



Leonardo Tchen Hao Hang Wei

**Estudo numérico do retorno de chama em
escoamentos laminares em tubos circulares**

Projeto de Graduação

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

Orientador: Luís Fernando Figueira da Silva

Co-orientadora: Maria Clara de Jesus Vieira

Rio de Janeiro
Julho de 2020

Agradecimentos

Primeiramente quero agradecer a minha família que sempre estiveram comigo em todos os momentos da minha vida, nas decisões mais difíceis que tive que tomar e nos momentos de vitória, sempre me apoiando e me dando total suporte pela minha caminhada. Quero agradecer também a minha namorada e melhor amiga, Laura Daflon, que sempre está ao meu lado em todas as situações que preciso.

Agradeço muito ao meu orientador Luís Fernando Figueira da Silva, a minha coorientadora Maria Clara de Jesus Vieira e a minha amiga Nicole Lopes que me ajudaram a crescer como pessoa e me passaram muito conhecimento.

Agradeço meus amigos Marcelo Goft, Fernando Feo e Thiago Silva pelos momentos que vivemos na faculdade e pelos futebóis que a gente jogou juntos. Também ao meu melhor amigo de infância Ighor Ananias, pelos conselhos e apoio sempre.

Resumo

Estudo numérico do retorno de chama em escoamentos laminares em tubos circulares

A combustão é um processo de extrema importância em diversas indústrias, servindo tanto para a geração de energia ou para a queima de gases nocivos ao meio ambiente como o metano. Durante a combustão, pode ocorrer o fenômeno conhecido como retorno de chama (*flashback*), onde a chama se propaga a montante dentro do tubo. Esse fenômeno pode causar prejuízos financeiros e danos materiais caso a chama retorne para as tubulações pois os equipamentos de transporte de gases não é projetado para aguentar as elevadas temperaturas e pressões que a combustão implica. Em estudos recentes são realizadas adaptações de malha de acordo com o gradiente de temperatura para simular o processo de combustão. A cinética química detalhada vêm sendo empregada em análises mais recentes para melhor descrever as reações químicas. A influência de parâmetros como a velocidade do escoamento e a riqueza da mistura foram estudados com condições de contorno de parede adiabática e isotérmica para determinação do *flashback*. O presente trabalho destina-se a análise de chamas pré misturadas de metano-ar quando ocorre *flashback* em tubos circulares. No início da simulação é imposto um perfil de temperatura determinado para fornecer a energia necessária para ocorrer a combustão e um perfil de velocidade do escoamento de Poiseuille na entrada do tubo. As equações resolvidas são as de estado dos gases ideais, continuidade, quantidade de movimento, de espécies químicas e de energia. São estudadas duas condições de contorno térmicas na parede, adiabática e isotérmica. Conforme a combustão ocorre, é realizada uma adaptação de malha baseada no gradiente de temperatura. A adaptação é necessária para descrever adequadamente as reações químicas mais rápidas, o que não ocorre numa malha mais grosseira. Os resultados mostram que o perfil de temperatura dentro do tubo para as paredes adiabáticas e isotérmicas diferem nitidamente devido a troca de calor. Também foi observado que a velocidade média do escoamento precisa ser maior do que a velocidade da chama plana para que não ocorra *flashback*.

Palavras-chave

retorno de chama; escoamento laminar; estudo numérico; combustão; chamas pré misturadas.

Abstract

Numerical study of flashback in laminar flows in circular tubes

Combustion is an extremely important process in several industries, serving both to generate energy or to burn gases that are harmful to the environment such as methane. During combustion, the phenomenon known as flashback can occur, where the flame propagates upstream into the tube. This phenomenon may cause material damage if the flame returns to the pipelines because the gas transport equipment is not designed to withstand the high temperatures and pressures that combustion implies. In recent studies, mesh adaption are developed based on temperature gradient for simulation of combustion process. Detailed chemical kinetics has been used in more recent analyzes to better describe the chemical reaction. Influence of parameters such as mixing speed and equivalence ratio are analyzed with adiabatic and isothermal wall boundary conditions for flashback verification. The present work is aimed at the analysis of pre-mixed methane-air flames when flashback occurs in circular tubes. At the beginning of the simulation it is applied a determined temperature profile to supply the necessary energy to start the combustion and a speed profile of the Poiseuille flow in the entrance of the domain. The solved equations are those of ideal gas, continuity, momentum, species and energy. Two thermal boundary conditions on the wall are analyzed, adiabatic and isothermal. As combustion occurs, mesh adaption based on the temperature gradient is performed. Adaption is performed to better describe the fastest chemical reactions, which does not occur in a coarser mesh. The results show that the temperature profile inside the tube for the adiabatic and isothermal walls differ due to heat exchange. It was also observed that the average flow velocity needs to be greater than the speed of the flat flame so that flashback is prevented.

Keywords

flashback; laminar flow; numerical study; combustion; premixed flame.

Sumário

1	Introdução	9
1.1	Motivação	9
1.2	Revisão bibliográfica	10
1.3	Velocidade da chama plana	17
1.4	Objetivos	18
2	Metodologia	19
2.1	Configuração experimental estudada	19
2.2	Equações governantes	21
2.3	Metodologia numérica	23
2.4	Condições iniciais e de contorno	24
2.5	Modelo numérico	25
3	Resultados e discussão	30
3.1	Influência das condições de contorno térmicas na parede	30
3.2	Influência da velocidade de entrada do escoamento	34
4	Conclusões e perspectivas	36

Lista de figuras

1.1	Esquema do gradiente de velocidade crítico [1].	9
1.2	Perfis da chama laminar para diferentes condições de escoamento[1].	10
1.3	Gradiente de velocidade crítico para diversos valores do raio [2].	11
1.4	Novo gradiente de velocidade crítico - linear profile. Gradiente de velocidade crítico anterior - g_f [3].	12
1.5	Velocidade de chama adimensional como função do número de Damköhler [4].	14
1.6	Esquema da configuração nas coordenadas do laboratório (a), sistema de referência móvel (b) [5].	14
1.7	Velocidade da chama plana em função da riqueza para misturas metano-ar. [6].	17
2.1	Configuração experimental do laboratório de combustão. 1 - Vazão de ar (\dot{V}_{ar} ; 2 - Vazão de combustível $\dot{V}_{comb.}$; 3 - Vazão de diluente $\dot{V}_{dil.}$; 4 - Tubo de quartzo; 5 - Medidores de vazão; 6- Chama.	19
2.2	Campo de temperatura - isotermas em $t = 0$.	24
2.3	Malha com resolução de 150×8 pontos. 1- Entrada; 2- Saída; 3- Parede impermeável; 4- Simetria.	25
2.4	Perfil de velocidade na saída do domínio computacional para 4 resoluções de malha.	26
2.5	Norma euclidiana do erro da solução numérica como função do número de pontos da malha.	27
2.6	Tempo de simulação com função do número de pontos da malha.	27
2.7	Ampliação na região da chama onde a malha é refinada.	28
2.8	Comparação entre as frações mássicas de CH_2 para: malha grosseira - $\delta x = 75\mu m$, $\delta y = 50\mu m$; malha refinada - $\delta x = 5\mu m$, $\delta y = 3\mu m$.	29
3.1	Comparação dos campos de temperatura e das componentes de velocidade para $\phi = 1$: parede isotérmica (esquerda); parede adiabática (direita).	31
3.2	Comparação do campo de fração mássica das espécies químicas majoritárias: parede isotérmica (esquerda); parede adiabática (direita).	32
3.3	Comparação do campo de fração mássica das espécies químicas minoritárias: isotérmico (esquerda); adiabático (direita).	33
3.4	Esquema da reação química detalhada da combustão do metano [6].	33
3.5	Campos de temperatura obtidos durante o fenômeno de <i>flashback</i> com $\phi = 1$. 3.5(a)- Instante inicial ; 3.5(b)- Velocidade média do escoamento de 0,667 m/s (centro); 3.5(c)- Velocidade média do escoamento de 0,226 m/s (direita).	34
3.6	Comparação entre os campos de temperatura para uma velocidade média do escoamento de 0,4 m/s com $\phi = 0,8$. 3.6(a)- Instante inicial ; 3.6(b)- Parede adiabática; 3.6(c)- Parede isotérmica.	35

Lista de símbolos

C_{pk}	Calor específico a pressão constante da espécie química k
D	Diâmetro
E	Soma das energias cinética e sensível
e_s	Energia sensível específica
$f_{k,i}$	Forças de corpo atuante na espécie química k na direção i
$f_{k,j}$	Forças de corpo atuante na espécie química k na direção j
$g_{f,lin}$	Novo gradiente de velocidade crítico
h_k	Entalpia da espécie química k
L	Comprimento do domínio na direção axial
M	Taxa de vazão adimensional
m	Massa total de um gás
m_k	Massa da espécie química k
N_{O2a}	Número de mols de oxigênio em uma reação com qualquer valor de riqueza
N_{O2s}	Número de mols de oxigênio na estequiometria
p	Pressão
\dot{Q}	Fonte de calor
q_i	Fluxo de energia
r	Coordenada radial
R	Constante dos gases ideais
S_L	Velocidade da chama plana
T	Temperatura
t	Tempo
u	Componente de velocidade na direção axial
u_i	Componente de velocidade na direção i
u_j	Componente de velocidade na direção j
u_m	Velocidade média do escoamento
U_0	Velocidade no centro do domínio
$U(r)$	Perfil de velocidade axial
v	Componente de velocidade na direção radial
$V_{k,i}$	Componente i da velocidade de difusão da espécie química k
W	Massa molar média
W_k	Massa molar da espécie química k
x	Coordenada axial
x_i	Coordenada na direção i
x_j	Coordenada na direção j
x_k	Coordenada na direção k
x_{max}	Valor máximo da coordenada axial
x_{min}	Valor mínimo da coordenada axial
y	Coordenada radial utilizada nas referências
y_{max}	Valor máximo da coordenada radial
y_{min}	Valor mínimo da coordenada radial
Y_k	Fração mássica da espécie química k
$\Delta h_{f,k}^0$	Entalpia de formação da espécie química k a uma temperatura T_0

δ_p	Distância de penetração
δ_q	Distância de <i>quenching</i>
δ_x	Resolução da malha na direção x
δ_y	Resolução da malha na direção y
δ	Espessura da chama
θ	Temperatura adimensional
λ	Condutividade térmica
μ	Viscosidade dinâmica
ρ	Densidade
$\sigma_{i,j}$	Soma do tensor viscoso
τ_{ij}	Tensor das tensões viscosas
τ_{chem}	Tempo característico de uma reação
ϕ	Riqueza da mistura
\forall_{ar}	Vazão de ar
\forall_{comb}	Vazão de combustível
\forall_{dil}	Vazão de diluente
$\dot{\omega}_k$	Taxa de reação da espécie química k
$\dot{\omega}_T$	Taxa de liberação de energia devido a combustão

1

Introdução

1.1

Motivação

Nas indústrias petrolíferas a combustão é um processo de extrema importância. Para evitar que ocorra um fenômeno conhecido como retorno de chama (*flashback*), estudos numéricos vem sendo desenvolvidos para compreender tal fenômeno com o intuito de evitar acidentes e prejuízos financeiros.

O *flashback* é um fenômeno caracterizado pela propagação da chama dentro do tubo em direção aos gases frescos. Esse fenômeno ocorre quando o gradiente de velocidade do escoamento atinge um valor crítico, o que leva a chama a se propagar de jusante para montante. O gradiente de velocidade crítico define que o *flashback* ocorre quando a velocidade do escoamento é menor do que a velocidade da chama plana em algum ponto perto da parede. A região que o fenômeno pode ocorrer é dentro da distância de penetração, δ_p . Nesta distância, a velocidade da chama é igual a velocidade do escoamento, como pode ser visto na Fig. 1.1:

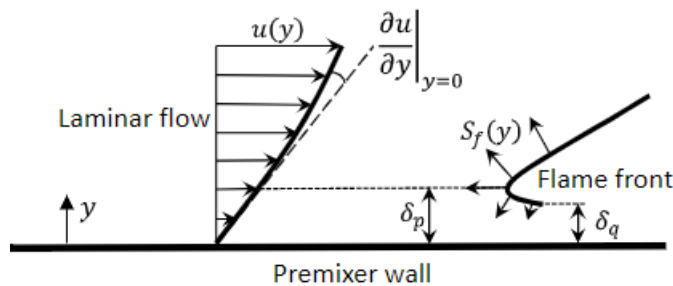


Figura 1.1: Esquema do gradiente de velocidade crítico [1].

Na Fig. 1.2(a), pode-se perceber o esquema da chama estabilizada fora do tubo e a chama é concâva em relação dos gases frescos, indicando que a velocidade da chama é menor que a velocidade do escoamento. Já na Fig. 1.2 (b) a curvatura da chama na direção dos gases frescos indica que a velocidade do escoamento é menor do que a velocidade da chama plana e o *flashback* ocorre.

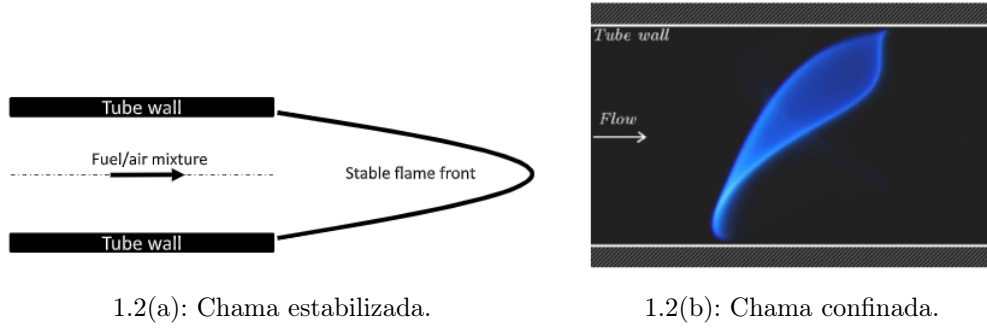


Figura 1.2: Perfis da chama laminar para diferentes condições de escoamento[1].

Atualmente é possível simular esse fenômeno por meios computacionais, evitando gastos com experimentos e materiais. Este projeto destina-se a análise e estudo numérico do *flashback* em tubos circulares baseados em estudos realizados no laboratório de combustão. Para descrever a termoquímica da combustão, será necessário modelar matematicamente o fenômeno.

1.2

Revisão bibliográfica

Lee et al. (1982) [2] apresentam um dos primeiros trabalhos de análises numéricas de retorno de chama (*flashback*) para combustíveis metano-ar. Na simulação é utilizada a reação química global, método do falso transiente e, na entrada do domínio computacional, é imposto um perfil parabólico de velocidade. Não é levada em conta a reação química detalhada devido às limitações da época. Os autores utilizam tubos de diferentes diâmetros na simulação para se verificar o efeito do diâmetro na propensão ao *flashback*. Conforme o raio do tubo aumenta, o gradiente de velocidade crítico começa a apresentar um valor constante como pode ser visto na Fig. 1.3. Por isso, não se faz necessário a realização de simulações com diâmetros muito grandes.

Os resultados de Lee et al. (1982) mostram que o perfil da chama possui uma curvatura bem grande perto da parede, sugerindo que as hipóteses de determinação do perfil de velocidade perto da parede como um perfil linear de velocidade não são totalmente corretas para determinar os limites de *flashback*. Além disso, também é imposto um perfil não parabólico na entrada do tubo dado por:

$$\frac{U(r)}{U(0)} = 1 - 2,5\left(\frac{r}{R}\right)^2 + 1,5\left(\frac{r}{R}\right)^3, \quad (1-1)$$

onde $U(r)$ é a distribuição da velocidade axial a fim de avaliar como o gradiente de velocidade crítico é alterado. Com isso, foi possível determinar que o perfil imposto também é um parâmetro que altera os limites de *flashback*.

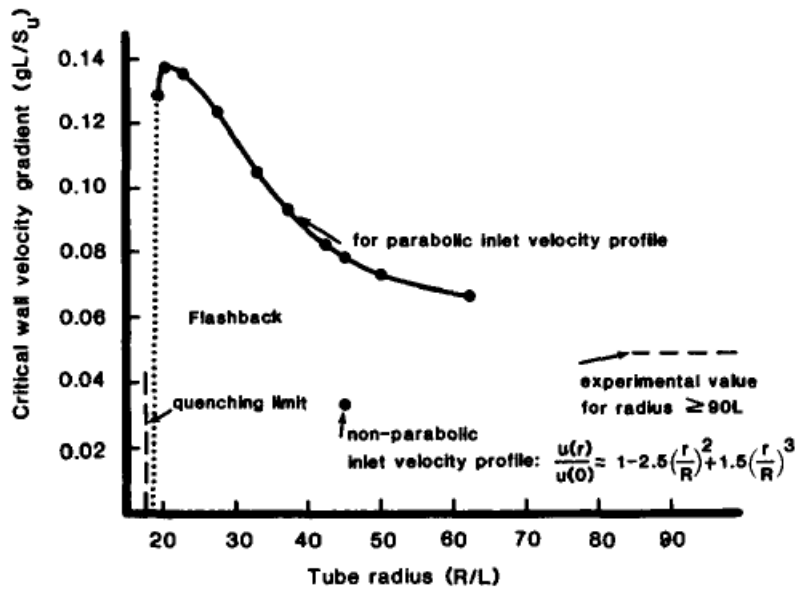


Figura 1.3: Gradiente de velocidade crítico para diversos valores do raio [2].

Mallens et al. (1998) [3] analisam numérica e experimentalmente a propensão ao *flashback* de misturas metano-ar para riquezas variando entre 0,9 e 1,2 e diâmetros na faixa entre 4 a 10 mm. O perfil de velocidade é considerado parabólico na entrada e a velocidade vai sendo diminuída até a simulação não convergir, ou seja, no limiar da ocorrência de *flashback*. Para descrever o escoamento é utilizada a formulação corrente-vorticidade. Já o modelo de combustão consiste nas equações de conservação para a vorticidade, função de corrente, fração molar das espécies químicas e energia. Na entrada do domínio as condições físicas impostas foram as condições da mistura antes da combustão. Os autores propõem um novo gradiente de velocidade crítico, $g_{f,lin}$, que independe do tamanho do queimador. O novo método define o gradiente de velocidade crítico como sendo correspondente à reta que intercepta o perfil parabólico de velocidade a uma distância na qual a chama é extinta, ou seja, na distância de quenching, δ_q , como pode ser visto na Fig. 1.4. Com isto, é possível determinar que os resultados numéricos se ajustam melhor aos experimentais. Para uma mesma riqueza, o gradiente de velocidade crítico pouco se altera com a variação do tamanho do queimador.

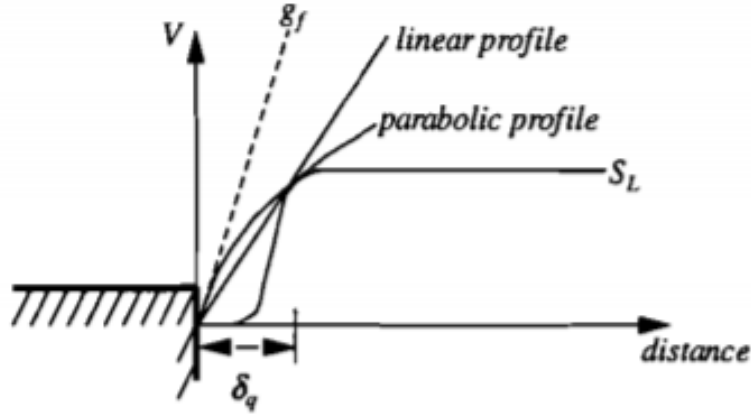


Figura 1.4: Novo gradiente de velocidade crítico - linear profile. Gradiente de velocidade crítico anterior - g_f [3].

A influência de parâmetros adimensionais na propensão ao *flashback* foi estudada por Kurdyumov et al. (2000) [7]. Os autores dão ênfase ao número de Karlovitz e, em particular, como outros parâmetros, como o número de Lewis (Le), Zeldovich (Ze) e Damköhler (Da) alteram o número de Karlovitz, e como este altera o *flashback*. O número de Damköhler é a razão entre a taxa da reação química e a taxa de difusão de massa. O número de Karlovitz é o inverso do número de Damköhler para altas energias de ativação. Já o número de Lewis é uma medida da razão entre a difusividade térmica e da difusividade de massa. Por fim, o número de Zeldovich representa de forma adimensional de quantificar a energia de ativação da reação química.

Para a simulação numérica, Kurdyumov et al. (2007) utilizam o método transiente de segunda ordem e aproximação de três pontos para as derivadas espaciais. Para as derivadas temporais, primeira ordem com aproximação explícita. O domínio foi adimensionalizado por um comprimento dado por:

$$l_n = \sqrt{\alpha}/A \quad (1-2)$$

onde α é a difusividade térmica e A é o gradiente de velocidade na parede. A coordenada x vai de $x_{min} = -10$ até $x_{max} = 10$ e a coordenada y vai de $y_{min} = 0$ até $y_{max} = 10$. Para as paredes adiabáticas os autores escolhem o ponto de referência da coordenada y na parede. Para o caso de paredes isotérmicas, a referência é considerada na distância de *quenching*, que é onde a chama é extinta. As condições de contorno, em $y = y_{max}$, são adiabáticas e não catalíticas. Os autores testam duas malhas diferentes, uma com 301×151 e outra de 401×201 pontos e determinam que a variação no cálculo da velocidade da chama foi menor do que 1,5 %. Os resultados mostram que, para paredes adiabáticas, a energia de ativação influencia pouco no número de Karlovitz crítico. O número de Lewis altera significativamente o número de

Karlovitz. Quanto maior o valor de Le , menor é o valor do número de Karlovitz crítico. O mesmo se aplica para as paredes isotérmicas, com a diferença de que a influência do número de Lewis é bem menor nesse caso.

A propagação em tubos pequenos de chama pré misturada de metano ar é estudada numericamente por Kim et al. (2006) [8], para paredes adiabáticas e isotérmicas. Os autores analisam o formato da chama e as variações no campo de escoamento de acordo com as condições de contorno e condições iniciais utilizadas. O método utilizado para resolver a equação de continuidade e quantidade de movimento é o *SIMPLER* [9]. É utilizado um modelo simplificado para a reação química e considerada uma mistura estequiométrica de metano-ar. A origem é fixada no ponto onde a chama se localiza, ou seja, na região de maior taxa de liberação de calor. O tamanho do domínio na direção axial é considerado muito maior do que o raio do tubo. Neste trabalho, é utilizada uma malha adaptativa quadrada com refinamento nas regiões próximas a chama de forma que o erro entre a velocidade da chama plana calculada e a obtida experimentalmente seja menor do que 1%. Isso ocorre quando a malha é da ordem de $50\mu\text{m}$ nas vizinhanças da frente de chama. Os resultados mostram que para as condições adiabáticas, as velocidades de propagação tendem a ter um valor maior quando comparadas as paredes isotérmicas. Os autores concluem que esses efeitos são causados pelo fato das linhas de corrente do escoamento se redirecionarem devido as expansões térmicas e gradientes de pressão adversos na frente de chama.

A realização de experimentos e cálculos numéricos do *flashback* de misturas metano-ar e propano ar é feita por Kurdyumov et al. (2007) [4]. Os autores incluíram, nas equações de conservação um termo adimensional da taxa de reação, que é função do número de Zeldovich e Lewis, e do número de Damköhler. Nesta pesquisa, é considerada apenas parede adiabática e parede isotérmica no cálculo numérico, apesar de nenhuma das duas condições representar a condição real de temperatura na parede. Os resultados mostram que avaliar a propensão ao *flashback* pelo número de Damköhler é uma estimativa pouco precisa para descrever os limites do retorno de chama. A velocidade de propagação da chama se mostra muito sensível a pequenas variações do número de Damköhler, como pode ser visto na Fig. 1.5, o que dificulta a determinação de forma acurada do número crítico de Damköhler no limite da ocorrência de *flashback*. A Fig. 1.5 mostra um gráfico da variação da razão entre a velocidade de propagação da chama e a velocidade da chama planar como função do número de Damköhler para diferentes números de Lewis.

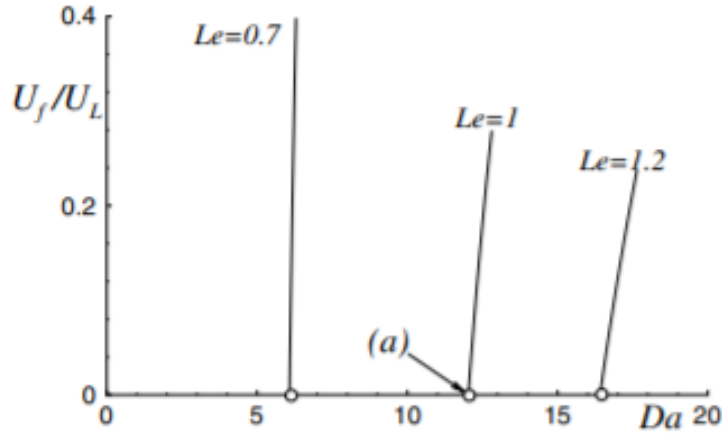


Figura 1.5: Velocidade de chama adimensional como função do número de Damköhler [4].

O estudo numérico do comportamento da chama para números de Lewis diferentes da unidade é realizado por Chakraborty et al. [5]. É assumido um perfil de velocidade que se baseia no escoamento de Poiseuille e escolhida uma referência solidária à chama, de forma que esta esteja parada. Assim, a velocidade total do escoamento inclui a velocidade da chama plana e a velocidade da pré mistura, como pode ser visto na Fig. 1.6. É utilizado o método do pseudo-transiente e as equações de conservação são discretizadas utilizando o método de volumes finitos de três pontos de segunda ordem. O avanço no tempo é feito de forma explícita pelo método preditor-corretor de primeira ordem. Os autores testam uma malha de 301×101 e outra de 601×201 pontos. Essas malhas são testadas para valores fixos do número de Lewis igual a 0,5, número de Biot (Bi) igual a 0, que é a razão entre o coeficiente de convecção e o coeficiente de condução, e U_{max} igual a 1, que representa a velocidade no centro do escoamento. O número de Biot igual zero implica paredes adiabática, ou seja, que não trocam calor. Como os resultados são muito próximos, é escolhida a malha menos refinada, de 301×101 pontos.

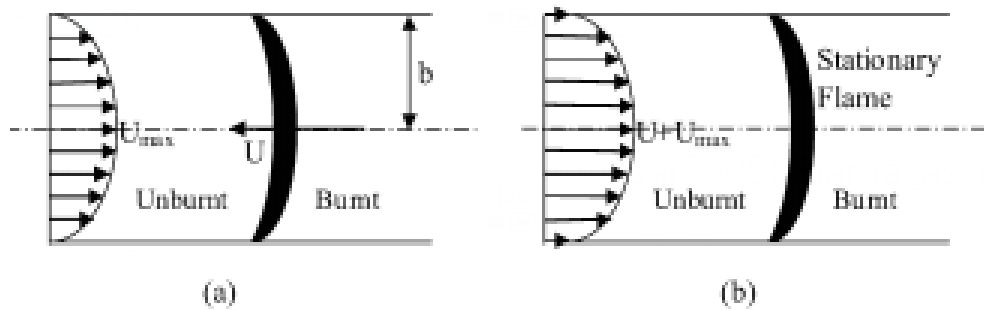


Figura 1.6: Esquema da configuração nas coordenadas do laboratório (a), sistema de referência móvel (b) [5].

A análise numérica da influência do efeito do número de Lewis na propagação de chamas simétricas e não simétricas em tubos é estudada por Kurdyumov (2011) [10]. Na simulação numérica é utilizada apenas parede adiabática e o regime é considerado transiente até a solução atingir um regime estável. O perfil de velocidade imposto é o de escoamento de Poiseuille e a reação química é modelada pela reação global não detalhada. O domínio foi adimensionalizado pelo comprimento característico descrito na Eq. 1-2. A coordenada x vai de $x_{min} = -2$ até $x_{max} = 3$ e a coordenada y vai de $y_{min} = 0$ até $y_{max} = 1$, onde x é a coordenada axial e y é a coordenada radial. As derivadas espaciais são discretizadas utilizando segunda ordem e diferença central de três pontos em uma malha com uma resolução de $\delta x/L = \delta y/L = 1\%$, onde L é o comprimento do domínio na direção axial. Os resultados mostram que, para números de Lewis menores do que 1, há um efeito significativo desse parâmetro nas condições de *flashback*. É mostrado também como Le varia com a taxa de vazão adimensional do escoamento dada por $m = U_0/S_l$ onde U_0 é a velocidade do combustível no centro do tubo e S_l é a velocidade da chama plana. Quanto menor o valor de Le maior é o valor crítico (valor da possibilidade de ocorrência de *flashback*) da taxa de vazão.

O estudo numérico da influência da perda de calor nas paredes na estrutura (chama simétrica ou assimétrica) e na estabilidade da chama é realizado por Kurdyumov et al. (2014) [11]. Na simulação numérica, os autores utilizam o modelo simplificado de cinética química global, com densidade, calor específico, difusividade térmica e difusividade molecular constantes. O domínio vai de $x_{min} = -3$ a $x_{max} = 3$, onde x é a coordenada axial, sendo estendido em alguns casos para $x_{min} = -20$ a $x_{max} = 10$ para garantir que o tamanho do domínio não interferisse nos resultados. Na coordenada radial y , é utilizado y variando de 0 a $1/2$ para simulações com chamas simétricas e y variando de 0 a 1 para chamas não simétricas. É utilizado o método de segunda ordem com diferença central de três pontos para as derivadas espaciais, com uma resolução da malha de $\delta x/L = \delta y/L = 1\%$, e o método de Gauss-Seidel para a solução. Os resultados mostram que, quanto maior o coeficiente de troca de calor, menor é o valor crítico da taxa de vazão adimensional e a chama se deforma próximo a região da parede. É possível visualizar também que apenas para números de Lewis menores do que um, há assimetria da solução.

O estudo numérico dos efeitos da adição de monóxido de carbono e de hidrogênio em misturas de metano-ar é umas das pesquisas realizadas por Liu et al. (2015) [12]. Os efeitos químicos, térmicos e difusivos causados por estes acréscimos são analisados para avaliar como a velocidade laminar da

chama varia. É determinado que a adição de hidrogênio na mistura aumenta a velocidade de propagação da chama, enquanto que um aumento de dióxido de carbono tende a inibir o processo de combustão. O acréscimo de monóxido de carbono, na presença de hidrogênio, aumenta a velocidade da chama. Os autores utilizam programas como o CHEMKIN, GRIM TECH e TRANSPORT para descrever processos químicos detalhados. Os mecanismos de transporte de convecção e difusão são aproximados, respectivamente, pelos métodos de diferença a montante e de diferença central. É considerada também, a perda de calor por radiação para melhor investigar os aspectos químicos dos limites de inflamabilidade. O comprimento do tubo é de $x = -2\text{cm}$ a $x = 10\text{cm}$ com uma resolução de $\delta x/L = \delta y/L = 2,5\%$.

Nas reações químicas detalhadas, cada etapa possui um grau de importância no processo químico global. Portanto, Jie Liu et al. (2015) implementam uma análise de sensibilidade cuja função é alterar os coeficientes de sensibilidade das reações de acordo com a sua importância na propriedade analisada. Os resultados mostram que, após a realização dessa análise com respeito a velocidade da chama laminar e das espécies químicas para misturas ricas, é possível obter melhores aproximações para a velocidade da chama. É realizada a análise somente para $\phi > 1$ pois é a faixa de riqueza onde ocorreram maiores discrepâncias entre modelos numéricos e experimentais.

O *flashback* é um fenômeno que vêm sendo definido pelo gradiente de velocidade crítico, onde assume-se um equilíbrio entre o campo hidrodinâmico e a propagação da chama laminar pela camada limite. No entanto, esse conceito é muito limitado e não leva em consideração alguns aspectos importantes que são estudados por Hoferichter et al. (2018) [13]. Um fator a mais a ser considerado nos limites da ocorrência de *flashback* denomina-se estiramento da chama, que é uma medida de quanto a chama se estica devido aos efeitos de curvatura do perfil do tubo circular e do campo de velocidade do escoamento. Essa extensão da chama é importante na região próxima a parede, onde o perfil de velocidade não é linear devido a esse fator. Em combustíveis compostos por hidrogênio, esse estiramento é mais relevante se comparado a combustíveis de metano, pois o hidrogênio é mais reativo. Para calcular um novo gradiente de velocidade crítico a partir do estiramento da chama, Hoferichter et al. (2018) utilizam o comprimento de Markstein. O comprimento de Markstein leva em consideração esse esticamento e depende do número de Lewis(Le). Depende também da espessura da chama, da razão de expansão e do número de Zeldovich(Ze), que representa de forma adimensional e quantitativamente a energia de ativação da reação química. Quanto maior for o comprimento de *Markstein*, maior é o esticamento da chama e menor é a sua velocidade.

Quanto menor esse comprimento, maior é a velocidade, o que leva a conclusão de que é melhor ter um esticamento maior para menores velocidades de chama, diminuindo as chances de possíveis *flashbacks*.

1.3

Velocidade da chama plana

A velocidade da chama é um assunto que vêm sendo muito estudado para compreender o fenômeno de *flashback*. A velocidade da chama plana, S_L , é um aspecto importante em chamas pré misturadas, pois ela pode determinar a ocorrência do *flashback*. Essa velocidade da chama plana pode ser relacionada com a seguinte fórmula [6]:

$$S_L = \frac{\delta}{\tau_{chem}}, \quad (1-3)$$

onde δ é a espessura da chama e τ_{chem} é um tempo característico da reação química. A espessura da chama pode ser calculada a partir da região onde a temperatura atinge um valor capaz de ignitar a mistura de combustível-ar, até o ponto onde ela chega ao máximo. Para misturas de metano-ar, que serão tratadas no presente trabalho, a temperatura de ignição para condições ambientes é de 810 K aproximadamente.

A velocidade da chama plana é conhecida para misturas estequiométricas de metano-ar em condições ambientes, e possui um valor próximo de 40 cm/s. A Fig. 1.7 mostra valores dessa velocidade para diferentes riquezas de uma mistura metano-ar:

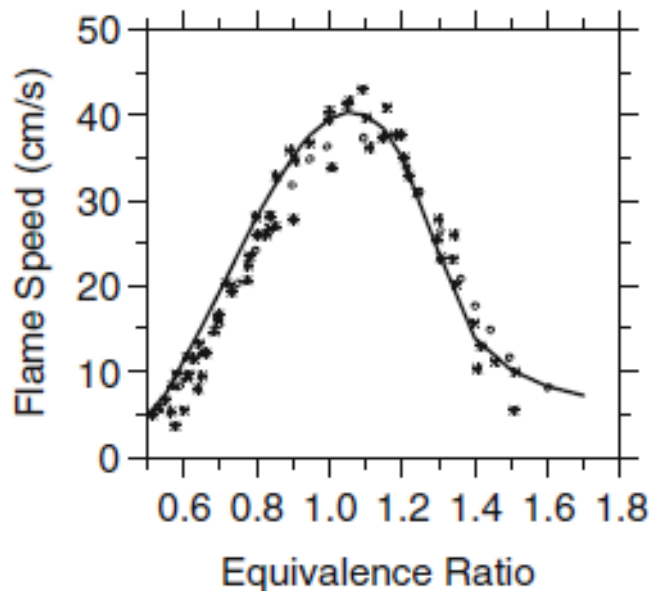


Figura 1.7: Velocidade da chama plana em função da riqueza para misturas metano-ar. [6].

1.4

Objetivos

1.4.1

Objetivos gerais

Este projeto de graduação em engenharia mecânica têm por objetivo geral estudar numericamente o fenômeno do retorno de chama laminar em misturas metano-ar representativas daquelas produzidas nos poços.

1.4.2

Objetivos específicos

- Compreender os fundamentos dos processos de combustão.
- Realizar simulações de dinâmica dos fluidos computacional em escoamentos com reação química.
- Modelar o processo de retorno de chama em tubos.
- Estudar a influência das condições de contorno térmicas nas paredes.
- Avaliar a influência do refinamento de malha na simulação.

2

Metodologia

Na seção 2.1 é mostrada a configuração experimental do laboratório na qual a simulação numérica é baseada e apresenta as diferentes condições analisadas experimentalmente. Na seção 2.2 são apresentadas as equações de conservação necessárias para resolver o escoamento reativo nas simulações numéricas. Na seção 2.3 são mostrados os parâmetros e as escolhas feitas para a realização da simulação. Em seguida, na seção 2.4 e 2.5 são apresentadas as condições iniciais e de contorno, o tipo de malha utilizada e o domínio computacional. Por fim, a seção 2.6 descreve o processo de adaptação de malha utilizado para captar os fenômenos da combustão corretamente.

2.1

Configuração experimental estudada

Tomando como base os experimentos no laboratório de combustão da PUC-Rio [14], foram realizadas simulações no *Fluent* com geometrias, tipo de material, escoamento e condições de contorno semelhantes aos experimentos existentes. Na Fig 2.1 é mostrado um esquema da bancada experimental, onde pode-se reparar que o combustível é misturado com o diluente antes de ser misturado com o ar. O tubo é o elemento 4 da figura, e a região por onde a mistura de combustível/diluyente/ar escoava e ocorre a combustão, possui diâmetro D e comprimento L .

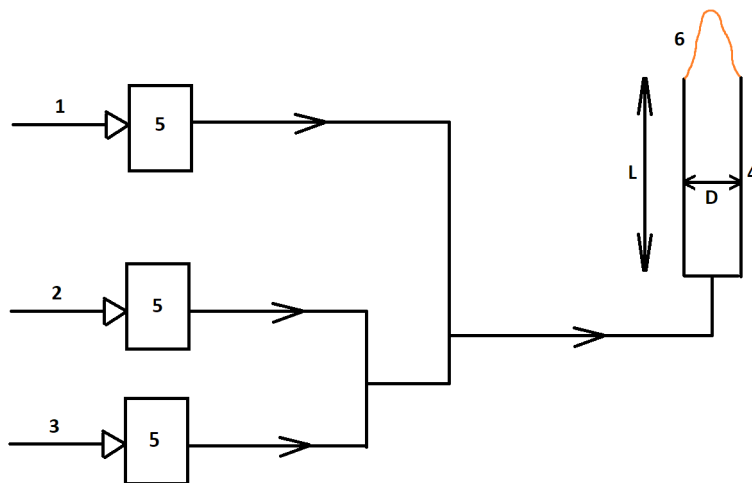
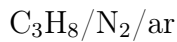
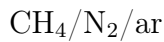


Figura 2.1: Configuração experimental do laboratório de combustão. 1 - Vazão de ar (\dot{V}_{ar}); 2 - Vazão de combustível $\dot{V}_{comb.}$; 3 - Vazão de diluente $\dot{V}_{dil.}$; 4 - Tubo de quartzo; 5 - Medidores de vazão; 6- Chama.

Para a realização do experimento, determina-se uma vazão para cada um dos três medidores de vazão. Em seguida, é fornecido calor na parte superior do tubo para que ocorra a combustão. Quando a chama se estabiliza fora do tubo, a vazão, seja de ar, combustível ou diluente, é reduzida até que a chama entre no tubo, caracterizando o fenômeno conhecido como *flashback*. Para a configuração mostrada na Fig. 2.1, diferentes condições foram utilizadas para avaliar como os limites de *flashback* se alteravam:

- Misturas:



- Vazão:

$$0 < \forall_{ar} < 20 \text{ [slpm]}$$

$$0 < \forall_{comb} < 5 \text{ [slpm]}$$

$$0 < \forall_{dil} < 500 \text{ [sccm]}$$

- Diâmetro dos tubos:

$$D = 6, 8 \text{ e } 17 \text{ [mm]}$$

- Diluição

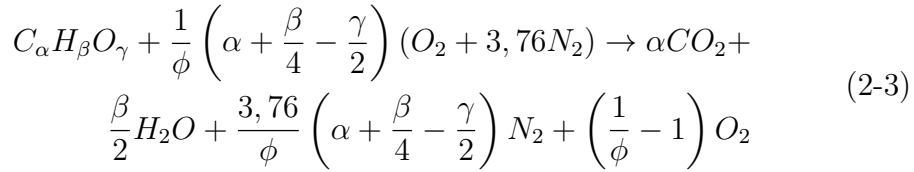
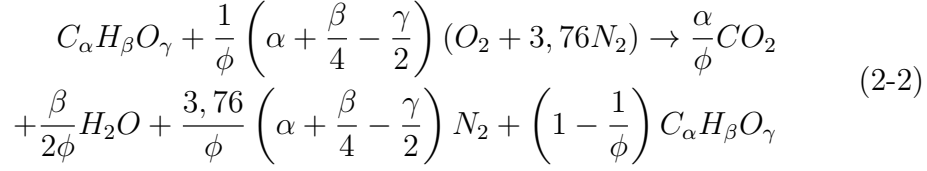
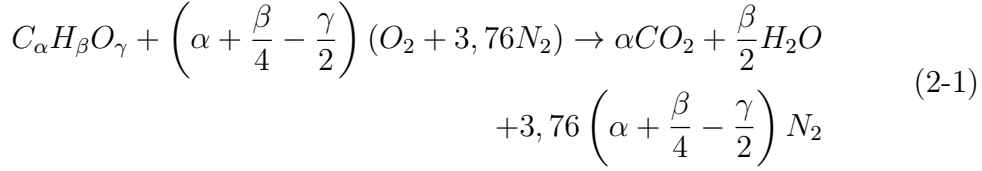
- Nos casos estudados no laboratório, para manter a mesma percentagem mássica entre combustível e diluente, a diluição foi realizada no volume:

- * Diluição de CO_2/N_2 no CH_4 : $0 < \%vol. < 30$

- * Diluição de CO_2/N_2 no C_3H_8 : $0 < \%vol. < 55$

- Riqueza

- A riqueza de uma mistura depende da quantidade de combustível para uma determinada quantidade de ar, podendo ser determinada analisando as reações químicas. Existem três condições para a riqueza de uma mistura, que podem ser representadas através do balanceamento das equações de reação química. As misturas podem ser ideais ($\phi = 1$), ricas ($\phi > 1$) ou pobres ($\phi < 1$), e suas reações ideais são descritas respectivamente [6]:



onde α , β e γ são coeficientes que determinam a quantidade de carbono, hidrogênio e oxigênio respectivamente, do hidrocarboneto utilizado como combustível.

A riqueza é determinada pela razão do número de mols de oxigênio para uma mistura estequiométrica ($\phi = 1$) pelo número de mols de oxigênio de uma mistura analisada, seja rica, pobre ou estequiométrica.

$$\phi = \frac{N_{O2s}}{N_{O2a}}. \quad (2-4)$$

As riquezas analisadas no laboratório encontram-se na faixa entre:

- CH_4 : $0,7 < \phi < 1,3$
- C_3H_8 : $0,6 < \phi < 1,6$

2.2

Equações governantes

Foram resolvidas as equações de estado dos gases ideais, continuidade, quantidade de movimento, espécies e de energia para um caso axi-simétrico 2D. Vale ressaltar que as equações que serão apresentadas a seguir são resolvidas para fluidos Newtonianos e são definidas como [15]:

$$p = \rho \frac{R}{W} T, \quad (2-5)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i}{\partial x_i} = 0, \quad (2-6)$$

$$\frac{\partial \rho u_j}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i u_j}{\partial x_i} = - \frac{\partial p}{\partial x_j} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_i} + \rho \sum_{k=1}^N Y_k f_{k,j}, \quad (2-7)$$

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} [\rho(u_i + V_{k,i})Y_k] = \dot{\omega}_k, \quad (2-8)$$

$$\begin{aligned} \frac{\rho E}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i E) &= \dot{\omega}_T - \frac{\partial q_i}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\sigma_{i,j} u_i) \\ &+ \dot{Q} + \rho \sum_{k=1}^N Y_k f_{k,i} (u_i + V_{k,i}), \end{aligned} \quad (2-9)$$

Onde p é a pressão, T é a temperatura, ρ é a densidade, R é a constante universal dos gases e W é a massa molecular média da mistura dado por:

$$\frac{1}{W} = \sum_{k=1}^N \frac{Y_k}{W_k} \quad (2-10)$$

onde W_k é o peso atômico da espécie k e Y_k é a fração mássica de cada espécie, definida como a razão entre a massa m_k de cada espécie em um dado volume e a massa total do gás m desse volume:

$$Y_k = \frac{m_k}{m} \quad (2-11)$$

Na Eq. 2-6, u_i é a velocidade na direção i , t é o tempo e x_i é a coordenada na direção i . Na Eq. 2-7 $f_{k,j}$ são as forças de corpo na direção j , que no presente trabalho será apenas a aceleração da gravidade, e τ_{ij} é a tensão viscosa dada por:

$$\tau_{i,j} = \frac{2}{3} \mu \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{i,j} + \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (2-12)$$

onde $\delta_{i,j}$ é o delta de Kronecker e μ é a viscosidade dinâmica. O delta de Kronecker é uma função que retorna o valor 1 se $i = j$ e 0 caso contrário.

Na Eq. 2-8, $V_{k,i}$ é o componente i da velocidade de difusão das espécies químicas, e $\dot{\omega}_k$ é a taxa de reação molar dessas espécies. As formulações detalhadas encontram-se em [15].

A Eq. 2-9 é uma das formas de representar a conservação de energia utilizando a soma das energias sensíveis e cinéticas, onde $E = e_s + \frac{1}{2} u_i u_i$, sendo e_s a energia sensível. O termo $\sigma_{i,j}$ é a soma do tensor viscoso, Eq. 2-12, com o tensor de pressão ($\sigma_{i,j} = \tau_{i,j} - p \delta_{i,j}$). O calor liberado devido a combustão, $\dot{\omega}_T$, é dado por:

$$\dot{\omega}_T = - \sum_{k=1}^N \Delta h_{f,k}^0 \dot{w}_k \quad (2-13)$$

onde $\Delta h_{f,k}^0$ é a entalpia de formação das espécies e \dot{w}_k é a taxa de reação em massa. Ainda na Eq. 2-9, \dot{Q} é a fonte de calor e q_i é o fluxo de energia:

$$q_i = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} + \rho \sum_{k=1}^N h_k Y_k V_{k,i} \quad (2-14)$$

onde λ é o coeficiente de difusão e h_k é a entalpia das espécies químicas, definida como:

$$h_k = \int_{T_0}^T C_{pk} dT + \Delta h_{f,k}^0 \quad (2-15)$$

onde C_{pk} é o calor específico a pressão constante e T_0 é a temperatura inicial dos reagentes.

2.3

Metodologia numérica

As equações de continuidade, quantidade de movimento linear e energia são discretizadas utilizando segunda ordem e para a pressão é utilizado o método *PRESTO!*[16]. É utilizado o esquema acoplado de velocidade-pressão e o método transiente com avanço no tempo de 100 μs com número de Courant de 20. O número de Courant é um parâmetro para a condição de convergência da solução dado por:

$$C = u \frac{\Delta t}{\Delta x} \quad (2-16)$$

onde u é a magnitude da velocidade do escoamento, Δt é o intervalo de tempo e Δx é o intervalo do espaçamento. Para resolver o escoamento reativo foi utilizado o *Stiff Chemistry Solver*, o qual possibilita a integração das equações da cinética química. Os parâmetros de integração (ISAT) utilizados são:

- *ISAT Error Tolerance*: 10^{-4} .
- *Max. Storage*: 200 mb.
- *Verbosity*: 0.

As propriedades termodinâmicas e de transporte utilizadas são brevemente listadas abaixo:

- Densidade: Lei dos gases ideais incompressíveis.
- Calor específico: Lei de mistura.
- Condutividade térmica: Lei de mistura dos gases ideais.
- Viscosidade: Lei de mistura dos gases ideais.
- Difusividade de massa: Teoria cinética.

É importante ressaltar que como o escoamento será laminar as pressões variam muito e não alteram a densidade dos gases.

Para descrever as reações químicas, são importados mecanismos cinéticos detalhados para o *Fluent*. O modelo utilizado para descrever a cinética química é o DRM 19 (*Reduction reaction mechanism*) [17]. O não detalhamento das reações químicas geram perdas de precisão e maior discrepância dos dados experimentais. Com isso, espera-se obter resultados mais representativos dos medidos.

Após realizada a geração da geometria e da malha são necessários parâmetros químicos, como a riqueza da mistura, e físicos, como a velocidade do escoamento. Faz-se necessário também a prescrição das condições de contorno representativas do problema.

2.4

Condições iniciais e de contorno

Para a realização de um escoamento reativo, é necessário que haja uma fonte de calor e o conhecimento das condições das espécies químicas no tempo inicial ($t = 0$). Para definir a fonte de calor, foi utilizada uma função de temperatura dada por [11]:

$$\theta = \theta_s \exp\{ -[(x - x_s)^2 + (y - y_s)^2] / r_s^2 \}, \quad (2-17)$$

onde $\theta_s = 0,9$, $x_s = 0$, $y_s = 0,4$, $r_s = 0,3$ e θ é uma temperatura adimensional definida como:

$$\theta = \frac{T - T_0}{T_{ad} - T_0}. \quad (2-18)$$

O campo de temperatura pode ser visualizado na Fig 2.2, onde estão representadas as isothermas. Pode-se perceber que quanto mais distante do centro da fonte de calor, mais a temperatura tende a temperatura ambiente, T_0 .

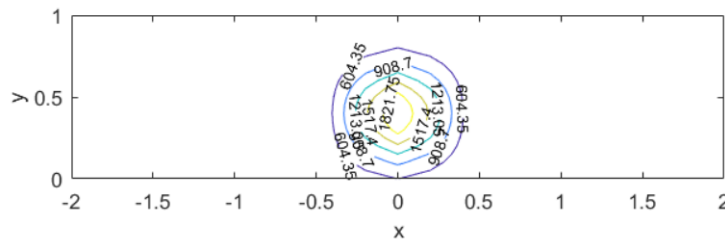


Figura 2.2: Campo de temperatura - isothermas em $t = 0$.

A Fig. 2.3 mostra o domínio computacional utilizado e as respectivas condições de contorno. O comprimento L do domínio é de 60 mm e o raio $D/2$ é de 3 mm . Vale lembrar que é um escoamento axi-simétrico, 2D.

As condições de contorno para as espécies químicas e para a temperatura são representadas abaixo:

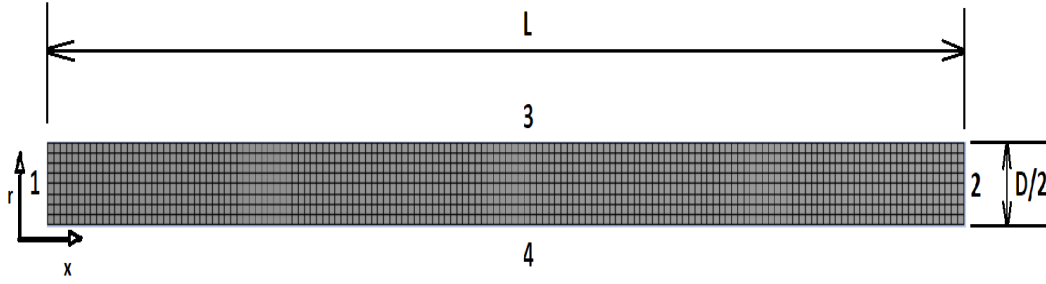


Figura 2.3: Malha com resolução de 150×8 pontos. 1- Entrada; 2- Saída; 3- Parede impermeável; 4- Simetria.

- Direção axial:

1. Entrada do tubo: $Y_i = 1$, $\theta = 0$, $v = 0$, $U(r) = 2U_0 \left[1 - \left(\frac{r}{D/2} \right)^2 \right]$
2. Saída do tubo: $\partial Y_i / \partial x = 0$, $\partial \theta / \partial x = 0$

- Direção radial:

1. Eixo de simetria: $\partial Y_i / \partial r = \partial \theta / \partial r = 0$, $v = 0$, $\frac{\partial u}{\partial r} = 0$
2. Parede do tubo:
 - (a) Parede adiabática: $\partial Y_i / \partial r = \partial \theta / \partial r = 0$
 - (b) Parede isotérmica: $\partial Y_i / \partial r = \theta = 0$, $u = v = 0$

A velocidade U_0 no centro do tubo inicialmente imposta foi de 0,4 m/s, acarretando em uma velocidade média do escoamento de $u_m = 0,226$ m/s. Para tal velocidade, o número de Reynolds é de aproximadamente $Re = 96$, o que indica que o regime é laminar.

2.5

Modelo numérico

2.5.1

Verificação da malha

Nesta seção, é verificado como o refinamento de malha influencia no tempo de simulação e nos resultados obtidos. Para um escoamento simples onde apenas ar escoa, uma malha mais refinada ou mais grosseira não faz diferença nos resultados. No entanto, quando ocorre combustão, uma malha grosseira não é capaz de captar corretamente os fenômenos que ocorrem.

A definição de uma malha correta e adequada para a resolução do problema é ampla e não única. Como o mecanismo de *flashback* estudado nesse projeto ocorre na região próxima a camada limite do escoamento, será necessário um refinamento de malha perto dessa região, visto que é a área

mais crítica. Além disso, próximo a região da chama, será realizada uma malha adaptativa visando captar, da melhor forma possível, os fenômenos físicos que ocorrem nessa região.

Para a verificação da independência de malha em um escoamento não reativo, é utilizado parede isotérmica, escoamento axi-simétrico, um perfil de velocidade parabólico na entrada e a condição de *outflow* na saída. Foram analisadas quatro malhas diferentes para testar a convergência de cada uma. A malha mais grosseira, como foi mostrado na Fig. 2.3, possui 150×8 pontos e as malhas seguintes foram refinadas por um fator de 2 em cada direção, até se atingir a malha mais refinada de 1200×60 pontos.

Na Fig. 2.4 pode-se observar o perfil de velocidade na saída, dado que na entrada foi imposto um perfil de velocidade de Poiseuille para 4 resoluções de malhas, 1200×60 , 600×30 , 300×15 e 150×8 pontos. É possível observar que os pontos praticamente se sobrepõem, o que demonstra a independência da malha para um caso simples onde apenas ar esco. Essa mesma convergência das quatro malhas não é esperada para a simulação envolvendo a combustão pois as variações das espécies químicas que ocorrem durante o processo ocorrem em regiões tão ínfimas da ordem de $5 \mu\text{m}$ que uma malha mais grosseira não consegue obter os resultados esperados.

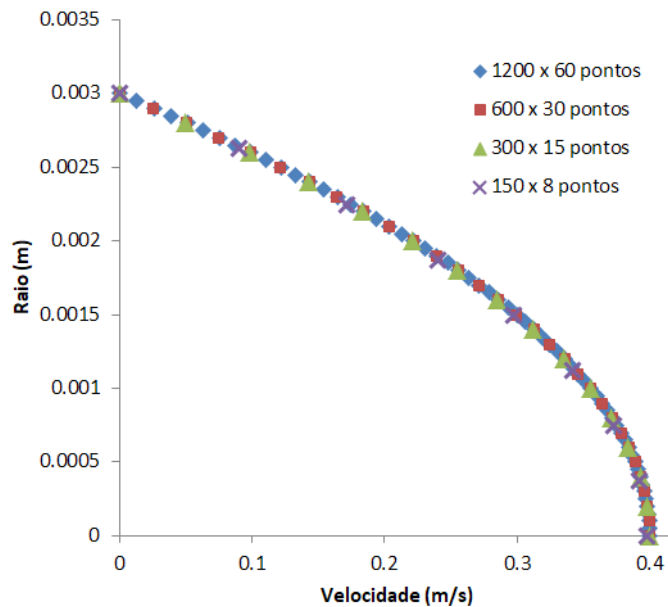


Figura 2.4: Perfil de velocidade na saída do domínio computacional para 4 resoluções de malha.

Na Fig. 2.5 pode-se observar, em escala logarítmica, a norma euclidiana da diferença entre a velocidade calculada e da solução exata em função do número de pontos da malha. Pela Fig. 2.5 é possível notar que para reduzir o erro da solução calculada em uma ordem de grandeza, é preciso refinar a malha

em aproximadamente duas ordens de grandeza. Essa informação é relevante para o refinamento na região da chama, que será necessário mais adiante, pois quantifica e prevê qual será a malha necessária para um determinado padrão de convergência do erro. Na Fig. 2.6 observa-se que o tempo de simulação cresce em três ordens de grandeza quando o refinamento é de duas ordens de grandeza. Dessa forma, pode-se estimar o tempo que a simulação levará de acordo com a resolução da malha necessária.

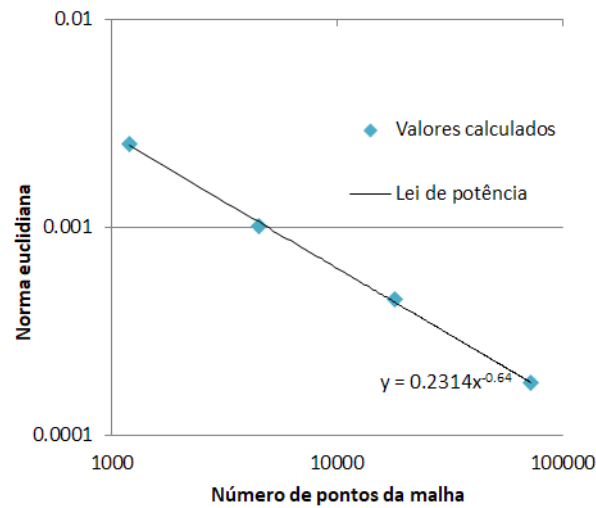


Figura 2.5: Norma euclidiana do erro da solução numérica como função do número de pontos da malha.

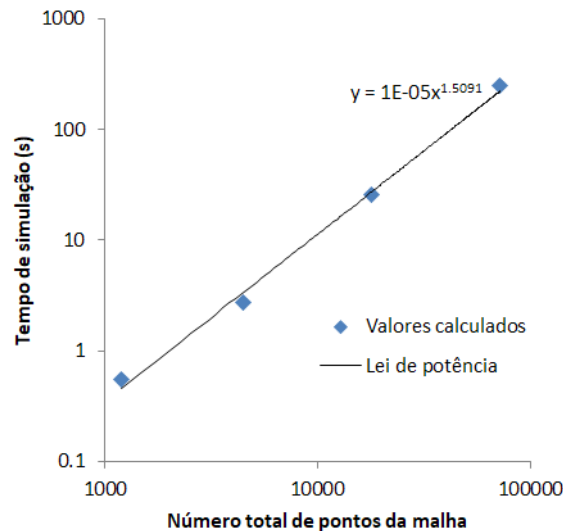


Figura 2.6: Tempo de simulação com função do número de pontos da malha.

2.5.2

Adaptação dinâmica da malha

Após a imposição das condições de contorno, iniciais e da verificação da independência da malha, foi realizada uma adaptação da malha de forma dinâmica para um escoamento reativo para melhor captar as transformações das espécies químicas durante a combustão. Na malha inicial, foi utilizado o tamanho de elemento de $150\ \mu\text{m}$ na direção axial e $100\ \mu\text{m}$ na direção radial.

A malha foi refinada em até 32 vezes o seu tamanho inicial na região da chama. O menor elemento, após o refinamento, possui um tamanho de $5\ \mu\text{m}$ na direção axial e $3\ \mu\text{m}$ na direção radial. O método utilizado para o refinamento foi de acordo com o gradiente de temperatura normalizado. A cada região que possui um gradiente de temperatura maior do que 0,3, em valor relativo a uma escala normalizada, a malha foi refinada. Para regiões com gradientes menores que 0,8, a malha foi revertida para condições de menor refinamento, com o intuito de exigir menos capacidade computacional.

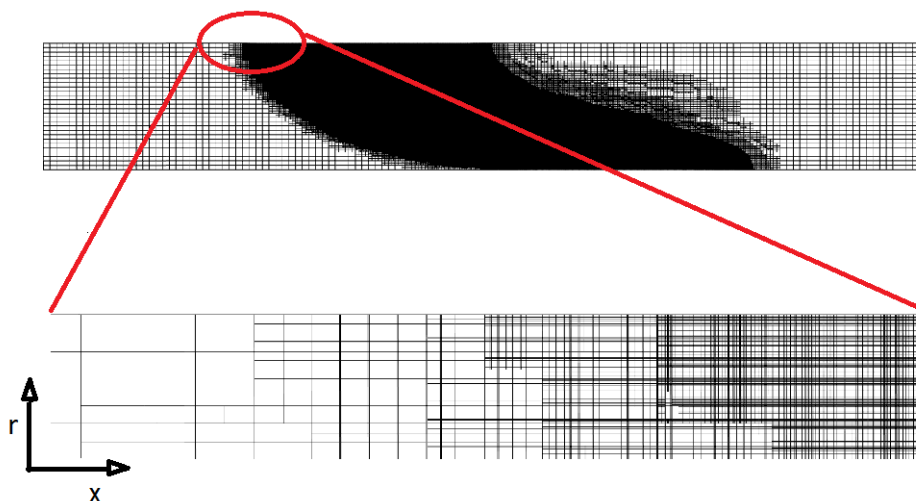


Figura 2.7: Ampliação na região da chama onde a malha é refinada.

Na Fig. 2.8 pode-se observar os contornos de CH_2 na região da chama. Nota-se a diferença entre os contornos de CH_2 para a malha inicial comparada a malha após o refinamento. Na região de máximo de CH_2 , a malha grosseira não é suficiente para realizar a correta reação da formação de espécies químicas minoritárias. Essas espécies químicas minoritárias como o CH_2 precisam de um tamanho de elemento de aproximadamente $5\ \mu\text{m}$ para poderem ser captadas corretamente. Isso pode ser visto pela diferença entre a linha vermelha bem definida na malha refinada, representando a região de máximo de CH_2 e os pontos locais de máximo na malha grosseira.

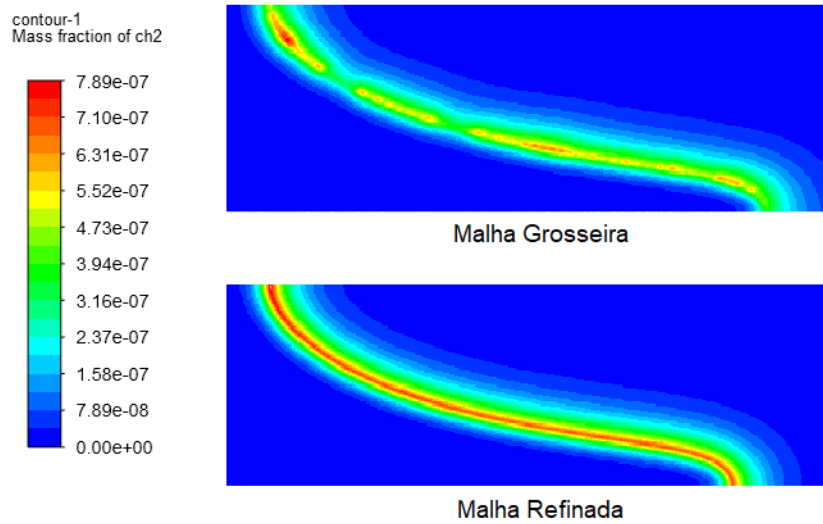


Figura 2.8: Comparação entre as frações mássicas de CH_2 para: malha grosseira - $\delta x = 75\mu\text{m}$, $\delta y = 50\mu\text{m}$; malha refinada - $\delta x = 5\mu\text{m}$, $\delta y = 3\mu\text{m}$.

3

Resultados e discussão

Neste capítulo são discutidas as influências das condições térmicas da parede na temperatura e nas componentes de velocidade e nas espécies químicas majoritárias e minoritárias da reação química com metano-ar na seção 3.1. Na seção 3.2 é mostrada a influência da velocidade média do escoamento no fenômeno de *flashback*.

3.1

Influência das condições de contorno térmicas na parede

Nesta seção, dois casos são analisados para comparação. O caso da parede adiabática, onde não há troca de calor e o caso de parede isotérmica, onde a temperatura da parede se mantém constante a 300K. Ambos os casos nessa seção, são analisados para uma mistura de metano e ar estequiométrica. Na entrada foi imposto um perfil de velocidade de Poiseuille, a uma temperatura de 300K e pressão atmosférica. Após a obtenção dos resultados para cada condição de contorno da parede, são analisadas como as propriedades do escoamento reativo variam entre parede adiabática e isotérmica.

A Fig 3.1 mostra os campos de temperatura e componentes de velocidade após 200 ms do início do escoamento da mistura metano-ar. As figuras da esquerda representam os resultados obtidos para o caso da parede isotérmica e as da direita, adiabática. É importante ressaltar que os campos das propriedades para a condição adiabática estão espelhados em relação aos campos da condição isotérmica. Na Fig. 3.1 (a), pode-se visualizar o campo de temperatura das duas condições térmicas na parede. O procedimento de representação do sistema de coordenadas nessa figura, x e r , é o mesmo até a Fig. 3.3. É possível perceber que os dois perfis de temperatura são diferentes. No caso isotérmico, as temperaturas são menores quando comparadas ao caso adiabático. O caso adiabático possui uma curvatura côncava na direção a montante do escoamento devido ao perfil parabólico de velocidade prescrito na fronteira de entrada. Já no isotérmico observa-se uma chama mais achatada.

A temperatura dentro do tubo de parede adiabática é maior, o que poderia ser esperado, já que não há troca de calor. Os perfis de temperatura da parede isotérmica possuem um formato mais achatado, com as maiores temperaturas se localizando no centro do tubo, pois como perto da parede isotérmica as temperaturas são menores, não ocorre combustão nessa região e

a temperatura não aumenta. Isso faz com que a combustão seja possível apenas em regiões mais distantes da parede, ou seja, mais próximas do centro.

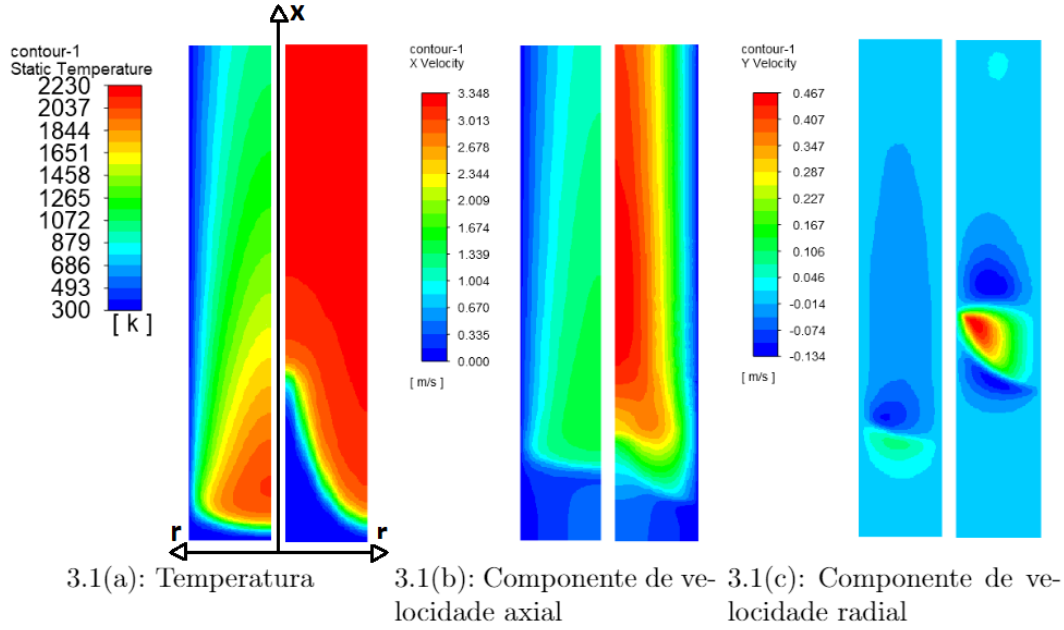


Figura 3.1: Comparação dos campos de temperatura e das componentes de velocidade para $\phi = 1$: parede isotérmica (esquerda); parede adiabática (direita).

As Fig. 3.1 (b) e (c) mostram o campo de velocidade para os dois casos de condição de contorno térmica na parede do tubo. Para o caso adiabático, a temperatura é maior, o que leva a uma menor densidade do escoamento e, por conseguinte, devido a conservação da massa, a maiores velocidades se comparadas ao caso de parede isotérmica. Pode-se perceber também que as maiores variações de velocidade acontecem na região onde ocorre a combustão. A componente radial do vetor velocidade aumenta localmente na região da chama e a medida que o escoamento se desenvolve a jusante da região de reação, as perturbações diminuem e a componente radial da velocidade torna-se uniforme. Esse aumento na região da chama acontece pois como a densidade da mistura nessa região de alta temperatura diminui, a velocidade precisa aumentar para satisfazer a equação de conservação de massa.

A Fig. 3.2 mostra os campos de fração mássica das espécies químicas majoritárias. As figuras da esquerda representam a condição de contorno de parede isotérmica e as da direita representam a condição adiabática. Na Fig. 3.2 (a), pode-se perceber que o CH_4 é consumido mais uniformemente no caso isotérmico, o que está associado à distribuição de temperatura ter uma forma mais plana do que o adiabático. Conforme o CH_4 vai sendo consumido, o CO e o CO_2 vão sendo produzidos, como pode ser visto nas Fig 3.2 (b) e (c).

Na Fig 3.2 (b), o CO tem um máximo de produção na região onde a chama se localiza. Após a região de alta temperatura, a fração mássica de CO diminui. É importante ressaltar que todo o CO é totalmente consumido apenas no caso isotérmico e isso pode ser explicado baseado no princípio de Le Chatelier. O princípio de Le Chatelier define que um sistema em equilíbrio que sofre alguma alteração de temperatura, pressão, volume ou concentração, tende para um novo estado de equilíbrio. No caso da combustão, o sistema sofre um desequilíbrio na temperatura e o novo equilíbrio depende da temperatura final dos gases queimados. Como no caso de parede isotérmica a temperatura a jusante tende a diminuir novamente devido a troca de calor, o equilíbrio térmico é deslocado para que CO_2 seja formado a partir do CO. Já na condição térmica de parede adiabática, como não há troca de calor dentro do tubo, as temperaturas são maiores e mais CO é observado no estado de equilíbrio. Isso pode ser efetivamente confirmado na Fig 3.2 (c) pois a fração mássica de CO_2 aumenta a jusante do escoamento no caso de parede adiabática.

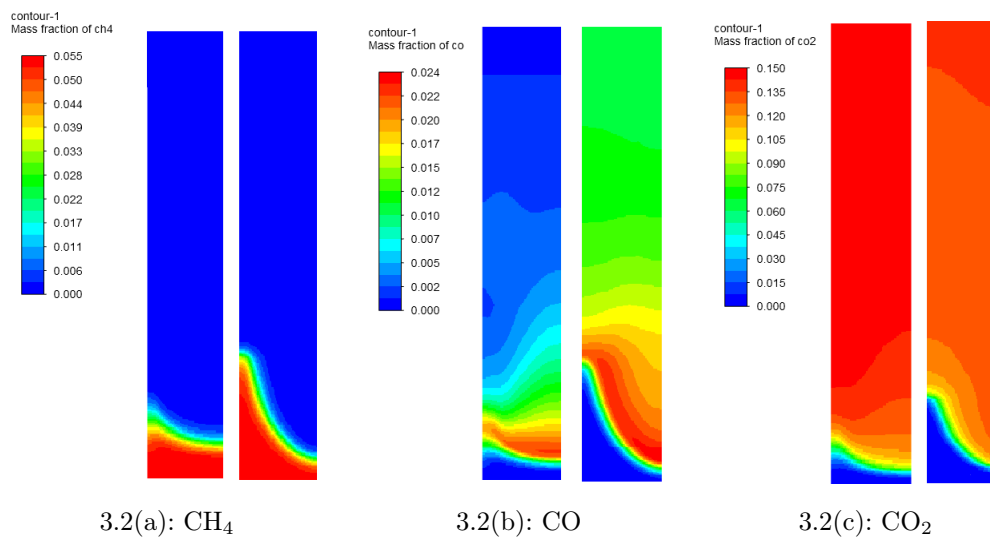


Figura 3.2: Comparação do campo de fração mássica das espécies químicas majoritárias: parede isotérmica (esquerda); parede adiabática (direita).

A Fig. 3.3 mostra os campos de fração mássica das espécies químicas minoritárias. As figuras da esquerda representam a condição de contorno da parede isotérmica e as da direita, a condição adiabática. Na Fig 3.3(a) e (b) é possível observar que o radical H e OH possuem um máximo na região da chama. Conforme o escoamento se desenvolve, a jusante da região de reação, H e OH diminuem sua concentração progressivamente a medida em que ocorre recombinação com outros radicais para formar ligações mais estáveis. Pode-se perceber que o CH_2 na Fig 3.3 (c) possui um máximo de produção em uma região bem pequena da chama. Para explicar os campos de espécies químicas,

é necessário descrever brevemente o processo que ocorre durante a combustão. A Fig. 3.4 exemplifica o processo de reação química detalhada da combustão do metano. O retângulo representa as principais reações químicas que ocorrem no processo de combustão. As espécies secundárias são ilustradas a direita e são mais importantes quando a riqueza da mistura combustível/ar é superior a estequiométrica. O CH_2 rapidamente reage com o OH formando CH_2O , uma espécie química intermediária na produção de CO_2 e H_2O . Além disso, o CH_2 também reage com O e O_2 formando CO e CO_2 .

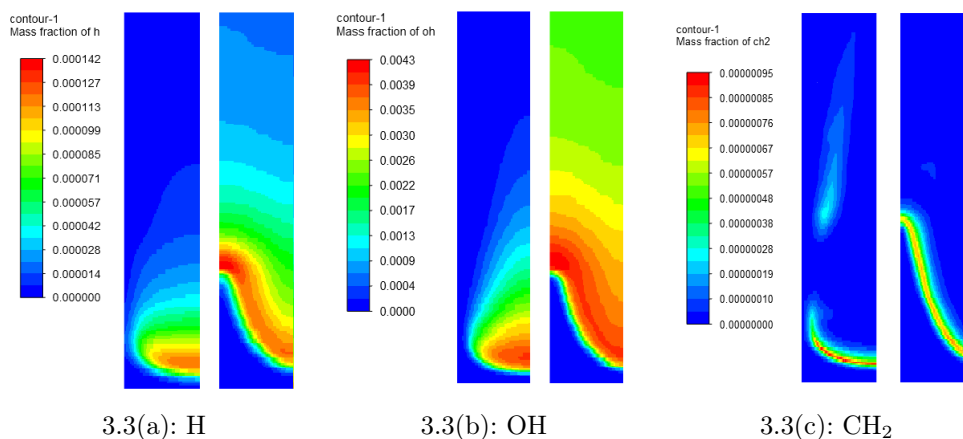


Figura 3.3: Comparação do campo de fração mássica das espécies químicas minoritárias: isotérmico (esquerda); adiabático (direita).

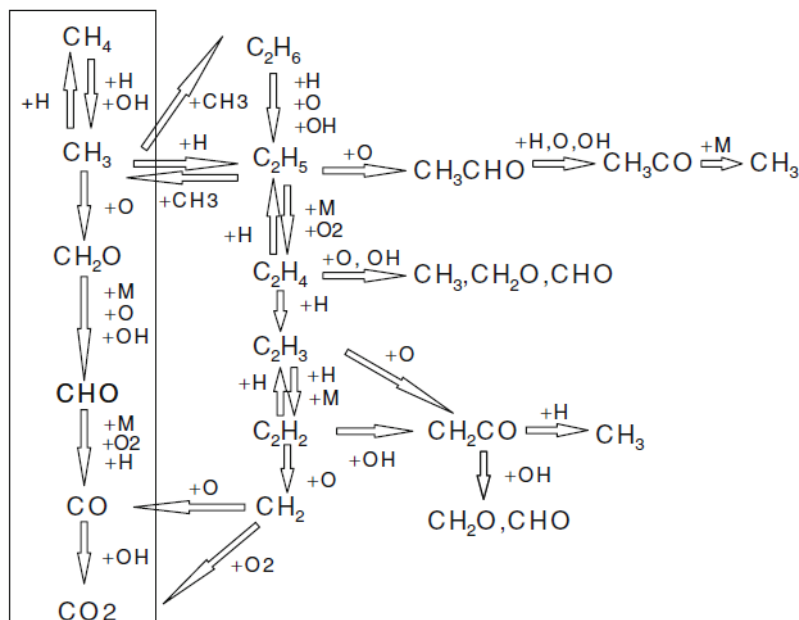


Figura 3.4: Esquema da reação química detalhada da combustão do metano [6].

3.2

Influência da velocidade de entrada do escoamento

3.2.1

Riqueza da mistura: $\phi = 1$

Na seção 1.3, foi mencionado que a velocidade da chama plana é um dos fatores que determinam se ocorrerá o retorno da chama. Na seção 3.1, as influências das condições de contorno na parede foram analisadas para uma velocidade média na entrada do tubo de 0,226 m/s. Para tal velocidade, ocorre o *flashback* pois a velocidade da chama plana, de 0,4 m/s, é maior do que a velocidade média do escoamento de 0,226 m/s. A fim de ilustrar a influência da velocidade da mistura sobre a posição da chama no tubo, a Fig. 3.5 mostra a posição desta após 200 ms de simulação para o caso estequiométrico ($\phi = 1$). O campo de temperatura mostrado à esquerda é a região de alta temperatura inicial que promove o processo de combustão. O campo de temperatura mostrado no centro é aquele correspondente a velocidade média do escoamento de 0,667 m/s. A direita pode ser observado o resultado obtido para uma velocidade média do escoamento de 0,226 m/s. Pode-se perceber que quando a velocidade média do escoamento é maior do que a velocidade S_L , a chama permanece estacionária no tubo e não ocorre *flashback*.

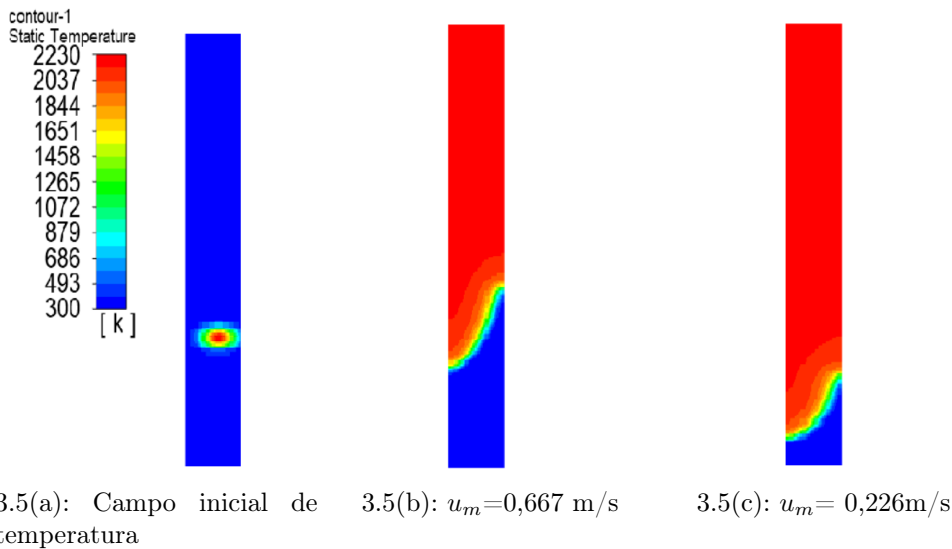
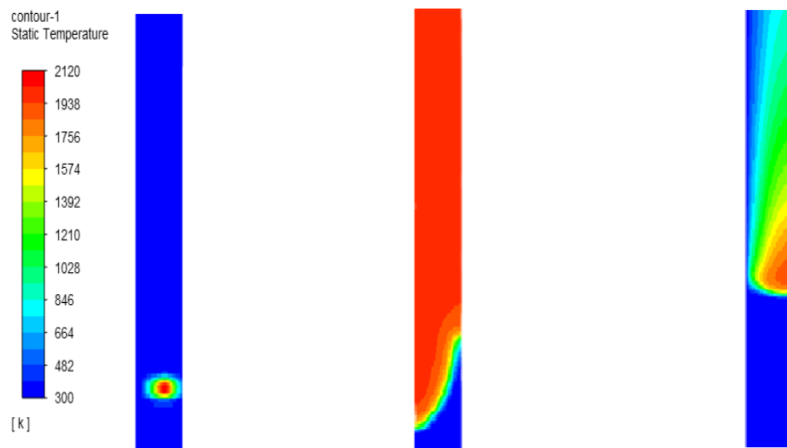


Figura 3.5: Campos de temperatura obtidos durante o fenômeno de *flashback* com $\phi = 1$. 3.5(a)- Instante inicial ; 3.5(b)- Velocidade média do escoamento de 0,667 m/s (centro); 3.5(c)- Velocidade média do escoamento de 0,226 m/s (direita).

3.2.2

Riqueza da mistura: $\phi = 0,8$

Nesta seção são analisados os casos para uma riqueza ϕ igual a 0,8 para paredes adiabáticas e isotérmicas. A velocidade média do escoamento foi mantida a 0,226 m/s para poder verificar como a alteração da riqueza da mistura altera os limites de *flashback*. Na Fig. 3.6 pode-se visualizar os campos de temperatura inicial a esquerda, de temperatura após a combustão para o caso de parede adiabática no centro e de temperatura após a combustão para o caso de parede isotérmica a direita. Para o caso de uma parede adiabática a velocidade média de 0,226 m/s do escoamento é o suficiente para impedir a chama de se propagar dentro do tubo, o que não ocorreu para o caso da condição estequiométrica. Isso ocorre porque a riqueza da mistura de 0,8 diminui a temperatura da chama e consequentemente diminui a velocidade de propagação da mesma. Com menores velocidades de propagação, menores as chances de ocorrer *flashback*. No caso de paredes isotérmicas, o resultado mostra um instante em que a chama está sendo soprada para fora do tubo. A transferência de calor da chama para o tubo reduz a sua velocidade de propagação, quando comparada à de uma chama adiabática. Portanto, a velocidade do escoamento é muito maior do que a velocidade de propagação da chama plana, levando-a a se mover a jusante do escoamento.



3.6(a): Campo inicial de temperatura

3.6(b): $u_m=0,4$ m/s3.6(c): $u_m=0,4$ m/s

Figura 3.6: Comparação entre os campos de temperatura para uma velocidade média do escoamento de 0,4 m/s com $\phi = 0,8$. 3.6(a)- Instante inicial ; 3.6(b)- Parede adiabática; 3.6(c)- Parede isotérmica.

4

Conclusões e perspectivas

Neste trabalho são realizadas simulações da combustão de pré-misturas metano-ar onde a cinética química é feita de forma detalhada. Para isso, é empregado o modelo DRM 19 [17], onde a cinética química envolve 19 espécies químicas para descrever a combustão. Após a realização de simulações com uma malha grosseira de 1200×60 pontos, é realizada uma adaptação de malha para melhor representar as reações químicas minoritárias que não são corretamente descritas na malha grosseira. A adaptação é baseada no gradiente de temperatura. Em seguida, são analisadas como as condições de contorno de paredes isotérmica e adiabáticas, a velocidade média do escoamento e a riqueza da mistura influenciam nas espécies químicas e no *flashback*.

- A adaptação de malha foi necessária para captar fenômenos que ocorrem na região da chama. Sem a adaptação, algumas reações químicas não seriam representadas corretamente.
- O perfil de temperatura da chama muda consideravelmente entre paredes adiabáticas e isotérmicas devido a troca de calor.
- As frações mássicas das espécies químicas majoritárias e minoritárias segue a ordem de formação e consumo controlada pelo mecanismo de cinética química da combustão.
- As componentes de velocidade axial e radial são consideravelmente maiores no caso adiabático pois como as temperaturas são mais elevadas, a densidade dos gases é menor e a velocidade aumenta para conservar a massa.
- Todo o CO se transforma em CO₂ apenas no caso isotérmico. No adiabático há uma menor concentração de CO₂ nos gases queimados. Isso é explicado pelo princípio de Le Chatelier que define que um novo equilíbrio é formado quando há uma alteração do estado inicial do sistema.
- Para uma mistura estequiométrica de metano-ar, foi observado que ocorre *flashback* para velocidades médias do escoamento menores do que a velocidade de 0,4 m/s da chama plana.
- Para uma mistura de riqueza igual a 0,8 não ocorreu *flashback* para o caso de parede adiabática com uma velocidade média do escoamento de 0,226 m/s, o que demonstra a influência da riqueza da mistura na velocidade

da chama plana. Para parede isotérmica, os resultados mostram que a chama é soprada para fora do tubo, demonstrando a influência da troca de calor pelas paredes no retorno de chama.

- Para trabalhos futuros, é interessante avaliar como varia a propensão ao *flashback* com a adição de CO_2 nos gases pré misturados. Além disso, é pertinente estudar como a turbulência altera os limites de *flashback*, visto que as velocidades da chama plana em um escoamento turbulento são mais difíceis de serem previstas.

Referências Bibliográficas

- [1] KALANTARI, A.; MCDONELL, V. Boundary layer flashback of non-swirling premixed flames: Mechanisms, fundamental research, and recent advances. *Progress in Energy and Combustion Science*, 61:249–292, 2017.
- [2] LEE, S.T.; T'LEN, J. S. A numerical analysis of flame flashback in a premixed laminar system. *Combustion and Flame*, 48:273–285, 1982.
- [3] MALLENS, R. M. M.; DE GOEY, L. P. H. Flash-back of laminar premixed methane/air flames on slit and tube burners. *Combustion Science and Technology*, 136(1-6):41–54, 1998.
- [4] KURDYUMOV, V. ET AL. Experimental and numerical study of premixed flame flashback. *Proceedings of the Combustion Institute*, 31(1):1275–1282, 2007.
- [5] CHAKRABORTY, S.; MUKHOPADHYAY, A.; SEN, S. Interaction of Lewis number and heat loss effects for a laminar premixed flame propagating in a channel. *International Journal of Thermal Sciences*, 47(1):84–92, 2008.
- [6] MCALLISTER, S. ; CHEN, J. ; FERNANDEZ-PELLO, A. *Fundamentals of combustion processes*, volume 302. Springer, 2011.
- [7] KURDYUMOV, V. N.; FERNANDEZ, E.; LINAN, A. Flame flashback and propagation of premixed flames near a wall. *Proceedings of the Combustion Institute*, 28(2):1883–1889, 2000.
- [8] KIM, N.I.; MARUTA, K. A numerical study on propagation of premixed flames in small tubes. *Combustion and Flame*, 146(1-2):283–301, 2006.
- [9] PATANKAR, S.V. Numerical heat transfer and fluid flow(book). *Washington, DC, Hemisphere Publishing Corp., 1980. 210 p*, 1980.
- [10] KURDYUMOV, V.N. Lewis number effect on the propagation of premixed flames in narrow adiabatic channels: Symmetric and non-symmetric flames and their linear stability analysis. *Combustion and Flame*, 158(7):1307–1317, 2011.
- [11] KURDYUMOV, V.N.; JIMÉNEZ, C. Propagation of symmetric and non-symmetric premixed flames in narrow channels: Influence of conductive heat-losses. *Combustion and Flame*, 161(4):927–936, 2014.

- [12] LIU, J. ET AL. Numerical study of the chemical, thermal and diffusion effects of H₂ and CO addition on the laminar flame speeds of methane–air mixture. *International Journal of Hydrogen Energy*, 40(26):8475–8483, 2015.
- [13] HOFERICHTER, V.; HIRSCH, C.; SATTELMAYER, T. Prediction of boundary layer flashback limits of laminar premixed jet flames. In *ASME Turbo Expo 2018: Turbomachinery Technical Conference and Exposition*. American Society of Mechanical Engineers Digital Collection, 2018.
- [14] VIEIRA, M. C. J.; FIGUEIRA DA SILVA, L. F. Determination of the CO₂ and N₂ dilution influence on flame flashback limits on methane and propane combustible mixtures. *18th Brazilian Congress of Thermal Sciences and Engineering*, 2020 submitted.
- [15] POINSOT, T. ; VEYNANTE, D. *Theoretical and numerical combustion*. RT Edwards, Inc., 2005.
- [16] ANSYS. ANSYS FLUENT 12.0 Theory guide. Disponível em: <https://www.afs.enea.it/project/neptunius/docs/fluent/html/th/node371.htm>, 2009.
- [17] KAZAKOV, A.; FRENKLACH, M. Reduced reaction sets based on gri-mech 1.2. *University of California at Berkeley, Berkeley, CA*. Disponível em: <http://combustion.berkeley.edu/drm/drm19.dat>.