronteira lateral - nomeada de tubo de ar - tem tensão cisalhante nula, pois não há interferência entre ela e a chama;
- a saída do domínio, tem condição de contorno de *pressure outlet*;
- as paredes do queimador e o confinamento são adiabáticas e não catalíticas.

A tabela 3.1 apresenta as propriedades do combustível usado nas simulações e, também, para o cálculo do número de Reynolds e do comprimento da região de entrada no tubo de injeção de combustível.

Tabela 3.1: Propriedades do combustível.

Dados	CH <sub>4</sub>
$\mu$ [kg/m-s]	$1,087 \cdot 10^{-5}$
$\rho$ [kg/m <sup>3</sup> ]	0,6679
$\nu$ [m <sup>2</sup> /s]	$1,627 \cdot 10^{-5}$
$D$ [mm]	11

As condições iniciais são:

- As entradas de gás possuem um escoamento uniforme, com as velocidades  $v_{z|f,in}$  variável e  $v_{z|a,in} = 0,002$  m/s;
- temperatura de ar e combustível iniciais iguais a 300 K, e pressão de 1 atm.

### 3.2

#### Modelo de ordem reduzida

Neste trabalho o modelo de ordem reduzida é construído utilizando de dados obtidos através das simulações CFD como, por exemplo, o perfil de propriedades modeladas. Em seguida, a seleção dos dados de aprendizagem é feita, e esta deve incluir os valores mínimo e máximo do intervalo que a variável paramétrica está contida, depois, o cálculo da SVD é feito na matriz que representa o campo da propriedade modelada. A escolha da quantidade de modos usados para a construção do modelo é feita através da análise dos erros, relativo e máximo absoluto, dos resultados após a aplicação do algoritmo de decomposição em valores singulares.

Neste caso, o ROM é construído a partir de dados recolhidos de simulações feitas no *Fluent* para o caso isotérmico representativo de uma chama laminar não pré -misturada, onde somente a velocidade de injeção de combustível é variada. Os dados aqui utilizados para a aprendizagem e validação do ROM consistem nos campos de duas propriedades: o campo de velocidade e fração mássica da espécie química do combustível.

É importante ressaltar que o estudo do escoamento isotérmico é uma etapa necessária para construção de modelos de ordem reduzida para chamas.



## 4

### Resultados e discussão

No decorrer deste capítulo serão apresentados os resultados e análises do caso isotérmico representativo de uma chama de difusão estabilizada no queimador Gülder. Serão apresentados os resultados obtidos no *Fluent*, que serão usados para construir o modelo estático de ordem reduzida, e os resultados obtidos através do *Startic ROM* do *Twin Bluider*. O intuito deste capítulo é permitir a análise comparativa entre os resultados obtidos no modelo de ordem reduzida e na dinâmica dos fluidos computacional (CFD). Todos os gráficos apresentados neste capítulo foram obtidos utilizando o MatLab, Excel ou *Fluent*.

Vale ressaltar que todas as análises feitas neste trabalho se referem ao momento final da simulação, onde todas as simulações se encontram em regime permanente, com resíduos menores que  $10^{-6}$ .

#### 4.1

##### Estrutura do escoamento isotérmico

O caso isotérmico é estudado para verificar inicialmente, o estabelecimento da condição de escoamento laminar desenvolvido na saída do tubo de alimentação e, em seguida, permitir a compreensão da difusão de  $\text{CH}_4$  ao longo do domínio. Para isto, serão analisados ao longo desta seção os resultados isotérmicos dos perfis de velocidade e de fração mássica do combustível (metano), obtidos com o *Fluent* versão *R1*.

No total, seis casos são modelados através da dinâmica dos fluidos computacional, variando-se somente um parâmetro, com a intenção de produzir dados para construir um ROM. O parâmetro variável escolhido foi a velocidade média de injeção do combustível, pois possibilita atingir diferentes regimes de escoamento, seja laminar ou até mesmo turbulento (que não foi o objetivo do estudo). A tabela 4.1, apresenta as velocidades de escoamento do combustível ( $v_{z|f,in}$ ) escolhidas, o número de Reynolds do combustível ( $Re_f$ ) e o comprimento da região de entrada teórico ( $L_e$ ), calculados com as respectivas Eqs (2-13) e (2-15), usando as propriedades do combustível reportadas na tabela 3.1. É válido ressaltar que as velocidades aqui utilizadas foram escolhidas com base em experimentos desenvolvidos no Laboratório de Combustão da PUC-Rio [14].

Tabela 4.1: Velocidades média de entrada, número de Reynolds e comprimento da região de desenvolvimento para o combustível ( $\text{CH}_4$ ) de cada um dos seis casos estudados.

Caso	$v_{z f,in}$ [m/s]	$Re_f$	$L_e$ [mm]
0	0,0175	11,82	7,8
1	0,0211	14,26	9,4
2	0,0264	17,84	11,77
3	0,0317	21,43	14,14
4	0,0370	25	16,5
5	0,0438	29,6	19,5

Para descrever o escoamento isotérmico, serão utilizados os gráficos das componentes axial e radial da velocidade e de distribuição de combustível. A Fig.4.1 mostra os contornos das componentes axial e radial da velocidade e a fração mássica de metano, obtidos no *Fluent*, para uma velocidade de entrada de metano de  $v_{z|f,in} = 0,0438$  m/s (caso 5).

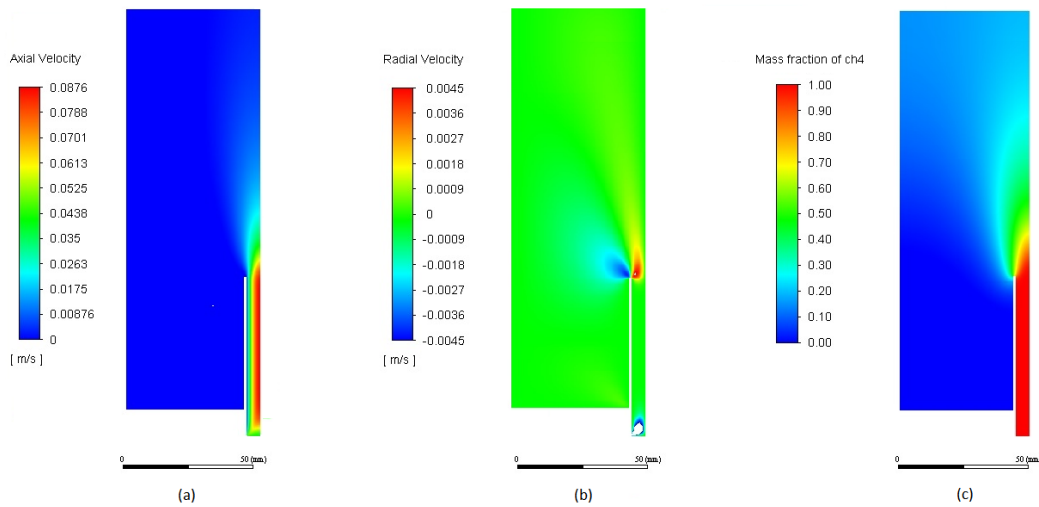


Figura 4.1: Propriedades que descrevem o escoamento isotérmico de  $\text{CH}_4$  para o caso 5: (a) Componente axial da velocidade [m/s]; (b) Componente radial da velocidade [m/s]; (c) Fração mássica de  $\text{CH}_4$ .

O campo da componente axial da velocidade, apresentado na Fig.4.1(a), mostra a formação da camada limite do escoamento de metano dentro do tubo. Isso é identificado na região de desenvolvimento, o núcleo do escoamento de metano é acelerado, enquanto, o fluido próximo a parede é retardado pela ação das forças viscosas, tornando a velocidade do fluido na parede nula. Quando o escoamento se torna hidrodinamicamente desenvolvido, o perfil de velocidade deixa de variar ao longo da direção axial do tubo. Ao sair do tubo de injeção de combustível, a velocidade começa a diminuir, tendendo a se tornar uniforme, pois há uma região de aumento da seção transversal do domínio, onde o combustível se mistura com o ar.

Já no campo da componente radial da velocidade, Fig.4.1(b), grande parte do domínio possui a componente radial da velocidade nula, entretanto, nota-se duas regiões onde tal componente difere de zero; no início do tubo de entrada de metano, onde a velocidade radial é negativa na vizinhança da parede do tubo, o que significa que o fluido se afasta da parede, e na saída do tubo de injeção, onde a região interna a componente radial é negativa, enquanto na região externa é positiva, propiciando a mistura de combustível e de ar.

Este efeito de mistura pode ser explicado a partir da equação diferencial da continuidade, levando em conta as hipóteses de regime estacionário, 2D e fluido incompressível. Quando o escoamento se torna hidrodinamicamente desenvolvido na direção do escoamento ( $z$ ), a velocidade deixa de variar nessa direção ( $\frac{\partial()}{\partial z} = 0$ ), ou seja, a velocidade na direção radial passa a ser constante. Como na parede a velocidade é nula, a componente radial da velocidade é nula a partir do momento que o escoamento se torna totalmente desenvolvido.

Na Fig.4.1(c), que apresenta a fração mássica de  $\text{CH}_4$ , é possível observar que a concentração de metano é maior dentro do tubo de alimentação. Ao sair do tubo, nota-se que a concentração de combustível diminui ao longo da direção  $z$ . Assim, ao se afastar do eixo de simetria, na saída do tubo de alimentação, o fluido inflamável começa a se misturar com o ar tendendo se tornar uma mistura homogênea. Isso acontece devido aos mecanismos de transporte de massa por advecção e por difusão.

Com o objetivo de verificar se o comprimento do tubo de entrada de combustível satisfaz a condição de escoamento laminar hidrodinamicamente desenvolvido, foram traçados os gráficos de velocidade, para cada um dos casos apresentados na tabela 4.1. A Fig.4.2 mostra a velocidade do escoamento para diversas alturas ao longo do tubo, onde  $z = 0$  mm representa a entrada de combustível no domínio computacional.

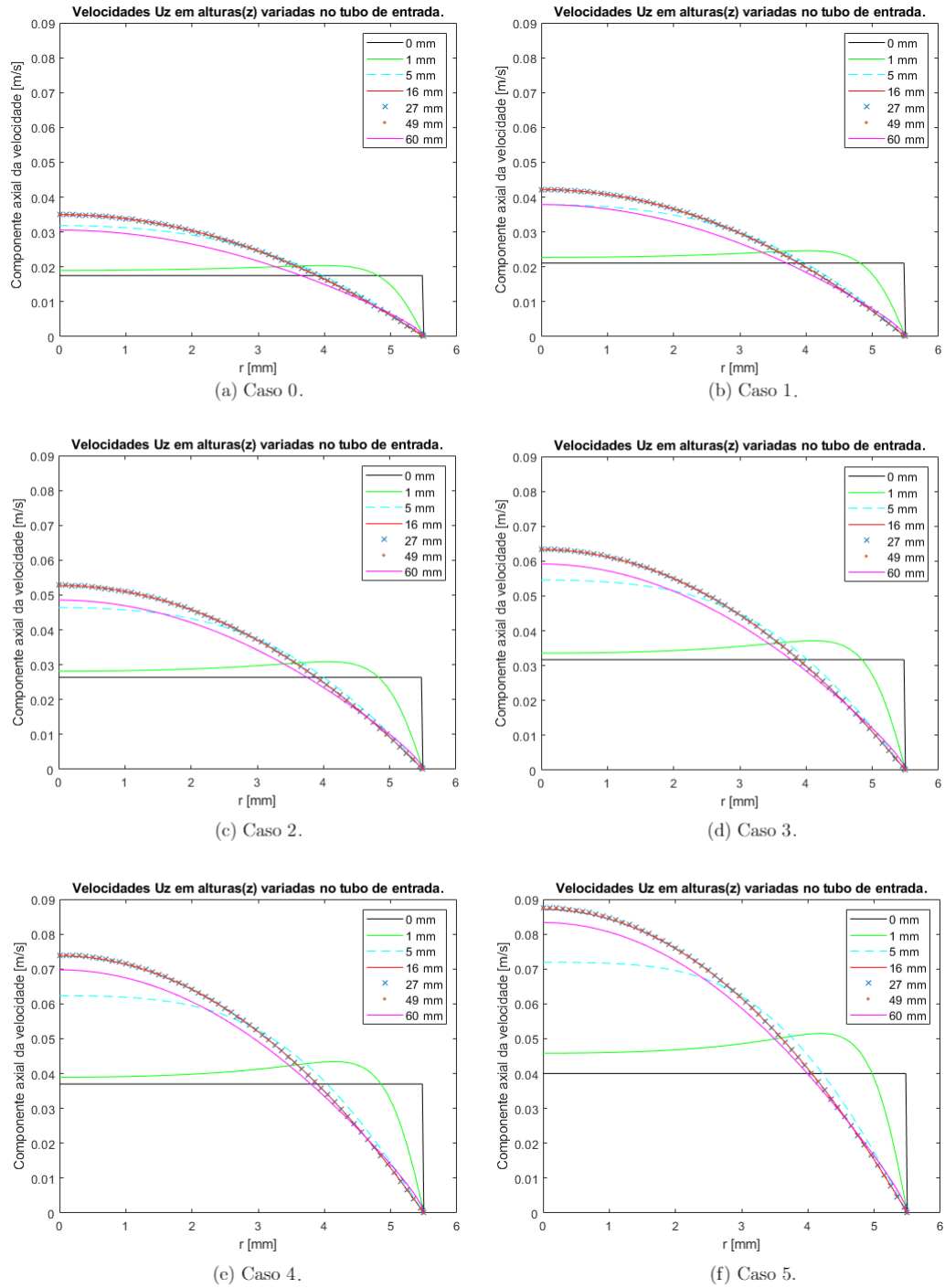
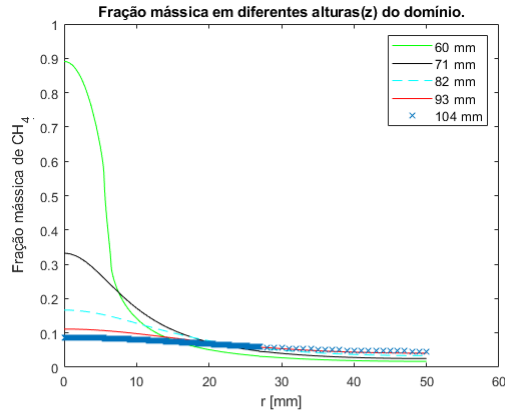


Figura 4.2: Componente axial da velocidade [m/s] do escoamento de metano em função do raio [mm] para diferentes alturas ao longo do tubo.

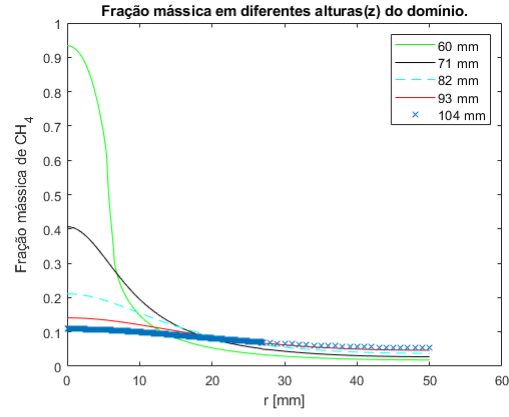
Analisando a Fig.4.2, nota-se uma semelhança em todos os casos em relação ao perfil de velocidade e ao desenvolvimento da camada limite. Na parte interna do espaço anular, região entre  $r = 0$  mm até  $r = 5.5$  mm, percebe-se que o módulo da velocidade varia com as diferentes velocidades de entrada de combustível. Além disso, no início do tubo têm-se uma grande influência da camada limite, que pode ser percebida pois o perfil de velocidade deixa de ser uniforme em  $z = 0$  mm e passa a tomar uma forma parabólica de  $z = 1$  mm à  $z = 4$  mm, o que caracteriza a região de entrada de um escoamento interno.

Percebe-se também que para todos os casos, nas alturas  $z = 16$  mm,  $z = 27$  mm e  $z = 49$  mm, o escoamento no tubo encontra-se totalmente desenvolvido, visto que o perfil axial da velocidade passa a não variar ao longo do tubo, assumindo um perfil parabólico com valor máximo em  $r = 0$  mm. Os perfis parabólicos ao longo do tubo de injeção de combustível garantem que a condição de contorno na entrada não influencia no resultado obtido. Entretanto, em  $z = 60$  mm nota-se uma diminuição da velocidade no perfil parabólico, variação que acontece devido aos efeitos da difusão, causado pois o escoamento de metano possui números de Reynolds entre 11,82 e 29,60.

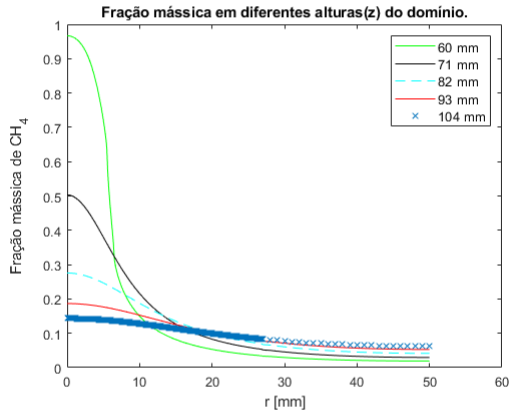
A fim de caracterizar a difusão de metano e onde ocorre a mistura dos gases, foi traçado, também, o gráfico da fração mássica de metano como função do raio. A Fig.4.3 mostra a fração mássica de  $\text{CH}_4$  para diversas alturas ao longo do domínio, a partir da saída do tubo de injeção de metano, onde  $z = 60$  mm.



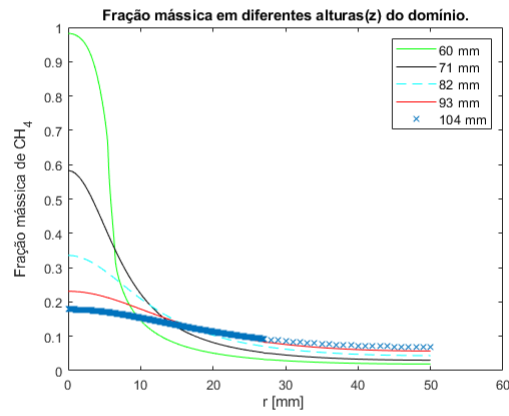
(a) Caso 0.



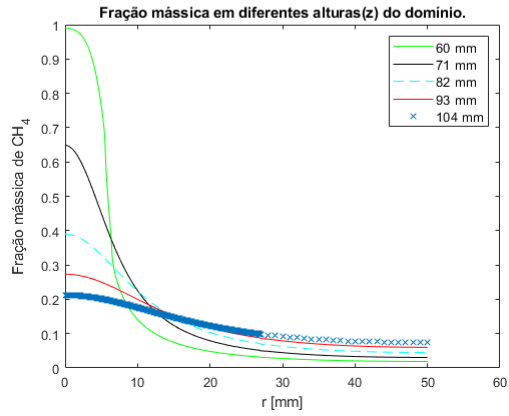
(b) Caso 1.



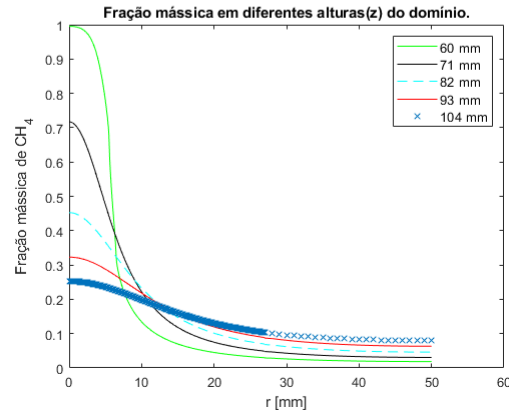
(c) Caso 2.



(d) Caso 3.



(e) Caso 4.



(f) Caso 5.

Figura 4.3: Fração mássica de  $\text{CH}_4$  em função do raio [mm] para diferentes alturas ao longo do domínio, onde  $z = 60$  mm se encontra na saída do tubo de alimentação de combustível.

Na análise da Fig.4.3 percebe-se que todos os seis casos analisados tem comportamento similar. Na saída do tubo de alimentação de combustível, em  $z = 60$  mm, encontra-se uma maior quantidade de metano próximo ao eixo de simetria ( $r = 0$  mm) e, ao se afastar na direção radial, a fração mássica de metano diminui. Tal comportamento se repete em todas as alturas analisadas ao longo do domínio. Percebe-se, também, que ao longo do eixo  $z$ , a quantidade máxima de metano diminui à medida que se afasta da saída do tubo ( $z = 60$  mm), já que o combustível está se misturando com o ar, diminuindo assim sua concentração. Nos casos com maior velocidade de injeção de metano, a concentração de metano é maior em alturas mais elevadas quando comparado com os casos de baixa velocidade, por exemplo, na Fig.4.3(a),  $v_{z|f,in} = 0,0175$  m/s, a fração mássica de  $\text{CH}_4$  para  $z = 104$  mm é cerca de 0.15, já na Fig.4.3(f),  $v_{z|f,in} = 0,0438$  m/s, para a mesma altura, a fração mássica de  $\text{CH}_4$  é aproximadamente 0.4. É válido ressaltar que o transporte de  $\text{CH}_4$  no domínio se deve aos fenômenos de transporte de massa, por difusão e advecção.

## 4.2

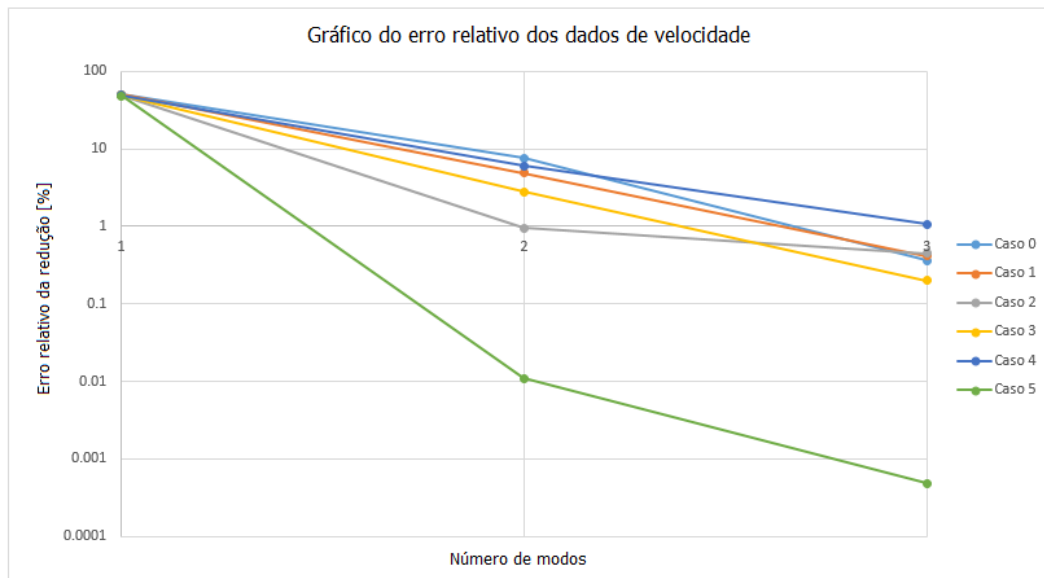
### Modelo de ordem reduzida

Nessa seção serão analisados, primeiro, como o *setup* do ROM interfere nos resultados. Este é o caso, por exemplo, da escolha do número de modos para cada modelo de ordem reduzida. Em seguida, serão apresentados os resultados do ROM para a componente axial da velocidade e a fração mássica de  $\text{CH}_4$ , obtidos com o *Static ROM*. Neste estudo, quatro casos de aprendizagem são utilizados para a criação dos modelos de ordem reduzida, e estes são os caso 0; caso 2; caso 3 e caso 5, apresentados na tabela 4.1.

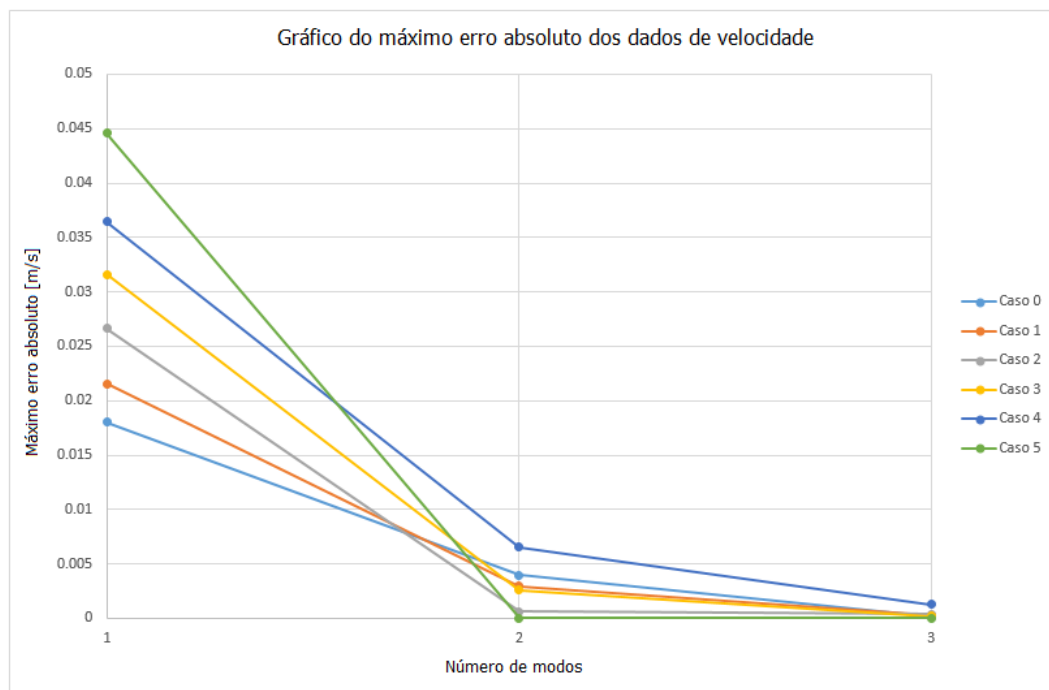
#### 4.2.1

##### Análise de erro dos modelos de ordem reduzida

A fim de verificar a influência da variação do número de modos na precisão dos modelos, foram traçado dois gráficos; um para o erro relativo do ROM e outro para o máximo erro absoluto da redução para cada dado. As Figs. 4.4 e 4.5 mostram a influência da variação dos modos nos modelos construídos para o ROM de velocidade e de fração mássica de  $\text{CH}_4$ .



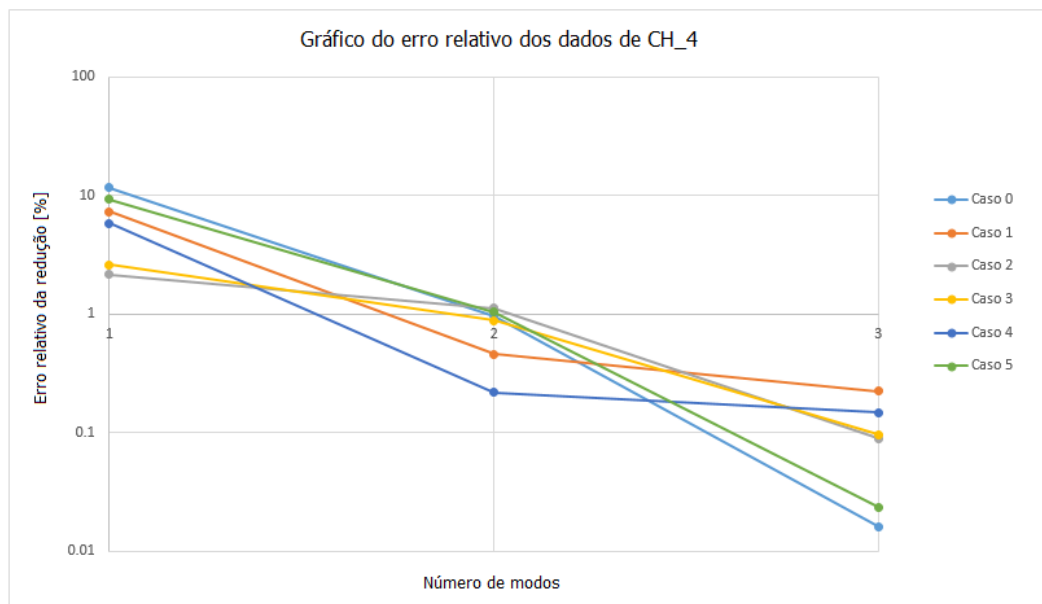
4.4(a): Erro relativo de redução.



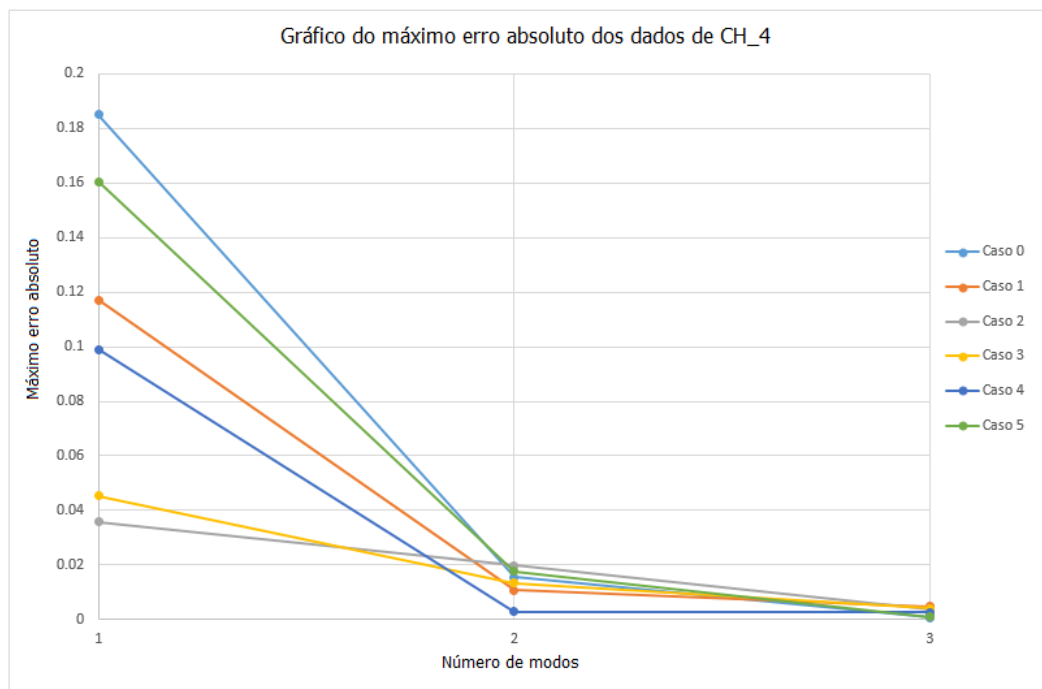
4.4(b): Máximo erro absoluto.

Figura 4.4: Erro dos campos de velocidade depois da aplicação da SVD para diferentes números de modos.





4.5(a): Erro relativo de redução.



4.5(b): Máximo erro absoluto.

Figura 4.5: Erro dos campos de fração mássica de CH<sub>4</sub> depois da aplicação da SVD para diferentes números de modos.

Na Fig.4.4(a), percebe-se que, com apenas um modo, o erro de todos os casos é alto, próximo a 100%. Entretanto, esse erro decai significativamente com o número de modos, por exemplo, com 3 modos tem-se em torno de 1% para a maioria dos casos, exceto o caso 5 que tem erro de 0,001%. Já o gráfico da Fig.4.4(b), mostra o máximo erro absoluto calculado pela comparação dos dados obtidos através das simulações CFD e os obtidos com o ROM. O comportamento é similar ao da Fig.4.4(a), isto é, com um modo, o máximo erro absoluto é bastante elevado, estando para todos os casos acima de 0,015 m/s. Com o aumento do número de modos, o erro diminui em todos os casos, chegando a ser próximo de zero com três modos.

No gráfico do erro relativo de redução do modelo de  $\text{CH}_4$ , Fig.4.5(a), percebe-se, que com apenas um modo, o erro dos casos extremos (casos 0 e 5) são os que possuem maior módulo, seguidos pelos casos de validação (casos 1 e 4), em torno de 10%, decaindo com o número de modos potências de dez. Na Fig.4.5(b), o máximo erro absoluto exhibe o mesmo comportamento da Fig.4.5(a), ou seja, com um modo, o máximo erro absoluto é bastante elevado, estando acima de 0,02 para todos os casos. Com o aumento do número de modos, o erro diminui, chegando a aproximadamente zero quando três modos são usados.

A tabela 4.2 mostra uma síntese dos modelos construídos neste trabalho, como a quantidade de modos usados e o máximo erro absoluto de cada ROM.

Tabela 4.2: Dados dos modelos de ordem reduzida.

<b>Informações do ROM.</b>	<b><math>\text{CH}_4</math></b>	<b>Velocidade</b>
dados de aprendizagem	4	4
número de modos	3	3
máximo erro absoluto	0,00909402	0,0356827 m/s

## 4.2.2

## Componente axial da velocidade

Para garantir que os resultados do modelo de ordem reduzida reproduza o escoamento hidrodinamicamente desenvolvido dentro do tubo, é analisada a velocidade do escoamento em função do raio para os dois casos de validação. A Fig.4.8 mostra o perfil da componente axial da velocidade obtidos pelo ROM, em diversas alturas ao longo do tubo, para as velocidades de entrada de combustível de  $v_{z|f,in} = 0,02$  m/s e  $v_{z|f,in} = 0,04$  m/s.

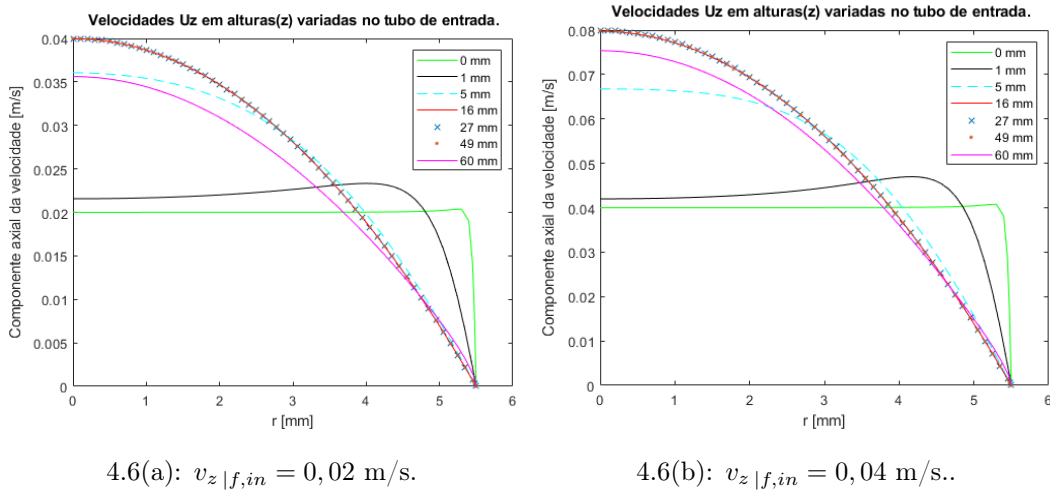


Figura 4.6: Componente axial da velocidade [m/s] obtidas com ROM para o escoamento de metano em função do raio [mm] para diferentes alturas ao longo do tubo, para os casos de validação.

Ao analisar as Figs.4.6 (a) e (b), percebe-se que um comportamento semelhante ao perfil da componente axial da velocidade obtidos com o *Fluent* para os casos 2 e 4, mostrados na Fig.4.2 (c) e (e). Em ambos os casos, o fluido entra no duto com escoamento uniforme, em  $z = 0$  mm, e a componente  $z$  da velocidade começa a tomar forma parabólica entre  $z = 1$  mm e  $z = 5$  mm, caracterizando a região de entrada do escoamento interno, onde o perfil de velocidade varia devido a influência da camada limite.

Nas alturas  $z = 16$  mm,  $z = 27$  mm e  $z = 49$  mm, o perfil de velocidade deixa de variar, atingindo sua velocidade máxima em  $r = 0$  mm, caracterizando assim o escoamento totalmente desenvolvido. Nota-se também que em  $z = 60$  mm, a velocidade diminui. Percebe-se, também, que na Fig.4.6(a), em  $z = 5$  mm o escoamento se encontra mais próximo da sua região de escoamento desenvolvido do que na Fig.4.6(b), o que é explicado pela Eq.(2-15), isto é, o comprimento de entrada varia com o número de Reynolds.

## 4.2.3

Fração mássica de  $CH_4$ 

Para analisar a região de mistura dos gases e os fenômenos de transporte de massa, difusão e advecção, de combustível nos resultados obtidos com o ROM, foi traçada na Fig.4.7, a fração mássica de combustível como função do raio para os casos de validação, em diversas alturas ao longo do domínio, a partir da saída do tubo de injeção de metano, onde  $z = 60$  mm.

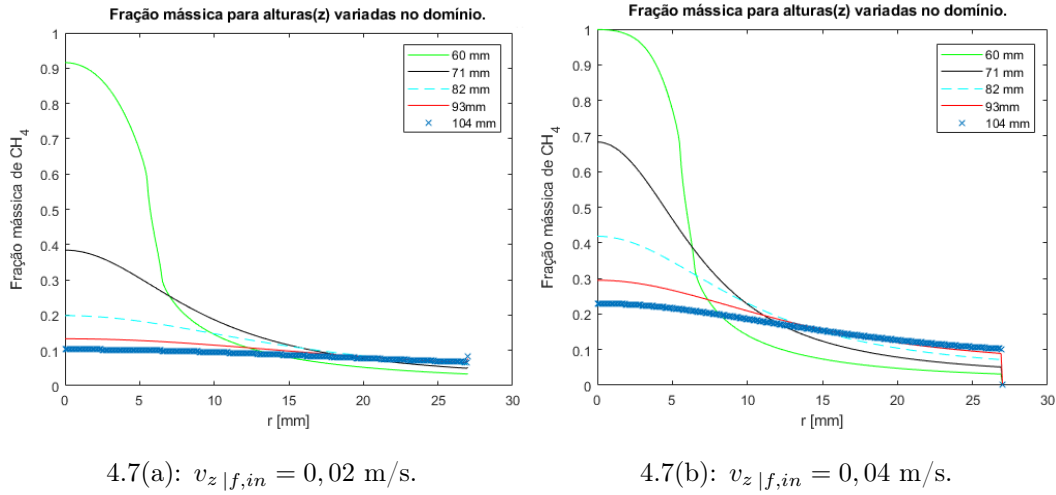


Figura 4.7: Fração mássica de  $CH_4$  em função do raio [mm] para diferentes alturas ao longo do domínio, obtidas com ROM para os casos de validação.

Na Fig.4.7, percebe-se que os dois casos analisados tem comportamento similar. Em todas as alturas analisadas, nota-se uma quantidade maior de  $CH_4$  próximo ao eixo de simetria ( $r = 0$  mm) e ao se afastar na direção radial, a fração mássica de metano diminui. Nota-se, também, que a quantidade de metano é maior próxima a saída do tubo de injeção de combustível ( $z = 60$  mm), e que diminui a medida que se afasta da saída do tubo.

Percebe-se duas diferenças nos casos da Fig.4.7, a primeira é que somente na Fig.4.7(b) a fração mássica de  $CH_4$  alcança 1 em  $z = 60$  mm. A segunda é que no caso da velocidade de entrada de  $v_{z|f,in} = 0,04$  m/s, Fig.4.7(b) se tem uma maior concentração de  $CH_4$  quando comparado ao caso da Fig.4.7(a).

## 4.3

## Comparação entre os modelos

A fim de comparar qualitativamente os resultados obtidos através das simulações em CFD e dos modelos de ordem reduzida, serão apresentados os perfis da componente axial de velocidade e da fração mássica de  $\text{CH}_4$ , obtidos com o *Fluent* e o ROM para os casos de validação. Para melhor visualização dos resultados, somente o bloco interno do domínio é mostrado em todos os campos. As Figs.4.8 e 4.9 mostram, respectivamente, os perfis da componente axial da velocidade e fração mássica de combustível para as duas velocidades de validação.

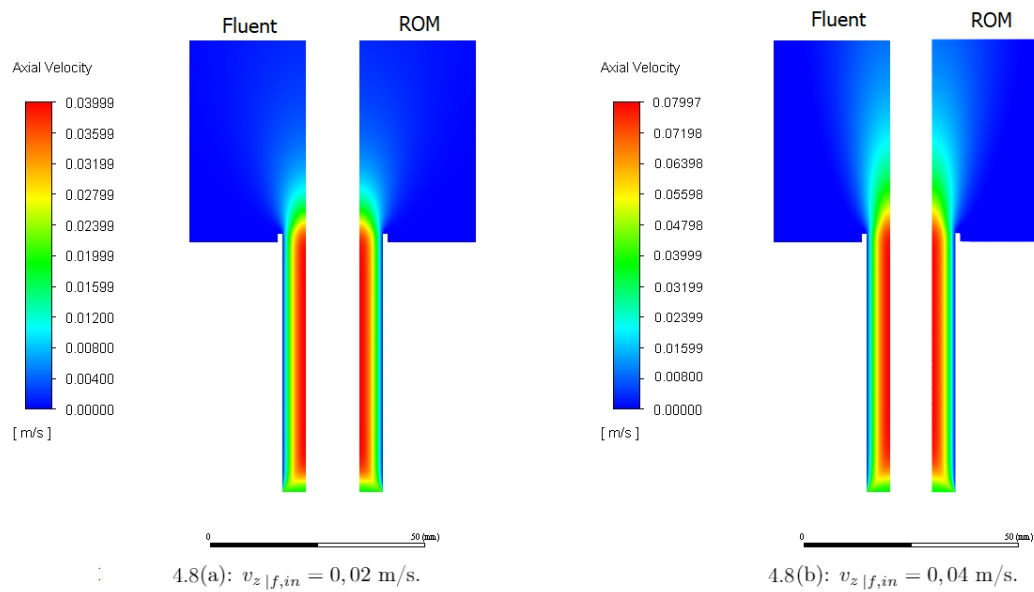


Figura 4.8: Campos da componente axial de velocidade obtidos com *Fluent* (esquerda) e com ROM (direita) , para aos casos de validação.

Uma análise qualitativa dos campos da componente axial da velocidade para ambas velocidades de validação comparadas, Figs.4.8(a) e (b), mostra que o comportamento da velocidade calculada pelo ROM se assemelha, sem grandes diferenças, com a calculada pelo *Fluent*. De fato, como mostrado na Fig.4.4 (b), o máximo erro absoluto desse modelo, tem-se um erro menor do que 0,00357 m/s, o que explica essa alta semelhança entre os modelos.

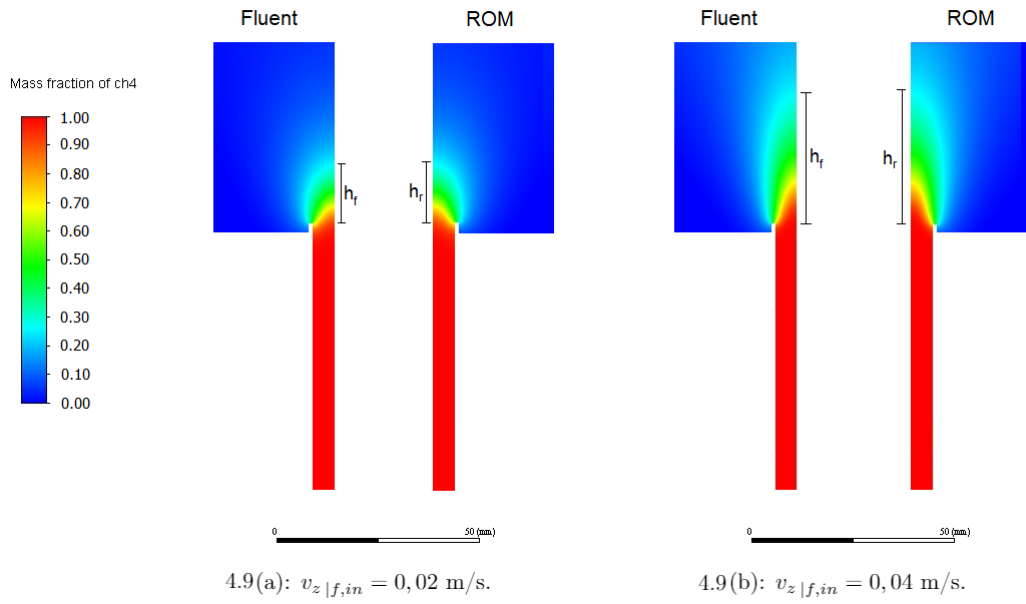


Figura 4.9: Campo da fração mássica de  $\text{CH}_4$  obtidos com o *Fluent* (esquerda) e com o ROM (direita) para os casos de validação.

Comparando, na Fig.4.9, os dois campos de fração mássica de  $\text{CH}_4$ , obtidos com o ROM, com os resultados com o *Fluent*, percebe-se uma ligeira diferença nas regiões com baixa fração mássica de combustível. Para ambas velocidades de entrada de combustível comparadas, os perfis de  $\text{CH}_4$ , Figs.4.9(a) e 4.9(b), mostram que o comportamento calculado pelo ROM se assemelha ao calculado com CFD. Dentro do tubo de injeção de combustível se tem 100% de metano, e ao sair dele, em  $z = 60$  mm, os fenômenos de transporte de massa influenciam a distribuição do metano ao longo do domínio. Nota-se uma pequena diferença, nos perfis obtidos através do ROM e do CFD, na altura máxima que a região de mistura  $\text{CH}_4/\text{ar}$  atinge, tanto para a Fig.4.9(a) quanto para a Fig.4.9(b). Os perfis do ROM possuem uma altura ( $h_r$ ) maior do que a altura dos perfis do *Fluent* ( $h_f$ ). O máximo erro absoluto desse modelo, é menor do que 0,01, tal como mostrado na Fig.4.5(b), o que pode explicar essa pequena diferença entre os campos.

## 5

### Conclusões e perspectivas

Neste capítulo serão apresentados as conclusões, desafios e as perspectivas deste trabalho. As conclusões se baseiam nas análises da estrutura do escoamento isotérmico, dos campos de velocidade e de fração mássica de combustível.

#### 5.1

##### Conclusões

As simulações computacionais criadas para verificar o comportamento do escoamento isotérmico da configuração representativa de uma chama laminar não pré-misturada, utilizando o software *Fluent*, permitem a criação de uma base de dados para desenvolver modelos de ordem reduzida estáticos. Para todos os casos estudados, a mesma malha e as mesmas condições limites foram usados.

Em todos os seis casos estudados com o *Fluent* R1 foi demonstrado que o escoamento de entrada de combustível é hidrodinamicamente desenvolvido na saída do tubo, pois o perfil axial de velocidade não varia ao longo da direção do escoamento. Entretanto, a velocidade na saída do tubo diminui, devido aos efeitos difusivos causados pela baixa velocidade. Além disso, foram identificados os efeitos de transporte de massa de  $\text{CH}_4$  ao longo do domínio, mostrando que a mistura de ar e combustível se dá gradativamente e que o aumento da velocidade de  $\text{CH}_4$  torna a região de mistura na direção axial maior.

Por fim, foi criado o modelo de ordem reduzida estático usando os dados das simulações de CFD. Numa análise qualitativa, foi observado que, para os ROMs, da velocidade e da fração mássica de  $\text{CH}_4$ , o modelo reduzido levou a resultados similares aos do modelo *Fluent*. De fato, observa-se um máximo erro absoluto próximo de 0,037 m/s para a velocidade e 0,009 para a fração mássica de metano, quando 3 modos foram utilizados na aprendizagem. A análise qualitativa do campo de  $\text{CH}_4$  também não apresentou diferenças significativas. Sendo assim, ambos os modelos são válidos para a modelagem do escoamento isotérmico. Além disso, foi também mostrado que, ao aumentar o número de modos fornecidos para a aprendizagem é possível reduzir o erro do ROM.

No decorrer deste trabalho foram encontrados alguns desafios que atrasaram seu andamento. Um deles foi a dificuldade de acesso à licença do software *Twin Builder* no computador do laboratório de combustão. Este problema foi

resolvido junto ao RDC somente durante os meses setembro e outubro, o que atrasou o desenvolvimento do trabalho. Outro problema foram as frequentes faltas de energia elétrica no laboratório, que interromperam o andamento das simulações, apesar de *no-breaks* serem usados.

## 5.2 Perspectivas

Este trabalho abre portas para o estudo de modelos de ordem reduzida aplicados à combustão, e para isso os próximos passos deste projeto são:

1. realizar simulações reativas com mecanismo esqueleto de cinética química no *Fluent*;
2. aumentar a quantidade de pontos utilizados para construir o ROM, objetivando a diminuição do erro do modelo;
3. construir os modelos de ordem reduzida para o caso reativo;
4. estudar modelos de formação de fuligem, e implementá-los em futuras simulações.



## Referências Bibliográficas

- [1] MERGULHÃO, C. S. AND CACELLA, N. L. S. AND NASCIMENTO, S. P. S. Estudo experimental da formação de fuligem em chamas laminares de hidrocarbonetos e ar. Projeto de conclusão de curso, Departamento de Engenharia Química, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2016.
- [2] EPE. matriz energética e elétrica. Disponível em: <<http://epe.gov.br/pt/abcdenergia/matriz-energetica-e-eletrica>>, 2019. Acesso em: Julho de 2019.
- [3] EPE. Balanço energético nacional 2019: Relatório síntese/ano base 2018. Disponível em: <<http://www.epe.gov.br/pt/publicacoes-dados-abertos/publicacoes/balanco-energetico-nacional-2019>>, 2019. Acesso em: Julho de 2019.
- [4] MINISTÉRIO DO MEIO AMBIENTE. Poluentes atmosféricos. Disponível em: <<http://www.mma.gov.br/cidades-sustentaveis/qualidade-do-ar/poluentes-atmosfericos.html>>, 2019. Acesso em: Julho de 2019.
- [5] GLASSMAN, I. *Combustion*. Academic Press Inc., Orlando, USA, 2nd edition, 1987.
- [6] BOURDREL, T. et al. Cardiovascular effects of air pollution. *Archives of Cardiovascular Disease*, v. 110:634–642, 2017.
- [7] CRUZ VILLANUEVA, J. J.; FIGUEIRA DA SILVA, L. F.; FUENTES, A. Experimental study of laminar non-premixed ethylene/air flames using laser induced incandescence and fluorescence. In *24th ABCM International Congress of Mechanical Engineering*, pages 1–7, Rio de Janeiro, Brasil, 2017.
- [8] MAURER, G. Modelagem da radiação térmica considerando a injeção de fuligem em uma câmara de combustão operando com chama turbulenta de metano. Dissertação de mestrado, Departamento de Engenharia Mecânica, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2015.
- [9] ZHANG, A. Q.; THOMSON M. J.; GUO, H.; LIU, F.; SMALLWOOD, G. J. Development of a parallel CFD code for modeling steady laminar axisymmetric non-premixed co-flow flames with soot. In *2007 Spring Technical Meeting Combustion Institute*, pages 1–6, Canadá, 2007.

- [10] LUBOZ, V.; BAILET, M.; GRIVOT, C. B.; ROCHETTE, M.; DIOT, B.; BUCKI, M.; PAYAN, Y. Personalized modeling for real-time pressure ulcer prevention in sitting posture. *Journal of Tissue Viability*, v. 27:54–58, 2018.
- [11] XIAO, D.; FANG, F.; BUCHAN, A. G.; PAIN, C. C.; NAVON, I. M.; MUGGERIDGE, A. Non-intrusive reduced order modelling of the navier-stokes equations. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, v. 293:522–541, 2015.
- [12] GÜLDER, Ö. L.; SNELLING, D. R. Influence of nitrogen dilution and flame temperature on soot formation in diffusion flame. *Combustion and Flame*, v.92, 1993.
- [13] CRUZ VILLANUEVA, J. J. Estudo experimental da distribuição de fuligem e de hidrocarbonetos aromáticos policíclicos em chamas laminares não pré-misturadas de etileno e de ar. Tese de doutorado, Departamento de Engenharia Mecânica, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2017.
- [14] DE CASTRO, R. R.; FIGUEIRA DA SILVA, L. F. Experimental study of soot volume fraction and temperature of laminar non-premixed ethylene-air flames. In *25th ABCM International Congress of Mechanical Engineering*, Minas Gerais, Brazil, 2019.
- [15] COIMBRA, A. Modelagem computacional de chamas laminares não pré-misuradas, utilizando OpenFOAM. Projeto de conclusão de curso, Departamento de Engenharia Mecânica, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2017.
- [16] RAMOS, L. D. C. Modelagem computacional de chamas laminares não pré-misuradas com mecanismo de cinética química detalhada, utilizando OpenFOAM. Projeto de conclusão de curso, Departamento de Engenharia Mecânica, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2017.
- [17] MCALLISTER, S.; CHEN, J.; FERNANDEZ-PELLO, A. C. *Fundamentals of Combustion Processes*. Springer, New York, USA, 1st edition, 2011.
- [18] FOX, R. W.; MCDONALD, A. T.; PRITCHARD, P.J. *Introduction to Fluid Mechanics*. John Wiley & Sons, Inc., New Jersey, USA, 8th edition, 2010.

- [19] NIST-JANAF. Tabelas termodinâmicas. Disponível em: <<http://combustion.berkeley.edu/drm/>>, 2019. Acesso em: Agosto de 2019.
- [20] ASGARI, S.; HU, XIAO; KAUSHIK, S. Applications of SVD ROM to thermal modeling. In *NAFEMS World Congress*, Stockholm, Sweden, 2017.
- [21] VIANA, F. A. C.; HAFTKA, R. T.; STEFFEN, V. Multiple surrogates: how cross-validation errors can help us to obtain the best predictor. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, v. 39:439–457, 2009.
- [22] TREFETHEN, L. N.; BAU, D. *Numerical Linear Algebra*. Society for Industrial and Applied Mathematics, USA, 1st edition, 1997.
- [23] PATANKAR, S. V. *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*. Taylor & Francis, USA, 1st edition, 1980.