



Universidade de Brasília - UnB
Faculdade UnB Gama - FGA
Engenharia de Energia

Simulação CFD de chamas de difusão laminares de metano com mecanismo de reação do SMOKE

Autor: Matheus Henrique Antunes de Sousa
Orientador: Prof. Dr. Fábio Alfaia da Cunha

Brasília, DF
2023



Matheus Henrique Antunes de Sousa

Simulação CFD de chamas de difusão laminares de metano com mecanismo de reação do SMOOKE

Monografia submetida ao curso de graduação em (Engenharia de Energia) da Universidade de Brasília, como requisito parcial para obtenção do Título de Bacharel em (Engenharia de Energia).

Universidade de Brasília - UnB

Faculdade UnB Gama - FGA

Orientador: Prof. Dr. Fábio Alfaia da Cunha

Brasília, DF

2023

Matheus Henrique Antunes de Sousa

Simulação CFD de chamas de difusão laminares de metano com mecanismo de reação do SMOOKE/ Matheus Henrique Antunes de Sousa. – Brasília, DF, 2023-
61 p. : il. (algumas color.) ; 30 cm.

Orientador: Prof. Dr. Fábio Alfaia da Cunha

Trabalho de Conclusão de Curso – Universidade de Brasília - UnB
Faculdade UnB Gama - FGA , 2023.

1. Palavra-chave01. 2. Palavra-chave02. I. Prof. Dr. Fábio Alfaia da Cunha.
II. Universidade de Brasília. III. Faculdade UnB Gama. IV. Simulação CFD
de chamas de difusão laminares de metano com mecanismo de reação do SMOOKE

CDU 02:141:005.6

Matheus Henrique Antunes de Sousa

Simulação CFD de chamas de difusão laminares de metano com mecanismo de reação do SMOOKE

Monografia submetida ao curso de graduação em (Engenharia de Energia) da Universidade de Brasília, como requisito parcial para obtenção do Título de Bacharel em (Engenharia de Energia).

Trabalho aprovado. Brasília, DF, 24 de julho de 2023:

Prof. Dr. Fábio Alfaia da Cunha
Orientador

**Prof. Dr. Augusto César de Mendonça
Brasil**
Convidado 1

Prof. Dr. Luciano Gonçalves Noletto
Convidado 2

Brasília, DF
2023

Agradecimentos

Ao meu orientador, Professor Fábio Alfaia da Cunha por toda a paciência, boa vontade e disponibilidade.

A meus pais, Mateus e Aldenora, pelo apoio incondicional.

A querida amiga Thais por estar ao meu lado nos momentos mais difíceis.

Aos meus colegas Vinícius Bueno e Gustavo Carvalho aos quais sou muito grato por todo o suporte oferecido nessa jornada.

A Deus, por todas as pessoas as quais tenho por agradecer, e por me fazer chegar até aqui.

Resumo

O foco central desse trabalho de conclusão de curso é a simulação de chamas difusivas laminares de metano, utilizando modelos de reação globais de um e dois passos. Para atingir esse objetivo, foram estabelecidos objetivos específicos, incluindo uma revisão dos fundamentos teóricos relacionados à combustão, a cinética química das reações e as equações de dinâmica dos fluidos essenciais para resolver o problema. As equações que descrevem o fluxo da chama foram modeladas, assim como os mecanismos de reação utilizados. O combustor de Mitchell foi selecionado como o cenário para a simulação, que foi conduzida no ambiente MATLAB, com malhas geradas pelo Ansys Gambit. Uma das malhas foi escolhida para validar os resultados, comparando-os com dados experimentais provenientes da tese de doutorado de Reginald Mitchell. Os resultados apresentam comparações entre os modelos de um e dois passos e os dados experimentais, destacando as semelhanças e diferenças entre os resultados simulados e os observados experimentalmente.

Palavras-chaves: Metano. Chamas difusivas. Combustão. Cinética química

Abstract

The central focus of this study is the simulation of laminar diffusive methane flames using one-step and two-step global reaction models. To achieve this objective, specific goals were established, including a review of theoretical fundamentals related to combustion, chemical kinetics of reactions, and the governing fluid dynamics equations necessary to solve the problem. The equations describing the flow of the flame were modeled, as well as the reaction mechanisms used. The Mitchell burner was chosen as the simulation scenario, which was conducted in the MATLAB environment with meshes generated by Ansys Gambit. One of the meshes was selected to validate the results, comparing them with experimental data from Reginald Mitchell's doctoral thesis. The results present comparisons between the one-step and two-step models and the experimental data, highlighting the similarities and differences between the simulated and observed experimental results.

Key-words: Methane. Diffusion flames. Combustion. Chemical kinetics.

Lista de ilustrações

Figura 1 – Algoritmo para simulação numérica. Fonte: (CUNHA; VERAS, 2021) .	36
Figura 2 – Passos de reação. Fonte: (SMOOKE; MITCHELL; KEYES, 1986) . . .	43
Figura 3 – Domínio do combustor de Mitchell. Fonte: (FERRACUTI, 2020)	49
Figura 4 – Malha grossa	51
Figura 5 – Malha média	51
Figura 6 – Malha fina	51
Figura 7 – Malha média em $Z = 1,2$ cm	54
Figura 8 – Malha média em $Z = 2,4$ cm	54
Figura 9 – Malha média em $Z = 5$ cm	54
Figura 10 – Malha média ao longo do eixo Z	54
Figura 11 – Resultado final em $Z = 1,2$ cm	55
Figura 12 – Resultado final em $Z = 2,4$ cm	55
Figura 13 – Resultado final em $Z = 5$ cm	55
Figura 14 – Resultado final ao longo do eixo Z	55
Figura 15 – Concentrações	55
Figura 16 – Combustor de Mitchell Fonte: (MITCHELL, 1975)	61

Lista de tabelas

Tabela 1 – Equações de conservação usadas na simulação	35
Tabela 2 – Condições de contorno para as variáveis do fluxo.	49
Tabela 3 – Configurações da simulação	50
Tabela 4 – Características das Malhas	51
Tabela 5 – Resultados de convergência	52

Lista de abreviaturas e siglas

Re	Número de Reynolds
CFD	Computational Fluid Dynamics
MATLAB	Matrix Laboratory
CVFEM	Control Volume Finite Element Method
CH_4	Metano
CO_2	Dióxido de Carbono
CO	Monóxido de Carbono
F	Fuel (Combustível)
H_2	Gás Hidrogênio
H_2O	Água
LES	Large Eddy Simulation
O_2	Oxigênio
	CPU <i>Centralprocessingunit</i>
	RAM <i>Ramdomacesssmemory</i>

Lista de símbolos

α	Taxa de Difusividade Térmica
atm	Pressão atmosférica
bar	Unidade de pressão = 100000 Pa
C	Concentração
C_p	Calor Específico
D	Coefficiente de Difusão
g	Aceleração da Gravidade = 9.81 m/s ²
$\Gamma\phi$	Coefficiente Difusivo
h	Entalpia / Constante de Planck
i	Espécie Química
J	Joule
k	Coef. da Taxa de Reação Bimolecular / Condutividade Térmica / Quilo
K	Kelvin
k_B	Constante de Boltzmann = 1.381×10^{-23} J/K
k_G	Coefficiente de Taxa Global
k_f	Coefficiente de Taxa de Reação Direta
k_r	Coefficiente de Taxa de Reação Reversa
L	Comprimento / Litro
ms	Milisegundos
M	Molécula M qualquer / Massa Molar
P	Pressão
Pa	Pascal
π	Pi

Φ	Razão de Equivalência
q	Variável da Taxa de Progresso
q_{rad}	Perda de Calor por Radiação
R	Constante Universal dos Gases
Re	Número de Reynolds
ρ	Massa Específica
s	Segundos
S_ϕ	Termo Fonte
σ	Diâmetro Esférico da Molécula / Constante de Stefan-Boltzmann
T	Temperatura
u	Velocidade no vetor \mathbf{x}
v	Coeficiente Estequiométrico dos Produtos / Velocidade no vetor \mathbf{y}
v	Coeficiente Estequiométrico dos Reagentes
μ	Viscosidade Específica / Razão entre Massas
V	Velocidade
W	Massa Molecular
$\dot{\omega}$	Taxa de Produção
X	Fração Molar
Y	Fração de Massa

Sumário

	Introdução	21
1	OBJETIVOS	27
1.1	Objetivo Geral	27
1.2	Objetivos específico	27
2	FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	29
2.1	Combustão	29
2.2	Chama misturada e sem pré-mistura	29
2.3	Chamas laminares e turbulenta	29
2.4	Mecanismos de combustão	30
2.5	Equações de conservação	31
2.5.1	Equação da conservação da massa	31
2.5.2	Equação da conservação da quantidade de movimento	31
2.5.3	Equação da conservação da massa de espécies químicas	32
2.5.4	Equação da conservação de energia	32
2.6	Propriedades físico-químicas	33
3	METODOLOGIA	35
3.1	Cálculo das velocidades	37
3.2	Cálculo das composições das misturas gasosas	37
3.3	Mecanismos	37
3.3.1	Mecanismo de passo duplo	38
3.4	Cálculo dos termos de fonte das espécies químicas	40
3.4.1	Mecanismo reduzido	43
3.4.1.1	Concentrações	43
3.4.1.2	Energia livre de Gibbs	44
3.4.1.3	Constantes de equilíbrio K_c e K_p	45
3.4.1.4	Constante de taxa de proporcionalidade	45
3.4.1.5	Equações com o terceiro corpo	47
3.4.1.6	Taxa de reação	47
3.4.1.7	Taxa líquida da espécie	48
3.4.1.8	Concentração final	48
4	RESULTADOS E DISCUSSÃO	49
4.1	Malhas	50

4.2	Resultados de convergência	51
4.3	Resultados da simulação	52
5	CONCLUSÃO	57
	REFERÊNCIAS	59
5.1	APÊNDICE A	61

Introdução

A combustão desempenha um papel fundamental em diversas áreas de nossas vidas, sendo a principal fonte de energia para a geração de eletricidade, transporte, manufatura, aquecimento doméstico e culinária. No entanto, é importante reconhecer que a combustão também pode levar a eventos destrutivos, como explosões e incêndios, e seu uso descontrolado pode gerar efeitos adversos à saúde, como a contaminação do ar e da água (MCALLISTER, 2011).

De acordo com o relatório da Agência Internacional de Energia sobre as emissões de gases de efeito estufa de 2020, a matriz energética global é composta por 26,8% de carvão e xisto betuminoso, 23,7% de gás natural, 29,5% de petróleo e seus derivados, 9,8% de lixo e biocombustíveis, 5% de energia nuclear e 5,8% de outras formas de energia. A partir desses dados, podemos observar que aproximadamente 89,8% da energia mundial é gerada por meio de reações de combustão, o que ressalta a importância do estudo desse processo para a matriz energética global e o controle de poluentes.

Há muitos efeitos indesejados da combustão e nossa sociedade pode ser afetada por alguns deles, como descrito por (KANURY, 1986): 'Incêndios florestais destroem milhares de árvores e provocam milhões de dólares em prejuízos todos os anos, a probabilidade de incêndios descontrolados em zonas metropolitanas industriais é notória, e mais importante é a poluição do ar que rapidamente degrada o meio ambiente de modo a inibir a vida na terra. Esses e outros problemas são criados pela demanda de uma sociedade altamente industrializada, mas podem ser resolvidos pela tecnologia'.

Em relação ao meio ambiente, Seinfeld (SEINFELD; PANDIS, 1998) descreve três parâmetros para o estudo de poluentes: a geração e controle de poluentes na fonte, o transporte, dispersão, transformação química e remoção de espécies na atmosfera, e os efeitos dos poluentes em seres humanos, animais e vegetação. O estudo das propriedades da combustão abrange uma ampla gama de fatores que visam o aperfeiçoamento de técnicas, a preservação do meio ambiente e o bem-estar humano.

A combustão é uma reação química exotérmica entre um combustível e um oxidante, que gera calor, luz e vários subprodutos. O estudo dos processos de combustão pode ser de grande ajuda na melhoria da eficiência energética de máquinas e dispositivos que operam por meio desse processo (LAW, 2006). A escolha do combustível adequado depende de vários fatores, como o conteúdo de energia por unidade de massa ou volume para aplicações que envolvem limitação de peso ou espaço, segurança em termos de manipulação e queima do combustível nas condições de projeto, e propriedades da combustão e do combustível, uma vez que diferentes processos possuem especificidades distintas em

relação às características da combustão e preço (LAW, 2006).

O gás natural é um dos combustíveis gasosos mais utilizados atualmente, encontrado comprimido em rochas porosas ou formações de xisto seladas no subsolo. Por sua vez, o biogás é formado pela digestão anaeróbica de material orgânico e é produzido em diversos locais, desde lixões municipais até dejetos de animais. Ambos são amplamente utilizados na geração de energia e em sistemas de aquecimento. O metano, presente em ambos os combustíveis, pode compor até 96% de sua composição (MCALLISTER, 2011).

O metano apresenta características particulares, como alta temperatura de ignição, baixa velocidade de propagação da chama e baixa reatividade, tornando-o um composto de fácil manipulação e com maior segurança operacional em comparação a outros combustíveis (TURNS, 2012). Além disso, a cinética química do metano é amplamente estudada e, portanto, bem compreendida (TURNS, 2012).

A combustão gasosa envolve um combustível e oxidante, ambos em fase gasosa. Existem duas categorias para esse tipo de combustão: a combustão pré-mistura, na qual os reagentes estão misturados antes da combustão ocorrer, e a combustão sem pré-mistura, também conhecida como combustão difusa, na qual o combustível e o oxigênio são conduzidos à zona de combustão por canais de fluxo separados e unidos pelo processo de difusão e mistura antes da combustão (VEERSTEG; MALALASEKARA, 2007).

De acordo com (WARNATZ; MAAS; DIBBLE, 2006), a pesquisa de combustão no passado era direcionada pela mecânica dos fluidos, que incluía em seus cálculos o valor global de calor liberado em uma reação química. Esse calor era frequentemente descrito pela termodinâmica, que considerava reações químicas infinitamente rápidas. Essa abordagem foi útil para o desenvolvimento de processos de combustão estacionários, mas insuficiente para o tratamento de processos de regimes transientes, como ignição e extinção da chama, além da formação de poluentes.

Dentro das aplicações atuais da combustão, é de grande importância prever o fluxo, as temperaturas, as espécies resultantes e outros dados de emissões gasosas, como o CO₂, em diversos sistemas de combustão. A modelagem computacional e o uso de mecanismos de combustão podem ser de grande valia na obtenção desses dados (VEERSTEG; MALALASEKARA, 2007).

No estudo conduzido por (MITCHELL; SAROFIM; CLOMBURG, 1980), chamas difusivas laminares de metano foram investigadas, validando assim o modelo *flamesheet* proposto por (BURKE; SCHUMANN, 1928). A validação foi realizada sob a remoção das restrições relacionadas aos efeitos de convecção livre, termodinâmica variável e propriedades de transporte. O artigo abordou a caracterização da macroestrutura da chama, bem como os efeitos das taxas de fluxo, equivalência e tamanho do bocal nos campos térmicos e aerodinâmicos em chamas confinadas e axisimétricas.

Em 1986, (SMOOKE; MITCHELL; KEYES, 1986) introduziram uma inovadora solução numérica para um domínio bidimensional caracterizado por simetria axial em chamas laminares difusivas, conforme registrado em sua publicação. Nesse estudo, utilizaram um mecanismo composto por 16 espécies e 42 passos de reações químicas para a combustão do metano, abrindo caminho para a avaliação abrangente de diversos resultados, como dimensões da chama, temperatura, frações mássicas e molares, linhas de corrente, vorticidade, entre outros.

Utilizando o método da variável primitiva de Newton, (XU; SMOOKE, 1993) realizou cálculos em chamas difusivas laminares. Observou-se que esse método foi significativamente mais rápido em comparação com o método de Newton baseado na função corrente-vorticidade e o algoritmo SIMPLER. Uma das principais vantagens do método estudado foi a eliminação das incertezas relacionadas às condições de contorno da vorticidade.

O estudo conduzido por (PETERS; KOCK, 1998) é essencial para avançar a compreensão da combustão premixada de metano em motores de ignição por centelha. A introdução do modelo de chama laminar pelos autores aprofunda a análise da dinâmica dessa combustão, levando em consideração fatores críticos como temperatura, pressão e composição do combustível. Essa pesquisa representa uma contribuição significativa ao desenvolvimento de modelos mais precisos para a combustão em motores a gás natural, sendo uma referência importante para estudos que buscam aprimorar o desempenho e a eficiência desses motores.

Em suas análises, (CLARAMUNT et al., 2004) investigou a influência do nível de mistura em vários submodelos matemáticos em um co fluxo parcialmente misturado, especialmente em relação à formação de poluentes, usando simulações numéricas. Os estudos foram conduzidos em chamas laminares de metano com cinco níveis distintos de pré-mistura. Uma das principais conclusões destacou o impacto significativo da troca de calor por radiação, enquanto a difusividade térmica não demonstrou uma influência tão notável. Além disso, foi observado que a utilização de um número de Lewis fixo reduziu o tempo de simulação em 25%, embora tenha resultado em uma superestimação do tamanho e da largura da chama durante a simulação.

O artigo de (SILVA; FRANÇA; VIELMO, 2007) apresenta uma simulação numérica da combustão não-premixada de gás natural em ar atmosférico em uma câmara cilíndrica de simetria axial. O foco está no efeito da radiação térmica nos campos de temperatura, concentração de espécies químicas e transferência de calor. A simulação utiliza equações de conservação de massa, energia, momento e espécies químicas. A troca de radiação térmica é calculada por meio do método zonal, e a dependência do coeficiente de absorção do gás na radiação é resolvida pelo modelo de somatório ponderado de gases cinzentos. A turbulência é modelada pelo modelo k- padrão, e as reações químicas são descritas pelo

modelo E-A (Eddy Breakup-Arrhenius). O método de volumes finitos é empregado para resolver as equações diferenciais. Os resultados incluem a determinação da região de combustão, distribuição de espécies químicas, campos de velocidade e taxa de transferência de calor por convecção e radiação. Os resultados indicam que a radiação térmica influencia fortemente o campo de temperatura e a transferência de calor, mas tem um efeito menos significativo nas taxas de reações químicas.

Mais tarde, os pesquisadores (CUOCI et al., 2013) desenvolveram um framework computacional denominado laminarSMOKE, direcionado à modelagem de chamas laminares multidimensionais com mecanismos cinéticos detalhados na fase gasosa. Esse recurso emprega a técnica de divisão de operadores e incorpora o código aberto OpenFOAM para a discretização espacial das equações governantes em geometrias complexas. A validação do software envolveu simulações de chamas em cofluxo em estado estacionário, alimentadas com diferentes gases. Posteriormente, aplicaram-no para modelar chamas laminares de cofluxo C₂H₄/CH₄ (CUOCI et al., 2013). Os resultados numéricos obtidos desempenham um papel significativo no avanço do entendimento da combustão e no aprimoramento do design de equipamentos industriais e domésticos. Entretanto, é crucial observar que o termo "difusivo" foi simplificado como um coeficiente médio de difusão das espécies individuais.

O estudo focado na evolução da fuligem em chamas difusivas laminares de metano é notável por suas simulações numéricas detalhadas (LUO; MA; LU, 2015). As análises exploram a formação e evolução da fuligem em condições de cofluxo de metano e ar. Ao destacar a importância de incorporar a presença de fuligem na simulação da combustão do metano, o artigo contribui significativamente para a compreensão da complexidade desses processos. A inclusão de considerações sobre a fuligem é fundamental devido ao seu impacto nas emissões atmosféricas e na eficiência dos processos de combustão.

Um estudo realizado pelo pesquisador (DASGUPTA, 2015), assim como o trabalho de (XU; SMOOKE, 1993), conduziu uma simulação numérica de chamas difusivas laminares com simetria radial. Esse estudo incorporou a presença de fuligem e utilizou um código de volume finito no contexto do OpenFOAM. A pesquisa abordou análises paramétricas para investigar os efeitos da química gasosa, modelos de fuligem e radiação. Os resultados destacaram a eficácia do modelo de fuligem, ressaltando sua robustez, escalabilidade e aplicabilidade em várias configurações de chamas laminar (DASGUPTA, 2015). No entanto, é importante observar que o número de Lewis foi considerado como unitário para todos os componentes, com o objetivo de mitigar o efeito do fluxo de inter-difusão, uma suposição que elimina o termo adicional na equação de energia.

O estudo (WANG et al., 2023) investiga o efeito da adição de metano às misturas de gás natural/ ar para resolver problemas de combustão insuficiente e operação instável em motores a gás natural. A pesquisa avalia as características de combustão laminar de

misturas estequiométricas de metano/metanol/ar com frações volumétricas de metanol variando de 0% a 100 %. Realizados em uma câmara de combustão de volume constante, os experimentos mostram que as características de combustão laminar são linearmente aprimoradas pela adição de metanol. Em condições específicas, a adição de metanol altera linearmente a pressão máxima de combustão, a taxa máxima de aumento de pressão, a duração da combustão e a velocidade laminar de queima. A análise cinética revela que o produto intermediário CH_2OH , gerado pela oxidação do metano, contribui significativamente para a formação de HO_2 , influenciando positivamente a combustão. O estudo também destaca a linearidade dessas mudanças em relação à fração volumétrica de metanol, o que é promissor para prever as características de combustão em diversas proporções de mistura.

No estudo conduzido por (CUNHA; VERAS, 2021), foi desenvolvido um código de simulação tridimensional para analisar chamas difusivas laminares de metano com detalhadas condições de entrada. Para a simulação, o método CVFEM (Control Volume Finite Element Method) foi empregado. O estudo também incorporou a consideração das perdas radiativas de calor e investigou os efeitos da porosidade no comprimento da chama. Notavelmente, os resultados indicaram que, até certo ponto, o aumento da porosidade do combustor estava correlacionado com uma redução no comprimento da chama.

1 Objetivos

1.1 Objetivo Geral

O objetivo geral deste trabalho é simular chamas difusivas laminares do metano por meio de mecanismos de reação global com passos único e duplo, o mecanismo de reação reduzido de (SMOOKE; MITCHELL; KEYES, 1986) e compara-los ao mecanismo de reação detalhado GRI-MECH 3.0.

1.2 Objetivos específico

- Revisar formulação matemática que rege reações de combustão.
- Introduzir o leitor ao tema da combustão e explicar as motivações para o seu estudo.
- Modelar a combustão do metano por meio das equações que regem o escoamento de chamas difusivas laminares
- Especificar o combustor que será utilizado.
- Criar e selecionar a malha melhor otimizada para a simulação com o mecanismo de (SMOOKE; MITCHELL; KEYES, 1986)
- Validar os resultados obtidos com os dados de trabalhos experimentais.

2 Fundamentação teórica

2.1 Combustão

Para que ocorra a reação química de combustão, são necessários e suficientes calor (alta temperatura), combustível e comburente, em proporções adequadas. Desses três, o combustível é o componente de maior valor econômico e é o principal responsável pelos componentes das emissões causadoras dos impactos ambientais (FARIAS, 2007).

2.2 Chama misturada e sem pré-mistura

Segundo (DUARTE, 2015), o sistema de combustão geralmente envolve dois reagentes, o combustível e o oxidante, que devem ser combinados e misturados em nível molecular antes que a reação ocorra. A mistura dos reagentes é essencial, implicando que pelo menos um deles esteja na fase líquida ou gasosa para que suas moléculas possam se espalhar sobre as do outro reagente. A maneira como os reagentes são misturados influencia o funcionamento do sistema de combustão. Em um sistema pré-misturado, os reagentes são previamente bem misturados antes do início da reação. Em contraste, em um sistema não pré-misturado, os reagentes estão inicialmente separados e se unem por difusão molecular e turbulenta antes da ocorrência da reação. A combustão sem pré-mistura é também chamada de combustão difusiva devido à importância do transporte difusivo para a eficiência da mistura molecular dos reagentes. É essencial destacar que um sistema sem pré-mistura difusiva não significa que um sistema pré-misturado seja não-difusivo. A palavra "difusivo" indica apenas a necessidade de junção dos reagentes para o transporte da pré-mistura (e a energia térmica e os produtos da combustão) até a região de reação, onde os reagentes são consumidos e os produtos da combustão são gerados. É raro encontrar exemplos de pré-mistura na natureza, pois, caso existissem, os reagentes já teriam reagido, mesmo que fosse em uma reação simples. Em contrapartida, sistemas sem pré-mistura são mais comuns, visto que o oxigênio presente no ar atua como oxidante, e qualquer material que possa queimar com o ar é considerado combustível.

2.3 Chamas laminares e turbulenta

Como descrito por (DUARTE, 2015), a chama também é caracterizada pela natureza do escoamento, podendo ser laminar ou turbulenta. Em um escoamento laminar, distintas linhas de corrente existem para a estrutura, movimento convectivo, enquanto em um escoamento turbulento tais linhas de corrente não existem, de tal forma que, em qual-

quer ponto no espaço, as quantidades de escoamento variam aleatoriamente no tempo. De acordo com (WHITE, 2017), a classificação do regime de escoamento é determinada com base no número de Reynolds (Equação 2.1). Quando o número de Reynolds (Re) é muito baixo, isso representa um escoamento de Stokes, no qual os efeitos de inércia são negligenciáveis. Um valor moderado de Re indica um fluxo laminar suave, enquanto um Re alto está associado a um fluxo turbulento, as definições de Reynolds baixo, moderado e alto variam conforme a geometria do problema. No contexto de chamas pré-misturadas, o número de Reynolds especifica em qual regime o combustível e o oxidante foram misturados antes da queima. Vale ressaltar que o autor não forneceu valores específicos para as faixas de escoamento laminar e turbulento, pois esses valores dependem da geometria do escoamento em questão.

$$Re = \frac{\rho V L}{\mu} \quad (2.1)$$

onde ρ é a massa específica V e L são a velocidade e distância característica do fluido e μ é a viscosidade.

Em relação ao estudo de (LAW, 2006), é importante mencionar que a turbulência geralmente favorece um processo de mistura mais eficiente, especialmente em sistemas onde a mistura dos reagentes é crucial, como na combustão não pré-misturada. Nessas situações, a mistura final antes da reação pode ocorrer, mas continua a acontecer por meio do processo difusivo, independentemente de o escoamento ser laminar ou turbulento. O autor ressalta a importância desse fenômeno para entender os processos de combustão e mistura de reagentes em sistemas específicos.

2.4 Mecanismos de combustão

Os mecanismos de cinética química e seu uso em simulações são ferramentas importantes no desenvolvimento de uma compreensão fundamental da combustão. Mecanismos de diferentes complexidades, variando de uma única reação até dezenas de milhares de reações químicas, são utilizados de acordo com a necessidade e os recursos computacionais disponíveis. Na literatura, termos como 'detalhado', 'esquelético', 'reduzido' e 'global' são utilizados para indicar o nível de complexidade de um mecanismo. Um mecanismo detalhado contém todas as reações possíveis do combustível e intermediários, sendo abrangente em teoria, mas não existe um mecanismo verdadeiramente completo devido à falta de conhecimento sobre todas as reações e à incerteza nos parâmetros cinéticos. Um mecanismo esquelético é uma sequência intacta de reações elementares do combustível aos produtos finais, mas sua abrangência é limitada. Os mecanismos reduzidos são simplificados, incluindo redução de caminhos de reação por meio de agrupamentos de várias reações elementares. Já os mecanismos globais utilizam poucas reações para transformar

o combustível em produtos finais, sem detalhes químicos adicionais. Esses mecanismos variam em tamanho, podendo ser extensos ou menores, dependendo da complexidade do sistema em questão (ZETTERVALL; FUREBY; NILSSON, 2021b)

2.5 Equações de conservação

De acordo com (WHITE, 2017), o escoamento deve satisfazer as três leis básicas da mecânica, além de uma relação termodinâmica de estado e condições de contorno associadas. As leis são a conservação da massa (continuidade), a conservação do momento linear (segunda lei de Newton) e a conservação da energia (primeira lei da termodinâmica). Além disso, é necessário uma relação de estado como a conservação de espécies químicas para o caso da combustão, e condições de contorno apropriadas nas superfícies sólidas, interfaces, entradas e saídas.

2.5.1 Equação da conservação da massa

A equação da conservação de massa, também chamada de equação da continuidade é descrita pela Eq. 2.2

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{v}) \quad (2.2)$$

onde ρ é a massa específica da mistura e \vec{v} é o vetor velocidade do escoamento.

2.5.2 Equação da conservação da quantidade de movimento

A equação de Navier-Stokes governa a conservação da quantidade de movimento em um escoamento e é expressa pela Equação 2.3:

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} \right) = -\nabla p + \rho \mathbf{g} + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} \quad (2.3)$$

Nessa equação, p representa a pressão e \mathbf{g} é o vetor de forças de campo. O termo entre parênteses no lado esquerdo da equação descreve a aceleração de uma partícula de fluido em movimento, ou seja, a taxa de variação do vetor velocidade ao longo do tempo e do espaço. No lado direito da igualdade, temos o somatório das forças por unidade de volume que atuam sobre a partícula. Os primeiros dois termos representam as forças de pressão e de campo, respectivamente, enquanto o último termo representa as forças viscosas. Para um fluido newtoniano sob a hipótese de Stokes, $\boldsymbol{\tau}$ representa parte do tensor do fluido e é dado pela Equação 2.4:

$$\boldsymbol{\tau} = \mu \left[\nabla \mathbf{v} + (\nabla \mathbf{v})^T \right] - \frac{2}{3} \mu (\nabla \cdot \mathbf{v}) \mathbf{I} \quad (2.4)$$

Nessa expressão, μ representa a viscosidade dinâmica e \mathbf{I} é o tensor de identidade.

2.5.3 Equação da conservação da massa de espécies químicas

A Equação 2.6 expressa a lei de conservação da massa para a espécie química Y_k em um escoamento reativo, considerando as contribuições da convecção, difusão e reações químicas. É amplamente utilizada em simulações de combustão, onde várias espécies químicas podem estar envolvidas e interagir por meio de reações químicas.

$$\frac{\partial(\rho Y_k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} Y_k) = \nabla \cdot (\rho D_k \nabla Y_k) + \dot{\omega}_k \quad (2.5)$$

$\frac{\partial(\rho Y_k)}{\partial t}$: Representa a taxa de variação temporal da massa da espécie química Y_k por unidade de volume.

$\nabla \cdot (\rho \mathbf{u} Y_k)$: Representa a convecção da espécie química Y_k devido ao escoamento do fluido. \mathbf{u} é o vetor velocidade do fluido e $\nabla \cdot (\rho \mathbf{u} Y_k)$ é a divergência do fluxo convectivo de massa.

$\nabla \cdot (\rho D_k \nabla Y_k)$: Descreve a difusão da espécie química Y_k no escoamento. D_k é o coeficiente de difusão da espécie química, que indica o quão facilmente a espécie se difunde no fluido. $\nabla \cdot (\rho D_k \nabla Y_k)$ é a divergência do fluxo difusivo de massa.

$\dot{\omega}_k$: Representa a taxa de geração ou consumo líquido da espécie química Y_k devido a reações químicas no sistema e depende do mecanismo de reação escolhido.

Onde o divergente do fluxo difusivo da massa pode ser simplificado como j_k e a equação ser reescrita como:

$$\frac{\partial(\rho Y_i)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} Y_i) = -\nabla \cdot \mathbf{j}_k + \dot{\omega}_k \quad (2.6)$$

2.5.4 Equação da conservação de energia

A equação de conservação de energia pode ser expressa em termos da entalpia específica (h) da mistura:

$$\frac{\partial(\rho h)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} h) = \frac{Dp}{Dt} + \nabla \cdot (\mu \nabla \mathbf{v}) - \nabla \cdot \mathbf{j}_q + \dot{q}_r \quad (2.7)$$

No lado esquerdo da equação, os termos representam a variação temporal da entalpia h da mistura e seu transporte por advecção, respectivamente. No lado direito, os termos representam a derivada material da pressão $\frac{Dp}{Dt}$, a dissipação viscosa $\nabla \cdot (\mu \nabla \mathbf{v})$, o divergente do vetor de fluxo de calor \mathbf{j}_q e o termo de fonte radiante que contabiliza as perdas por radiação \dot{q}_r .

Uma vez que a reação ocorre em regime laminar, é possível ignorar os efeitos de dissipação viscosa, sendo possível reescrever a Equação 2.7 da forma:

$$\frac{\partial(\rho h)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} h) = \frac{Dp}{Dt} - \nabla \cdot \mathbf{j}_q + \dot{q}_r \quad (2.8)$$

2.6 Propriedades físico-químicas

Segundo as formulações matemáticas encontradas em (LAW, 2006) a Lei do Gás Ideal, a pressão (p) de uma mistura de gases pode ser expressa como:

$$p = \frac{\rho RT}{\sum_{i=1}^N X_i W_i} = \frac{\rho RT}{\sum_{i=1}^N Y_i / W_i} = \frac{\rho RT}{W} \quad (2.9)$$

onde ρ é a massa específica, R é a constante específica do gás, T é a temperatura, N é o número de espécies na mistura, X_i é a fração mássica da espécie i , Y_i é a fração molar da espécie i e W_i é a massa molar da espécie i . O parâmetro $W = \sum_{i=1}^N X_i W_i = \sum_{i=1}^N Y_i / W_i^{-1}$ é o peso molecular médio da mistura.

Mediante o mesmo autor, também temos outras propriedades químicas definidas como: Relação Energia-Entalpia:

$$h = \sum_{i=1}^N Y_i h_i = e + \frac{p}{\rho} \quad (2.10)$$

Conversão entre Frações Molares e Mássicas: A relação entre a fração molar X_i e a fração mássica Y_i é

$$Y_i = \frac{X_i W_i}{\sum_{j=1}^N X_j W_j} \quad (2.11)$$

A viscosidade

$$\mu_{i,j} = \frac{2\sqrt{8\mu_{i,j} k_o T}}{\pi \sigma_{i,j}^2} \quad (2.12)$$

A condutividade térmica

$$\lambda_{i,j} = \frac{2\sqrt{8\lambda_{i,j} k_o T}}{\pi \sigma_{i,j}^2 c v} \quad (2.13)$$

Além disso, é necessário assumir a mesma hipótese que (FERRACUTI, 2020) em que o número de Lewis é unitário ($Le=1$), assim sendo, o coeficiente de difusão das espécies $\alpha = \frac{k}{\rho c_p}$ uma vez que $Le = \frac{\alpha}{D} = 1$ e $\rho = \frac{\alpha}{D c_p}$.

Por fim teremos que o coeficiente de difusão da massa:

$$D = \frac{k}{\rho c_p} \quad (2.14)$$

3 Metodologia

O código de fluidodinâmica computacional desenvolvido por (CUNHA, 2010) na linguagem do software MATLAB, será utilizado para a realização dos simulações computacionais do presente estudo. A principal rotina do código foi desenvolvida para resolver uma equação de conservação de um escalar genérico φ . Essa abordagem foi adotada porque todas as equações que governam o escoamento podem ser expressas no formato apresentado na Equação 3.1, cujas formas particulares estão mostradas na tabela 1. Durante as simulações, foram utilizados apenas dois tipos de condições de contorno: o valor de φ foi prescrito em alguns contornos, ou o fluxo de φ foi assumido como nulo na direção normal ao contorno, resultando em $\frac{\partial \varphi}{\partial n} = 0$.

A equação de conservação do escalar genérico φ é dada por:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\varphi) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u\varphi) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v\varphi) = \frac{\partial}{\partial x}\left(\Gamma_\varphi \frac{\partial \varphi}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(\Gamma_\varphi \frac{\partial \varphi}{\partial y}\right) + S_\varphi \quad (3.1)$$

onde: ρ é a massa específica, φ é o escalar genérico, t é o tempo, x e y são as coordenadas espaciais, u e v são as componentes da velocidade do fluido nas direções x e y , Γ_φ é a difusividade do escalar φ , S_φ é a taxa de fonte do escalar φ .

- $\frac{\partial}{\partial t}(\rho\varphi)$ é o termo transitivo.
- $\frac{\partial}{\partial x}(\rho u\varphi) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v\varphi)$ é o termo advectivo.
- $\frac{\partial}{\partial x}\left(\Gamma_\varphi \frac{\partial \varphi}{\partial x}\right)$ é o termo de difusão.
- $\frac{\partial}{\partial y}\left(\Gamma_\varphi \frac{\partial \varphi}{\partial y}\right) + S_\varphi$ é o termo de fonte.

Tabela 1 – Equações de conservação usadas na simulação

Equação	Γ_φ	S_φ
Conservação da massa	1	0
Conservação de quant. de movimento-z	$u\mu \frac{\partial p}{\partial z} + (\rho - \rho_\infty)g$	0
Conservação de quant. de movimento-r	$v\mu \frac{\partial p}{\partial r} - \frac{\mu v}{r^2}$	0
Conservação da Energia	$\frac{h}{kC_p}$	$\nabla \cdot \mathbf{q}$
Conservação da fração de massa Y_k	$\frac{k}{C_p}$	0

Conforme (FERRACUTI, 2020) a Equação 3.1 foi discretizada utilizando o Método dos Elementos Finitos de Volume de Controle (CVFEM - Control Volume Finite Element Method). Esse método utiliza uma abordagem de malha dupla, onde uma malha

não estruturada composta por elementos triangulares é usada para discretizar o domínio geométrico, enquanto uma segunda malha, formada por volumes de controle poligonais, é usada para discretizar as equações diferenciais.

Um esquema de interpolação linear foi usado para discretização do termo de difusão, o esquema upwind orientado pelo escoamento de (CUNHA; VERAS, 2021) foi usado para discretização do termo de advecção. O termo fonte foi aproximado por integração de ponto único (central ao volume de controle) e o método Euler implícito (SAUER, 2012) foi usado para aproximar o termo transiente, onde o passo de tempo Δt foi usado para avançar a solução de ϕ_0 para ϕ .

A discretização derivou um sistema de equações algébricas: $M\phi = B$, onde M é a matriz global e B é o vetor que armazena termos de fontes e condições de contorno. Todo o processo de discretização foi baseado nos três sub-volumes internos aos elementos, produzindo matrizes locais para cada elemento (VEERSTEG; MALALASEKARA, 2007). A matriz global foi obtida por um procedimento de montagem a partir das matrizes locais. A maioria dos sistemas de equações algébricas foram resolvidos por métodos diretos (variantes de eliminação gaussiana) internas ao software MATLAB.

Uma vez que as equações resolvidas são equações de regime transiente que calculam o valor futuro das incógnitas em um tempo muito curto, a diferença entre valor presente e o valor futuro quando o escoamento está desenvolvido, este valor é o resíduo e a partir de um determinado resíduo mínimo consideramos que o escoamento alcançou regime permanente.

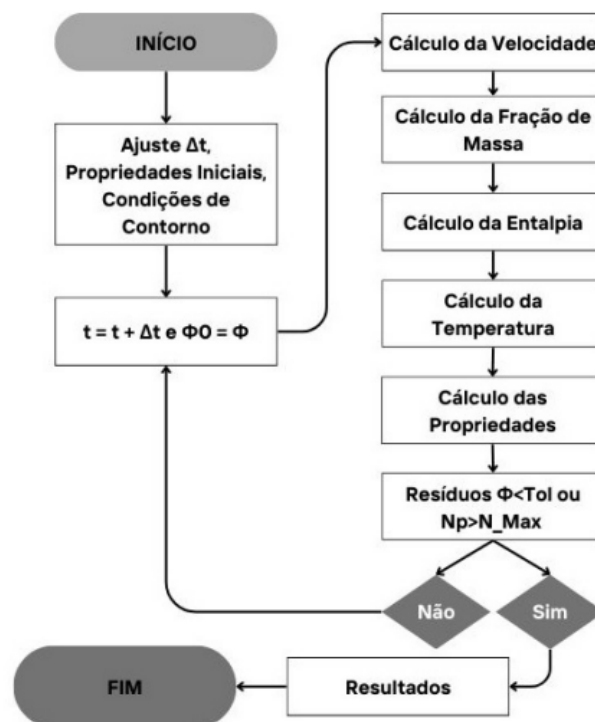


Figura 1 – Algoritmo para simulação numérica. Fonte: (CUNHA; VERAS, 2021)

O algoritmo para a obtenção da chama do metano é descrito na figura 1

O processo de discretização foi baseado nos três subvolumes internos aos elementos, produzindo matrizes locais para cada elemento. A matriz global foi obtida através de um procedimento de montagem das matrizes locais. A solução em regime permanente foi alcançada quando:

$resíduos(\phi) < tolerância$, onde os resíduos $(\phi) = \left[\sum_{k=1}^{K_{max}} (\phi_k - \phi_{k0}^2) \right]^{0.5}$ e a tolerância $< 10^{-7}$. Sendo que o termo k é um nó da malha, com $K_{max} = \max(k)$.

3.1 Cálculo das velocidades

A discretização das equações diferenciais resultou em sistemas de equações algébricas para cada variável desejada. Embora algumas dessas equações possam ser resolvidas diretamente por funções intrínsecas do MATLAB, nem todas podem ser solucionadas dessa forma. Por exemplo, as equações de Navier-Stokes são não lineares e altamente acopladas, exigindo a determinação simultânea das variáveis u , v e p . no CFD do (CUNHA, 2010), optou-se por resolver essas variáveis de forma segregada utilizando o algoritmo proposto por (SAABAS; BALIGA, 1994)

3.2 Cálculo das composições das misturas gasosas

Para resolver as equações de fração de massa das espécies químicas, foi necessário empregar um procedimento especial devido ao alto acoplamento entre os termos de fonte. Os detalhes sobre como calcular esses termos de fonte nas equações das espécies químicas são apresentados com base no mecanismo de reação química utilizado.

3.3 Mecanismos

Conforme mencionado por (TURNS, 2012), um mecanismo de reação química é definido como um conjunto de reações elementares necessárias para descrever uma reação química específica. Esses mecanismos cinéticos podem variar em complexidade, envolvendo um número variável de etapas, sendo cada uma dessas etapas caracterizada como reações químicas elementares.

A interação entre essas reações elementares desempenha um papel crucial no controle do processo de combustão como um todo. Independentemente das propriedades específicas do combustível, todos os mecanismos de reações compartilham características essenciais do processo de combustão. Como exemplificado por (WARNATZ; MAAS; DIBBLE, 2006), mesmo um número limitado de reações elementares pode ser suficiente para determinar a taxa global do processo.

Em (ZETTERVALL; FUREBY; NILSSON, 2021a), destaca-se que os mecanismos de reação detalhados são formulados de maneira a abranger toda a complexidade da reação química em um processo de combustão. No entanto, para atingir esse objetivo, pode ser necessário incluir centenas ou até milhares de reações químicas.

Os mecanismos USC, UCSD, LLNL e Konnov, conforme mencionados por (XU; KONNOV, 2012), exemplificam mecanismos detalhados. Esses mecanismos buscam representar a combustão do C_2H_4 da forma mais fidedigna possível, incorporando diversas reações e várias espécies químicas.

Conforme discutido por (ZETTERVALL; FUREBY; NILSSON, 2021a), um mecanismo de reação química reduzido é uma versão simplificada dos mecanismos de reações detalhados. Este mecanismo oferece uma descrição química mais concisa dos radicais e da produção de espécies químicas, resultando em previsões mais específicas das concentrações de espécies e parâmetros mais gerais da combustão.

Devido à sua natureza simplificada, um mecanismo reduzido implica em um custo computacional inferior, o que viabiliza a utilização de modelos de turbulência mais avançados, como o LES (Large Eddy Simulation) ou o CFVEM (Closed Volume Finite Element Method).

3.3.1 Mecanismo de passo duplo

O mecanismo de passo duplo de reação global usado na simulação obtido de (WESTBROOK; DRYER, 1981):



Baseado nesse mecanismo, as espécies químicas que compõem a mistura são: CH_4 , O_2 , CO , CO_2 e H_2O

As taxas de reação química para os três passos, obtidas na referência (WESTBROOK; DRYER, 1981), são fornecidas abaixo:

$$k_{01} = A_{01} \exp\left(\frac{-30000}{1.987 \cdot T_{gas}}\right) \quad (3.4)$$

$$k_{02} = A_{02} \exp\left(\frac{-40000}{1.987 \cdot T_{gas}}\right) \quad (3.5)$$

$$k_{03} = A_{03} \exp\left(\frac{-40000}{1.987 \cdot T_{gas}}\right) \quad (3.6)$$

É relevante observar que essas constantes de taxa foram obtidas empiricamente na referida pesquisa, tornando-as aplicáveis somente às condições experimentais em que foram determinadas. Portanto, elas não devem ser diretamente utilizadas em pressões, temperaturas ou relações estequiométricas diferentes das estudadas.

Além disso, os fatores pré-exponenciais apresentados na referência estão originalmente em unidades diferentes do Sistema Internacional (SI). Portanto, houve a necessidade de converter esses fatores de mol para kmol e de centímetros para metros. As conversões foram realizadas da seguinte forma:

$$A_{01} = 1,5 \cdot 10^7 \cdot 1000^{[1-(0.3+1.3)]} \quad (3.7)$$

$$A_{02} = 2.387 \cdot 10^{12} \cdot 1000^{[1-(1+0.25+0.5)]} \quad (3.8)$$

$$A_{03} = 5 \cdot 10^8 \cdot 1000^{[1-(1)]} \quad (3.9)$$

O código de simulação CFD utilizado neste estudo emprega concentrações baseadas em frações de massa, enquanto as taxas de reação química são baseadas em concentrações molares. Para efetuar a conversão da fração de massa para concentração molar, é utilizada a seguinte equação:

$$C_k = \frac{\rho Y_k}{MW_k} \quad (3.10)$$

As taxas fornecidas pelas equações 3.9, 3.10 e 3.11 estão associadas aos passos de reação química. As taxas líquidas de geração para cada espécie química são expressas por:

$$C_{CH_4} : \frac{dC_{CH_4}}{dt} = R_{P01} = -k_{01} \cdot \frac{C_{CH_4}^{0.3} C_{O_2}^{1.3}}{C_{CH_4} C_{O_2}} \quad (3.11)$$

$$C_{CO} : \frac{dC_{CO}}{dt} = R_{P02} = -k_{01} \cdot \frac{C_{CH_4}^1 C_{O_2}^{0.25}}{C_{CH_4}^{0.5} C_{O_2}^{0.5} C_{H_2O}^{0.25}} \quad (3.12)$$

$$C_{CO_2} : \frac{dC_{CO_2}}{dt} = R_{P02} = -k_{01} \cdot \frac{C_{CH_4}^1}{C_{CO_2}} \quad (3.13)$$

Para realizar os cálculos de cinética química, foram adotadas algumas simplificações. Por exemplo, aproximamos a taxa de variação da concentração em relação ao tempo, $\frac{dC_k}{dt}$, por $C_k - C_{0,k} \Delta t_R$. Também utilizamos a identidade $R_{0,k} = \frac{dC_k}{dt}$.

Com base nessas simplificações, concluímos que $R_{0,k}$ é aproximadamente igual a $\frac{C_k - C_{0,k}}{\Delta t_R}$. Dessa forma, ao avançar no tempo em um intervalo Δt_R , podemos calcular a concentração C_k com base na concentração inicial conhecida $C_{0,k}$. É fundamental escolher adequadamente o tamanho do intervalo de tempo Δt_R para evitar valores negativos de C_k . Em casos com altas taxas $R_{0,k}$, torna-se necessário utilizar intervalos de tempo menores. A escolha adequada de Δt_R depende das características específicas do problema a ser resolvido.

A escala de tempo químico de maior interesse é o tempo necessário para atingir o equilíbrio químico a partir da condição inicial prescrita. No entanto, em simulações CFD, é inviável utilizar passos de tempo extremamente pequenos. Assim, é comum adotar dois passos de tempo: um para a simulação CFD e outro exclusivo para a integração do termo de fonte de reação química. Esses passos de tempo estão relacionados por $\Delta t_R = \frac{\Delta t}{n}$, onde n é o número de vezes que o passo de tempo da simulação CFD é maior que o utilizado para a integração dos termos de reação química. Dessa forma, caso $n = 10000$, $\Delta t_R = 0.0000012\Delta t$.

Com base nas informações apresentadas, é possível esquematizar uma rotina para o cálculo dos termos de fonte das equações de fração de massa de espécies químicas. Primeiramente, são realizados os cálculos dos valores iniciais das concentrações químicas. Em seguida, essas concentrações são transferidas para as variáveis de cálculo da reação química, que variam ao longo do tempo. Os cálculos da reação são executados em n passos. A variável i representa cada instante de tempo, iniciando em 1 e aumentando em valores inteiros até n . Ao final, os termos de fonte das equações das espécies químicas são calculados. Conforme i aumenta, as concentrações variam, alterando também as taxas de reação química. A concentração $C_{0,k}$ representa a concentração inicial antes de qualquer instante, enquanto C_k é a concentração resultante após os n instantes de reação, cada um com duração Δt_R , totalizando o tempo de cálculo Δt . Assim, as taxas médias de reação química ω_k são calculadas com base no intervalo de tempo Δt e nas concentrações iniciais e finais.

3.4 Cálculo dos termos de fonte das espécies químicas

Inicialmente, são realizados os cálculos para obter os valores iniciais das concentrações químicas:

$$C_{*0,1} = \frac{\rho Y_{CH_4}}{M_{CH_4} W_{CH_4}} \quad (3.14)$$

$$C_{*0,2} = \frac{\rho Y_{O_2}}{M_{O_2} W_{O_2}} \quad (3.15)$$

$$C_{*0,3} = \frac{\rho Y_{CO}}{M_{CO} W_{CO}} \quad (3.16)$$

$$C_{*0,4} = \frac{\rho Y_{H_2O}}{M_{H_2O} W_{H_2O}} \quad (3.17)$$

$$C_{*0,5} = \frac{\rho Y_{CO_2}}{M_{CO_2} W_{CO_2}} \quad (3.18)$$

Posteriormente, essas concentrações químicas são transferidas para as variáveis de cálculo da reação química:

$$C_1 = C_{*0,1} \quad (3.19)$$

$$C_2 = C_{*0,2} \quad (3.20)$$

$$C_3 = C_{*0,3} \quad (3.21)$$

$$C_4 = C_{*0,4} \quad (3.22)$$

$$C_5 = C_{*0,5} \quad (3.23)$$

Em seguida, os cálculos de reação são realizados em n passos, onde n é um número inteiro. Para cada instante de tempo i (iniciando em 1 e aumentando até n), os seguintes cálculos são efetuados:

Cálculo das taxas para cada passo de reação química:

$$R_{P01} = -k_{01} \cdot \frac{C_1^{0.1} C_2^{1.3}}{C_1 C_2} \quad (3.24)$$

$$R_{P02} = -k_{02} \frac{C_1^1 C_2^{0.25}}{C_1^{0.5} C_2^{0.5}} \quad (3.25)$$

$$R_{P03} = -k_{03} \cdot \frac{C_1^1}{C_3} \quad (3.26)$$

Cálculo das taxas líquidas das espécies:

$$R_1 = R_{P01} \quad (3.27)$$

$$R_2 = 1.5R_{P01} + 0.5R_{P02} - 0.5R_{P03} \quad (3.28)$$

$$R_3 = R_{P02} - R_{P01} - R_{P03} \quad (3.29)$$

$$R_4 = -2R_{P01} \quad (3.30)$$

$$R_5 = R_{P03} - R_{P02} \quad (3.31)$$

Em cada passo, as concentrações de espécies químicas são atualizadas:

$$C_1 = C_1 + R_1 \cdot \Delta t_R \quad (3.32)$$

$$C_2 = C_2 + R_2 \cdot \Delta t_R \quad (3.33)$$

$$C_3 = C_3 + R_3 \cdot \Delta t_R \quad (3.34)$$

$$C_4 = C_4 + R_4 \cdot \Delta t_R \quad (3.35)$$

$$C_5 = C_5 + R_5 \cdot \Delta t_R \quad (3.36)$$

Ao final do processo, os termos de fonte das equações das espécies químicas são calculados:

$$\dot{\omega}_{CH4} = MW1 (C_1 - C_{*0,1}) \quad (3.37)$$

$$\dot{\omega}_{O2} = MW2 (C_2 - C_{*0,2}) \quad (3.38)$$

$$\dot{\omega}_{CO} = MW3 (C_3 - C_{*0,3}) \quad (3.39)$$

$$\dot{\omega}_{H2O} = MW4 (C_4 - C_{*0,4}) \quad (3.40)$$

$$\dot{\omega}_{CO2} = MW5 (C_5 - C_{*0,5}) \quad (3.41)$$

Os cálculos de cinética química requerem uma atenção especial, e é importante ajustar o intervalo de tempo Δt_R de acordo com a escala de tempo químico de interesse. Esse processo garante que os resultados sejam confiáveis e adequados para a simulação CFD, Os passos de tempo utilizados na solução de problemas de combustão podem ser tão pequenos quanto $10^{-9} - 10^{-8}$ s (IMREN; HAWORTH, 2016).

3.4.1 Mecanismo reduzido

O mecanismo de reação detalhado escolhido para a simulação foi o mecanismo de (SMOOKE; MITCHELL; KEYES, 1986), ele possui 15 espécies químicas e 42 passos de reação, a figura 2 ilustra seus passos.

Reação	A	β	E
1. $\text{CH}_4 + \text{M} \rightleftharpoons \text{CH}_3 + \text{H} + \text{M}$	1.00E + 17	0.000	86000.
2. $\text{CH}_4 + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{CH}_3 + \text{HO}_2$	7.90E + 13	0.000	56000.
3. $\text{CH}_3 + \text{H} \rightleftharpoons \text{CH}_3 + \text{H}_2$	2.20E + 04	3.000	8750.
4. $\text{CH}_4 + \text{O} \rightleftharpoons \text{CH}_3 + \text{OH}$	1.60E + 06	2.360	7400.
5. $\text{CH}_4 + \text{OH} \rightleftharpoons \text{CH}_3 + \text{H}_2\text{O}$	1.60E + 06	2.100	2460.
6. $\text{CH}_2\text{O} + \text{OH} \rightleftharpoons \text{HCO} + \text{H}_2\text{O}$	7.53E + 12	0.000	167.
7. $\text{CH}_2\text{O} + \text{H} \rightleftharpoons \text{HCO} + \text{H}_2$	3.31E + 14	0.000	10500.
8. $\text{CH}_2\text{O} + \text{M} \rightleftharpoons \text{HCO} + \text{H} + \text{M}$	3.31E + 16	0.000	81000.
9. $\text{CH}_2\text{O} + \text{O} \rightleftharpoons \text{HCO} + \text{OH}$	1.81E + 13	0.000	3082.
10. $\text{HCO} + \text{OH} \rightleftharpoons \text{CO} + \text{H}_2\text{O}$	5.00E + 12	0.000	0.
11. $\text{HCO} + \text{M} \rightleftharpoons \text{H} + \text{CO} + \text{M}$	1.60E + 14	0.000	14700.
12. $\text{HCO} + \text{H} \rightleftharpoons \text{CO} + \text{H}_2$	4.00E + 13	0.000	0.
13. $\text{HCO} + \text{O} \rightleftharpoons \text{OH} + \text{CO}$	1.00E + 13	0.000	0.
14. $\text{HCO} + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{HO}_2 + \text{CO}$	3.00E + 12	0.000	0.
15. $\text{CO} + \text{O} + \text{M} \rightleftharpoons \text{CO}_2 + \text{M}$	3.20E + 13	0.000	-4200.
16. $\text{CO} + \text{OH} \rightleftharpoons \text{CO}_2 + \text{H}$	1.51E + 07	1.300	-758.
17. $\text{CO} + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{CO}_2 + \text{O}$	1.60E + 13	0.000	41000.
18. $\text{CH}_3 + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{CH}_3\text{O} + \text{O}$	7.00E + 12	0.000	25652.
19. $\text{CH}_3\text{O} + \text{M} \rightleftharpoons \text{CH}_2\text{O} + \text{H} + \text{M}$	2.40E + 13	0.000	28812.
20. $\text{CH}_3\text{O} + \text{H} \rightleftharpoons \text{CH}_2\text{O} + \text{H}_2$	2.00E + 13	0.000	0.
21. $\text{CH}_3\text{O} + \text{OH} \rightleftharpoons \text{CH}_2\text{O} + \text{H}_2\text{O}$	1.00E + 13	0.000	0.
22. $\text{CH}_3\text{O} + \text{O} \rightleftharpoons \text{CH}_2\text{O} + \text{OH}$	1.00E + 13	0.000	0.
23. $\text{CH}_3\text{O} + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{CH}_2\text{O} + \text{HO}_2$	6.30E + 10	0.000	2600.
24. $\text{CH}_3 + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{CH}_3\text{O} + \text{OH}$	5.20E + 13	0.000	34574.
25. $\text{CH}_3 + \text{O} \rightleftharpoons \text{CH}_2\text{O} + \text{H}$	6.80E + 13	0.000	0.
26. $\text{CH}_3 + \text{OH} \rightleftharpoons \text{CH}_3\text{O} + \text{H}_2$	7.50E + 12	0.000	0.
27. $\text{HO}_2 + \text{CO} \rightleftharpoons \text{CO}_2 + \text{OH}$	5.80E + 13	0.000	22934.
28. $\text{H}_2 + \text{O}_2 \rightleftharpoons 2\text{OH}$	1.70E + 13	0.000	47780.
29. $\text{OH} + \text{H}_2 \rightleftharpoons \text{H}_2\text{O} + \text{H}$	1.17E + 09	1.300	3626.
30. $\text{H} + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{OH} + \text{O}$	2.00E + 14	0.000	16800.
31. $\text{O} + \text{H}_2 \rightleftharpoons \text{OH} + \text{H}$	1.80E + 10	1.000	8826.
32. $\text{H} + \text{O}_2 + \text{M} \rightleftharpoons \text{HO}_2 + \text{M}^a$	2.10E + 18	-1.000	0.
33. $\text{H} + \text{O}_2 + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{HO}_2 + \text{O}_2$	6.70E + 19	-1.420	0.
34. $\text{H} + \text{O}_2 + \text{N}_2 \rightleftharpoons \text{HO}_2 + \text{N}_2$	6.70E + 19	-1.420	0.
35. $\text{OH} + \text{HO}_2 \rightleftharpoons \text{H}_2\text{O} + \text{O}_2$	5.00E + 13	0.000	1000.
36. $\text{H} + \text{HO}_2 \rightleftharpoons 2\text{OH}$	2.50E + 14	0.000	1900.
37. $\text{O} + \text{HO}_2 \rightleftharpoons \text{O}_2 + \text{OH}$	4.80E + 13	0.000	1000.
38. $2\text{OH} \rightleftharpoons \text{O} + \text{H}_2\text{O}$	6.00E + 08	1.300	0.
39. $\text{H}_2 + \text{M} \rightleftharpoons \text{H} + \text{H} + \text{M}^b$	2.23E + 12	0.500	92600.
40. $\text{O}_2 + \text{M} \rightleftharpoons \text{O} + \text{O} + \text{M}$	1.85E + 11	0.500	95560.
41. $\text{H} + \text{OH} + \text{M} \rightleftharpoons \text{H}_2\text{O} + \text{M}^c$	7.50E + 23	-2.600	0.
42. $\text{H} + \text{HO}_2 \rightleftharpoons \text{H}_2 + \text{O}_2$	2.50E + 13	0.000	700.

Figura 2 – Passos de reação. Fonte: (SMOOKE; MITCHELL; KEYES, 1986)

3.4.1.1 Concentrações

O cálculo das concentrações químicas é realizado por meio de um código implementado em Matlab, utilizando a equação 3.43 e um processo análogo para todos os demais

elementos presentes no mecanismo. Em seguida, essas concentrações 3.44 irão permitir suas subseqüentes modificações ao longo das iterações no passo de tempo da reação.

$$C_{0,X}^* = \frac{\rho Y_X}{MW_X} \quad (3.42)$$

$$C_{0,C2H4}^* = \frac{\rho Y_{CH4}}{MW_{CH4}} \quad (3.43)$$

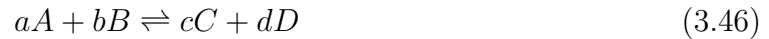
$$C_X = C_{0,X}^*, \quad C_{CH4} = C_{0,CH4}^* \quad (3.44)$$

3.4.1.2 Energia livre de Gibbs

A energia livre de Gibbs, conforme definido por (TURNES, 2012), pode ser considerada uma propriedade análoga à entropia em problemas de equilíbrio químico, especialmente quando se necessita calcular a composição de uma mistura em determinada temperatura, pressão e estequiometria. A expressão para a energia livre de Gibbs (G) é dada por:

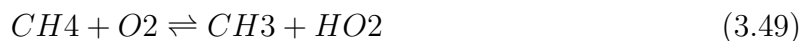
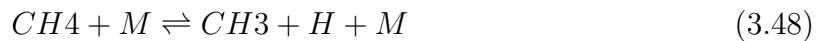
$$G \equiv h - TS \quad (3.45)$$

A partir de deduções, é possível encontrar a função de Gibbs para uma reação de equilíbrio (3.46) e a energia de Gibbs de formação (g) para cada espécie química:



$$\Delta G = (cg_C + dg_D) - (ag_A + bg_B) \quad (3.47)$$

Considerando as reações 1, 2 do mecanismo do (SMOOKIE; MITCHELL; KEYES, 1986), podemos expressar a função de Gibbs para cada uma delas como:



$$\Delta G_{R1} = (g_{CH_3} + g_H) - (g_{CH_4}) \quad (3.50)$$

$$\Delta G_{R2} = (g_{CH_3} + g_{HO_2}) - (g_{CH_4} + g_{O_2}) \quad (3.51)$$

Importante notar que, na equação 3.50, o terceiro componente M da reação 3.62 não é considerado, pois pode existir tanto como produto quanto como reagente.

3.4.1.3 Constantes de equilíbrio K_c e K_p

A constante de equilíbrio K_p , conforme definida por (TURNES, 2012) para uma reação de equilíbrio (Equação 3.46), é expressa pela seguinte equação:

$$K_p = \left(\frac{P_C}{P}\right)^c \left(\frac{P_D}{P}\right)^d \left(\frac{P_A}{P}\right)^a \left(\frac{P_B}{P}\right)^b \quad (3.52)$$

A relação da função de Gibbs com a constante de equilíbrio K_p pode ser reescrita, e isolando K_p , obtemos:

$$\Delta G = -RT \ln(K_p) \quad (3.53)$$

$$K_p = \exp\left(-\frac{\Delta G}{RT}\right) \quad (3.54)$$

Assim, o cálculo da constante de equilíbrio para a reação 2 do mecanismo SMO-OKE pode ser expresso como:

$$K_p - R2 = \exp\left(-\frac{\Delta G_{R2}}{RT}\right) \quad (3.55)$$

É essencial destacar que para as reações 8 e 19, onde há um desequilíbrio entre a quantidade de produtos e reagentes, os valores das concentrações de K_c e K_p não são diretamente proporcionais. De acordo com (KEE, 1993), eles são relacionados pela fórmula:

$$K_c = K_p \left(\frac{P}{RT}\right)^{\sum P_{reagentes} - \sum P_{produtos}} \quad (3.56)$$

As constantes de equilíbrio para os exemplos 8 e 19, que estão desequilibrados, podem ser descritas e corrigidas pelas equações:

$$K_p - R8 = \exp\left(-\frac{\Delta G_{R8}}{RT}\right) \left(\frac{P}{RT}\right)^{2-3} \quad (3.57)$$

$$K_p - R19 = \exp\left(-\frac{\Delta G_{R19}}{RT}\right) \left(\frac{P}{RT}\right)^{2-3} \quad (3.58)$$

Essa correção, definida em 3.56 e aplicada para os casos das reações 8 e 19, é necessária em todas as equações em que a quantidade de produtos e reagentes difere.

3.4.1.4 Constante de taxa de proporcionalidade

A constante de proporcionalidade pode ser simplificada para mecanismos mais simples com uma e duas reações para a equação de Arrhenius, desconsiderando o termo de temperatura. No entanto, isso não será feito para o mecanismo do (SMOKE; MITCHELL; KEYES, 1986) ao utilizar a constante de proporcionalidade.

Um aspecto crucial no cálculo da constante de taxa é sua unidade. O sistema de unidades utilizado nas tabelas é "cm, mol e s", enquanto as unidades usadas para o cálculo

CFD são "m, kmol e s". Para reconciliar esses dois sistemas, é necessário relacioná-los para diferentes concentrações molares, conforme demonstrado nos casos a seguir:

- $\frac{d[X]}{dt} = -k[X]$
- $\frac{d[X]}{dt} = -k[X][Y]$
- $\frac{d[X]}{dt} = -k[X][Y][M]$

Para o primeiro caso, temos:

$$\frac{d[X]}{dt} = -k[X] \rightarrow k (cm^3 mol/s) = -k \rightarrow k = \frac{1}{s} \quad (3.59)$$

A partir da Equação 3.59, podemos concluir que o sistema deve trabalhar com a unidade "1/s" para o primeiro caso, portanto, nenhuma alteração nas unidades é necessária.

Para o segundo caso, temos:

$$\frac{d[X]}{dt} = -k[X][Y] \rightarrow k (cm^3 mol/s) = -k (cm^3 mol) \rightarrow k = 10^{-3} mol^{-1} \quad (3.60)$$

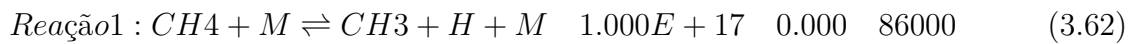
Neste caso, a unidade é alterada de "1/s" para "m³/(kmol s)", sendo necessária a correção nas unidades.

Para o terceiro caso, temos:

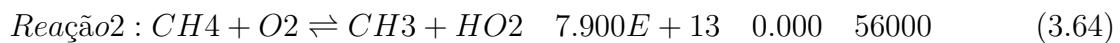
$$\frac{d[X]}{dt} = -k[X][Y][M] \rightarrow k (cm^3 mol/s) = -k (cm^3 mol)^2 \rightarrow k = 10^{-6} mol^{-2} \quad (3.61)$$

Neste caso, a unidade é alterada de "1/s" para "m⁶/(kmol² s)", sendo necessária a correção nas unidades.

Feitas essas considerações, é possível descrever as constantes de taxa de proporcionalidade k para cada valor de temperatura, conforme mostrado nas reações de exemplo 1 e 2 a seguir:



$$k_{R1} = 1E + 17 \times E - 3 \times T^0 \exp\left(-\frac{86000}{RT}\right) \quad (3.63)$$



$$k_{R2} = 7.9E + 13 \times T^0 \times \exp\left(-\frac{56000}{RT}\right) \quad (3.65)$$

Os valores de α , β e da energia de ativação E_a , foram obtidos através da tabela 2 para cada reação do mecanismo SMOOKE. Em que os expoentes α e β em um mecanismo de reação reduzido se relacionam aos coeficientes estequiométricos.

3.4.1.5 Equações com o terceiro corpo

De acordo com (LAW, 2006), a presença de um terceiro corpo é essencial para transferir o excesso de energia de uma reação. Para as equações que incluem a molécula M como um terceiro corpo, aquelas que têm a molécula M em sua reação, algumas alterações devem ser feitas para cada um dos casos. Inicialmente, podemos definir a concentração deste terceiro corpo como:

- $[M] = [H_2] + [H] + [O] + [O_2] + [OH] + [H_2O] + [HO_2] + [CH_3] \dots + [CH_4] + [CO] + [CO_2] + [HCO] + [CH_2O] + [CH_3O] + [Ar]$
- $[M_a] = k_{32}(H_2O) = 21k_{32}(Ar), k_{32}(H_2) = 3.3k_{32}(Ar), k_{32}(N_2) = k_{32}(O_2)$
- $[M_b] = (k_{39}(H_2O) = 6k_{39}(Ar), k_{39}(H) = 2k_{39}(Ar), k_{39}(H_2) = 3k_{39}(Ar)$
- $[M_c] = (k_{41}(H_2O) = 21k_{41}(Ar)$

M, M_a, M_b, M_c são concentrações de terceiro corpo que devem ser usadas nos cálculos de concentração seguindo a tabela da figura 2

3.4.1.6 Taxa de reação

A partir da reação 3.52, é viável expressar a taxa de cada reação da seguinte maneira:

$$\frac{dR_{0,x}}{dt} = C_{Rx} = -k \frac{[A]^a [B]^b - [C]^c [D]^d}{K_p}$$

Nessa equação, a concentração $[X]$ está vinculada à fração de massa pela equação 3.4.1.6 e será calculada a partir do tempo de reação $t_R = 1 \times 10^{-9}$ com $n = 15000$ para o tempo CFD de $\Delta t = 1 \times 10^{-5}$. A aplicação desse conceito pode ser ilustrada para as equações 1, 2 e 38:

- $CH_4 + M \rightleftharpoons CH_3 + H + M$

$$\frac{dR_{0,1}}{dt} = -k[M] \frac{[CH_4]^1 - [CH_3]^1 [H]^1}{K_p - R1}$$

- $CH_4 + O_2 \rightleftharpoons CH_3 + HO_2$

$$\frac{dR_{0,2}}{dt} = -k \frac{[CH_4]^1 [O_2]^1 - [CH_3]^1 [HO_2]^1}{K_p - R2}$$

- $2OH \rightleftharpoons O + H_2P$

$$\frac{dR_{0,38}}{dt} = -k \frac{[OH]^2 - [O]^1 [H_2O]^1}{K_p - R_{38}}$$

Na equação 3.4.1.6 p [M] é colocado em evidência já que aparece em ambos produtos e reagentes.

3.4.1.7 Taxa líquida da espécie

A taxa líquida para cada espécie pode ser representada da seguinte forma:

$$C_i = \frac{\rho Y_i}{MW_i} \quad (3.66)$$

Para realizar os cálculos de cinética química, algumas simplificações são necessárias:

$$\frac{dC_i}{dt} \approx \frac{C_i - C_{0,i}}{\delta t_R} \quad e \quad R_{0,i} = \frac{dC_i}{dt} \quad (3.67)$$

$$R_{0,i} = \frac{dC_i}{dt_{obtido}} - \frac{dC_i}{dt_{simplificado}} \approx \frac{C_i - C_{0,i}}{\delta t_R} \quad (3.68)$$

Como exemplo, a taxa líquida de O pode ser calculada da seguinte forma:

$$R_0 = (R_{31} + R_{37} + R_{04} + R_{09} + R_{13} + R_{15} + R_{22} + R_{25}) - (R_{38} + R_{40} + R_{17} + R_{18} + R_{30} + R_{40}) \quad (3.69)$$

A taxa líquida para cada espécie foi derivada a partir das taxas de reação específicas de cada espécie. Isso envolve subtrair as taxas de reação dos produtos das taxas de reação dos reagentes para cada espécie química.

3.4.1.8 Concentração final

Através da simplificação obtida em 3.67, podemos afirmar 3.70:

$$C_i = C_{0,i} + R_i \delta t_R \quad (3.70)$$

Assim, para um avanço no tempo de δt_R , é possível calcular a concentração C_i a partir de uma concentração conhecida $C_{0,i}$. É importante que o passo de tempo δt_R seja pequeno o suficiente de forma que:

$$R_{0,i} \delta t_R < C_{0,i} \quad e \quad C_i > 0 \quad (3.71)$$

Se as taxas $R_{0,i}$ forem bem grandes, os valores de δt_R devem ser bem pequenos. A escolha de um valor adequado de δt_R depende do problema a ser resolvido.

4 Resultados e discussão

Para o caso da chama sem pré mistura estudada experimental por (MITCHELL, 1975) usando um combustor de Mitchell. A figura 16 ilustra um esquema do domínio geométrico bidimensional adotado neste estudo para representar de forma aproximada o combustor experimental de referência com simetria radial.



Figura 3 – Domínio do combustor de Mitchell. Fonte: (FERRACUTI, 2020)

As condições que contorno para a simulação são as que seguem na tabela 2:

Tabela 2 – Condições de contorno para as variáveis do fluxo.

Contorno	u	v	Y_k	h
Eixo	$\frac{\partial u}{\partial r} = 0$	$\frac{\partial v}{\partial r} = 0$	$\frac{\partial Y_k}{\partial r} = 0$	$\frac{\partial h}{\partial r} = 0$
Parede	$u = 0$	$v = 0$	$\frac{\partial Y_k}{\partial r} = 0$	$h = h_M$
Entrada de Combustível	$u = u_C$	$v = 0$	$Y_{CH_4} = 1$	$h = h_C$
Entrada de Oxidante	$u = u_A$	$v = 0$	$Y_{O_2} = 0,232; Y_{N_2} = 0,768; Y_{AR} = 1$	$h = h_A$
Saída	$\frac{\partial u}{\partial z} = 0$	$\frac{\partial v}{\partial z} = 0$	$\frac{\partial Y_k}{\partial z} = 0$	$\frac{\partial h}{\partial z} = 0$

Durante a simulação, as velocidades de entrada de combustível e ar no combustor foram determinadas com base nas respectivas vazões mássicas. A velocidade do combustível, u_{fuel} foi calculada como 0,0450 m/s, enquanto a velocidade do ar, u_{air} , foi calculada

como 0,0988 m/s. As vazões mássicas de combustível e ar, denotadas por \dot{m}_{fuel} e \dot{m}_{air} , foram medidas como 0,029 g/s e 0,232 g/s, respectivamente. Além disso, as áreas de entrada do combustor foram consideradas para determinar as velocidades. A área de entrada do combustível, A_{fuel} , foi calculada utilizando a fórmula πr^2 , onde r é igual a $2,54 \cdot 10^{-3}$ m. A área de entrada do ar, A_{air} , foi calculada utilizando a fórmula $\pi(r_e^2 - r_i^2)$, com r_i igual a $0,635 \cdot 10^{-3}$ m e r_e igual a $2,54 \cdot 10^{-3}$ m.

No início da simulação, considerou-se que o ar preenchia o interior do combustor, e sua composição foi estabelecida com frações molares de $Y_{O_2,inlet} = 0,232$, $Y_{N_2,inlet} = 0,768$, e $Y_{AR,inlet} = 1$.

Neste estudo, foram adotadas condições de contorno conforme resumido nas Tabelas 2 e 3. Na saída do combustor, a pressão foi fixada em 101325 Pa. As entalpias do metano e do ar a 298 K são representadas por $h_{combustível}@298K$ e $h_{ar}@298K$, respectivamente. Durante a simulação, a entalpia da mistura de gases é atualizada a cada instante para manter as paredes internas e a parede de entrada a uma temperatura constante de 298 K. Essa atualização é realizada usando a seguinte fórmula:

$$h_{mix} = \sum_{k=1}^n Y_k \cdot h_k@298K, \quad (4.1)$$

onde Y_k representa a fração molar de cada componente na mistura.

Tabela 3 – Configurações da simulação

Configuração	Valor
Pressão	101325 [Pa]
T_{ref}	298 [K]
R	8314,3 [$JKmol^{-1}K^{-1}$]
ρ_{CH_4}	0,657 [kg/m^3]
ρ_{CH_4}	0,657 [kg/m^3]
u_{ar}	0,045 [m/s]
u_{CH_4}	0,0988 [m/s]
M_{CH_4}	16,04 [$Kg/Kmol$]
M_{ar}	28,98 [$Kg/Kmol$]
Y_{O_2}	76%
Y_{CH_4}	24%
Passo de tempo CFD	$1 \cdot 10^{-4}$
n - passos internos	15000
Passo de tempo reação	$6,66 \cdot 10^{-9}$

4.1 Malhas

Utiliza-se uma malha não estruturada com elementos finitos triangulares para representar o domínio, enquanto uma segunda malha, composta por volumes de controle

poligonais, é utilizada para discretizar as equações diferenciais de conservação.

Com o objetivo de avaliar a sensibilidade dos resultados em relação a malha, foram criadas três malhas distintas que são apresentadas na tabela 4 :

Tabela 4 – Características das Malhas

Malha	N ^o de nós	N ^o de elementos
Malha grossa	2121	4000
Malha média	3721	7200
Malha fina	7171	14000

Foi usado um computador pessoal com as seguintes configurações: Intel(R) Core(TM) i3-6006U CPU @ 2.00GHz, 4GB de RAM memória DDR4, SSD de 490GB e sistema operacional Windows 10 HOME 64 bits, cada uma das simulações contou com 50000 passos com um passo de tempo de δt de $1 \cdot 10^{-5} s$ até que fossem simulados 0,5 segundos de tempo real, vale dizer que 0,5 segundos equivale a formação completa da chama estudada de modo que se posso comparar os valores experimentais de (MITCHELL, 1975), os valores simulados por (FERRACUTI, 2020) utilizando o mecanismo detalhado GRI-Mech 3.0 e os valores simulados com o mecanismo de passo duplo de (WESTBROOK; DRYER, 1981) e o mecanismo (SMOOKE; MITCHELL; KEYES, 1986) nesse trabalho.

As malhas utilizadas na simulação:

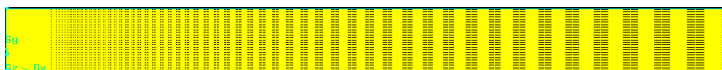


Figura 4 – Malha grossa

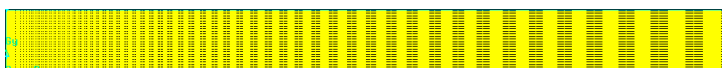


Figura 5 – Malha média

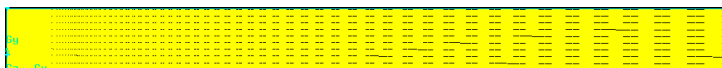


Figura 6 – Malha fina

4.2 Resultados de convergência

Ao examinar a Tabela 5, percebemos que o tempo de simulação foi rápido, considerando a complexidade do problema. No entanto, é crucial destacar que, devido à considerável quantidade de espécies e reações, a implementação do mecanismo pode exigir um tempo significativo para sua execução. Apesar disso, uma vez concretizada, ela tem

Tabela 5 – Resultados de convergência

	Passo duplo	SMOOKE
Interações	50000	8000
Tempo de simulação (s)	44520	129600
Resíduos "u"	$1,35 \cdot 10^{-5}$	$2,04 \cdot 10^{-5}$
Resíduos "v"	$1,02 \cdot 10^{-6}$	$1,29 \cdot 10^{-6}$

a capacidade de produzir resultados confiáveis em um intervalo de tempo justificável para garantir a convergência e precisão dos resultados, como será evidenciado nos resultados subsequentes.

4.3 Resultados da simulação

As figuras abaixo apresentam resultados da simulação.

O objetivo por detrás da simulação de três malhas é encontrar uma malha com convergência satisfatória com os resultados experimentais, de modo que o refinamento dessa malha não venha a mostrar grande melhora nos resultados. Isso é feito para que a malha utilizada para a simulação com o mecanismo reduzido tenha bons resultados sem ser demasiadamente grande, o que teria um impacto negativo ao aumentar demais o tempo de simulação CFD da combustão, inviabilizando a realização do trabalho dentro do tempo proposto.

Por meio da simulação de 3 diferentes malhas, notou-se que, a malha média de 7200 elementos tem convergência satisfatória com os resultados experimentais, da simulação com mecanismo detalhado, seja em passo único ou passo duplo, principalmente na distância $Z = 1,2$ cm. Além disso, os resultados entre a malha média e a malha fina não mostraram grande divergência, e portanto esta será utilizada para a simulação com o mecanismo do SMOOKE.

A figura acima mostra o resultado final da simulação da combustão no combustor de Mitchell com a implementação do mecanismo do SMOOKE, é possível ver que os resultados estão bem mais convergências com os resultados experimentais e aqueles obtidos pelo mecanismo detalhado GRI-MECH 3.0, elucidando que o uso de mecanismos reduzidos pode ser utilizado sem grandes perdas de precisão quando comparado a modelos mais refinados.

A figura 15 mostra as concentrações de alguns elementos conforme ocorre a combustão. É possível ver as concentrações de CH_4 e O_2 diminuindo, ao passo que as concentrações de outros elementos aumentam conforme a queima ocorre. Dentre as informações que podem ser extraídas, vê-se o aumento de concentrações de CO_2 e CO até o último instante em que a concentração de C_0 começa a cair, resultados como estes também são

de grande valia no estudo da formação de poluentes.

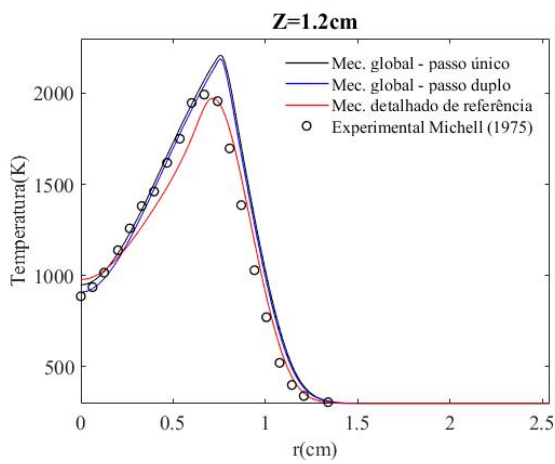
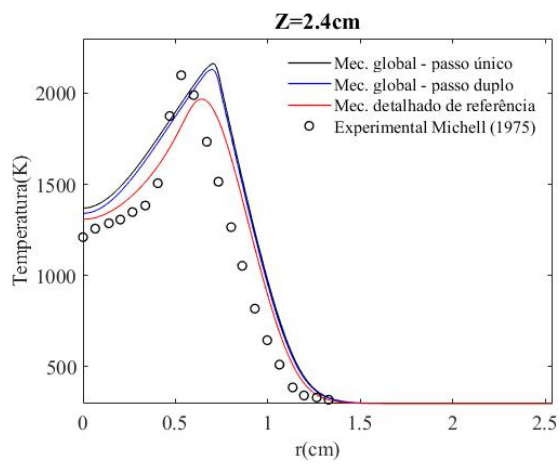
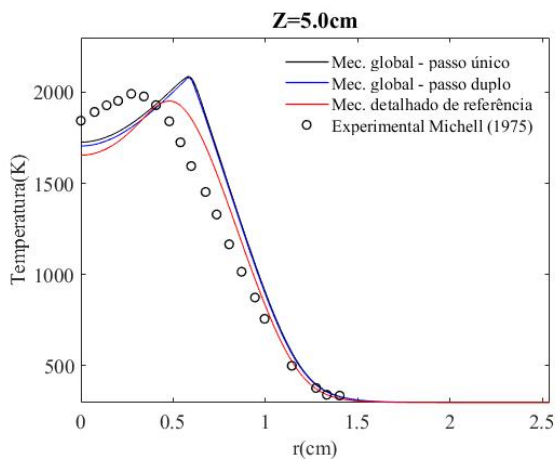
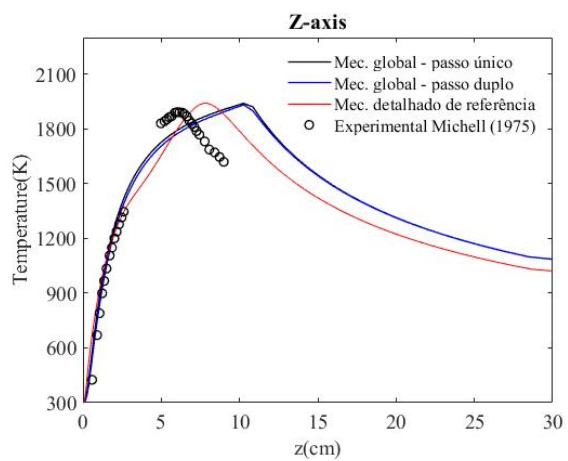
Figura 7 – Malha média em $Z = 1,2$ cmFigura 8 – Malha média em $Z = 2,4$ cmFigura 9 – Malha média em $Z = 5$ cm

Figura 10 – Malha média ao longo do eixo Z

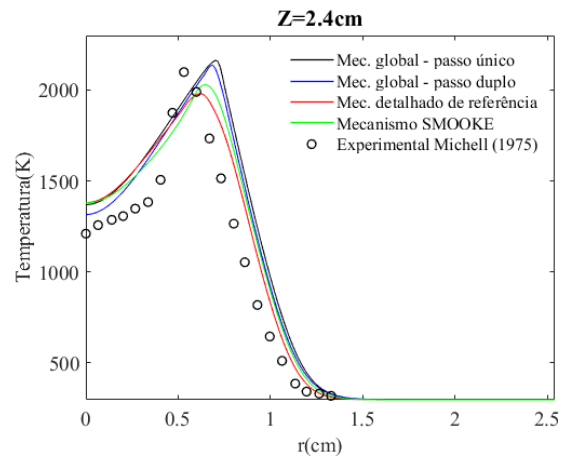
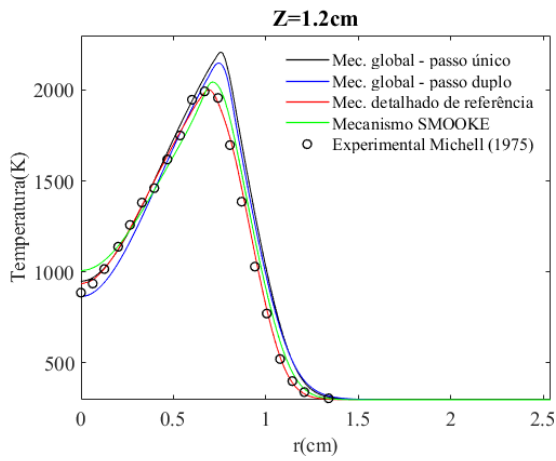


Figura 11 – Resultado final em $Z = 1,2$ cm

Figura 12 – Resultado final em $Z = 2,4$ cm

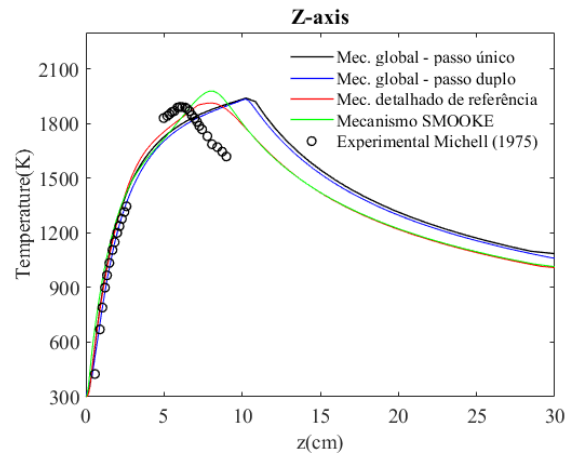
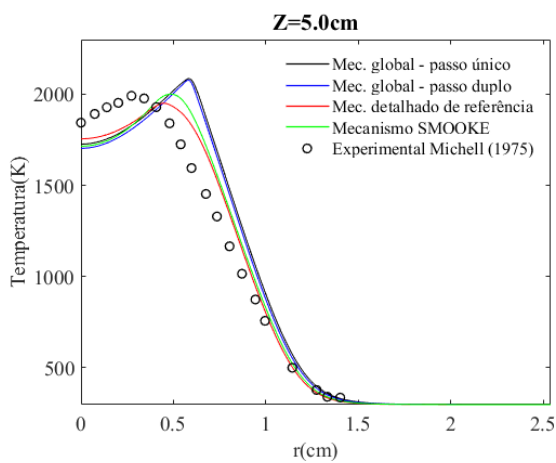


Figura 13 – Resultado final em $Z = 5$ cm

Figura 14 – Resultado final ao longo do eixo Z

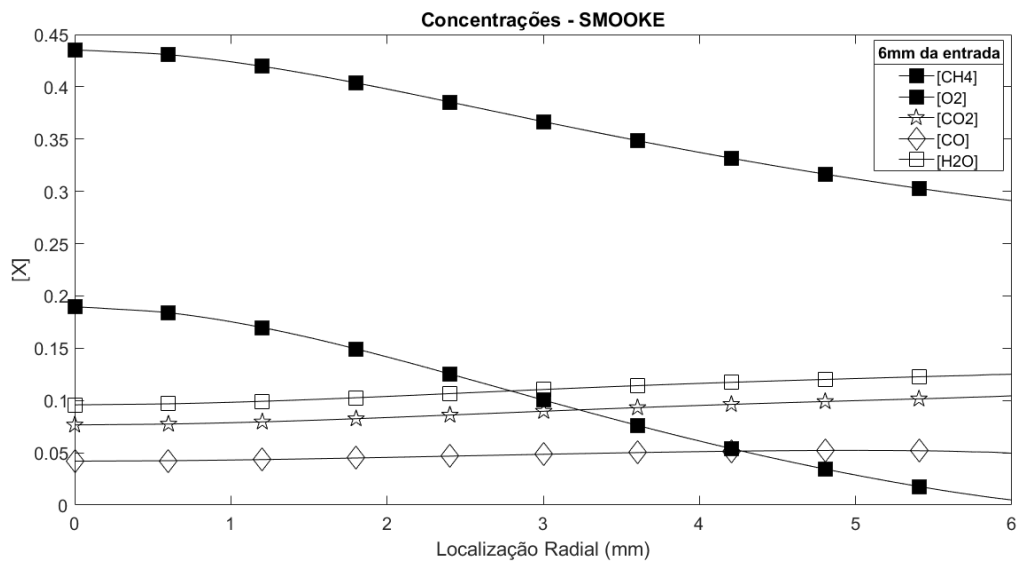


Figura 15 – Concentrações

5 Conclusão

Neste trabalho foram revisados os conceitos e formulações matemáticas importantes para a simulação CFD de chamas laminares difusivas do metano, apresentação combustor do (MITCHELL, 1975) e suas condições de contorno, funcionamento de modelos matemáticos usados para a modelagem do problema e a escolha adequada de malhas para uso em simulação e a implementação de um mecanismo de reação para comparação de resultados. O mecanismo de (SMOOKE; MITCHELL; KEYES, 1986), apesar de algumas inconsistências com os resultados experimentais, conseguiu acompanhar sua tendência e mostrou boa convergência de resultados com o mecanismo GRI-MECH 3.0 e um tempo de simulação significamente menor, a implementação de um maior número de passos aumentou notavelmente a precisão do mecanismo quando comparado a mecanismos globais.

Referências

- BURKE, S. P.; SCHUMANN, T. E. W. Diffusion flames. *Industrial & Engineering Chemistry*, v. 20, n. 10, p. 998–1004, 1928. Citado na página 22.
- CLARAMUNT, K. et al. Multidimensional mathematical modeling and numerical investigation of co-flow partially premixed methane/air laminar flames. *Elsevier*, p. Unknown, 2004. Citado na página 23.
- CUNHA, F. A. da. *Modelo Matemático para Estudo de Processos Reativos de Partículas de Carvão e Biomassa*. Tese (Tese de Doutorado em Ciências Mecânicas) — Universidade de Brasília, Brasília/DF, Brasil, 2010. Publicação: ENM.TD-08 A/10. Citado 2 vezes nas páginas 35 e 37.
- CUNHA, F. A. da; VERAS, C. A. G. Modelling laminar diffusion flames using a fast convergence three-dimensional cvfem code. *Combustion Theory and Modelling*, Taylor & Francis, v. 25, n. 3, p. 460–487, 2021. Citado 3 vezes nas páginas 11, 25 e 36.
- CUOCI, A. et al. A computational tool for the detailed kinetic modeling of laminar flames: Application to $\text{C}_2\text{H}_4/\text{CH}_4$ coflow flames. *Combustion and Flame*, Elsevier, v. 160, n. 5, p. 870–886, 2013. Citado na página 24.
- DASGUPTA, A. *Numerical simulation of axisymmetric laminar diffusion flames with soot*. Tese (Doutorado) — The Pennsylvania State University, 2015. Citado na página 24.
- DUARTE, D. G. Modelagem e simulação numérica da combustão gasosa laminar sem pré-mistura. Universidade de Brasília, 2015. Citado na página 29.
- FARIAS, M. L. de. Combustão e seus efeitos: Um estudo sobre concepções de alunos do ensino técnico do cefet-rs, visando à educação ambiental. CEFET/RS, 2007. Citado na página 29.
- FERRACUTI, F. A. da Cunha e P. Modelagem cfd da combustão com mecanismo de cinética química detalhada para escoamento incompressível laminar. *Revista de Iniciação Científica e Extensão - RIPE*, v. 6, n. 2, p. 81–91, 2020. ISSN 2447-6102. Citado 5 vezes nas páginas 11, 33, 35, 49 e 51.
- IMREN, A.; HAWORTH, D. On the merits of extrapolation-based stiff ode solvers for combustion cfd. *Combustion and Flame*, Elsevier, v. 174, p. 1–15, 2016. Citado na página 43.
- KANURY, A. M. *Introduction to Combustion*. 1st. ed. Boca Raton, FL: CRC Press, 1986. ISBN 978-0849364708. Citado na página 21.
- KEE, R. A. *A Fortran Chemical Kinetics Package for the Analysis of Gas-Phase Chemical Kinetics*. [S.l.], 1993. Citado na página 45.
- LAW, C. K. *Combustion Physics*. 1st. ed. Cambridge, UK: Cambridge University Press, 2006. ISBN 978-0521676736. Citado 5 vezes nas páginas 21, 22, 30, 33 e 47.

- LUO, R.; MA, P.; LU, T. Numerical simulation of soot evolution in laminar coflow methane/air diffusion flames. *Combustion and Flame*, v. 162, n. 1, p. 159–175, 2015. Citado na página [24](#).
- MCALLISTER, S. *Combustion*. 1st. ed. Amsterdam, Netherlands: Elsevier, 2011. ISBN 978-0123750491. Citado 2 vezes nas páginas [21](#) e [22](#).
- MITCHELL, R. E. *Nitrogen Oxide formation in laminar methane-air diffusion flames*. Tese (Tese de Doutorado) — Massachusetts Institute of Technology, Cambridge/Massachusetts, EUA, 1975. Citado 5 vezes nas páginas [11](#), [49](#), [51](#), [57](#) e [61](#).
- MITCHELL, R. E.; SAROFIM, A. F.; CLOMBURG, L. A. Experimental and numerical investigation of confirmed laminar diffusion flames. *Combustion and Flame*, Elsevier, v. 37, p. 227–244, 1980. Citado na página [22](#).
- PETERS, N.; KOCK, B. F. M. A laminar flamelet model for premixed methane combustion in spark ignition engines. *Combustion and Flame*, v. 112, n. 1–2, p. 123–138, 1998. Citado na página [23](#).
- SAABAS, H.; BALIGA, B. Co-located equal-order control-volume finite-element method for multidimensional, incompressible fluid flow - part i: Formulation. *Numerical Heat Transfer*, Taylor & Francis, v. 26, n. 4, p. 381–407, 1994. Citado na página [37](#).
- SAUER, T. *Numerical Analysis*. [S.l.]: Pearson Higher Ed, 2012. Citado na página [36](#).
- SEINFELD, J. H.; PANDIS, S. N. *Atmospheric Chemistry and Physics: From Air Pollution to Climate Change*. 1st. ed. New York, NY: Wiley, 1998. ISBN 978-0471178163. Citado na página [21](#).
- SILVA, C. V.; FRANÇA, F. H. R.; VIELMO, H. A. Analysis of the turbulent, non-premixed combustion of natural gas in a cylindrical chamber with and without thermal radiation. *Department of Mechanical Engineering, Federal University of Rio Grande do Sul, Porto Alegre, RS, Brazil*, 2007. Citado na página [23](#).
- SMOOKIE, M. D.; MITCHELL, R. E.; KEYES, D. E. Numerical solution of two-dimensional axisymmetric laminar diffusion flames. *Combustion Science and Technology*, Taylor & Francis, v. 67, n. 4-6, p. 85–122, 1986. Citado 8 vezes nas páginas [11](#), [23](#), [27](#), [43](#), [44](#), [45](#), [51](#) e [57](#).
- TURNES, S. R. *An Introduction to Combustion*. 3rd. ed. New York, NY: McGraw-Hill, 2012. ISBN 978-0073380193. Citado 4 vezes nas páginas [22](#), [37](#), [44](#) e [45](#).
- VEERSTEG, J. C. M.; MALALASEKARA, W. *Computational Fluid Dynamics for Engineers*. 1st. ed. Cambridge, UK: Cambridge University Press, 2007. ISBN 978-0521859649. Citado 2 vezes nas páginas [22](#) e [36](#).
- WANG, X. et al. Numerical investigation of laminar burning velocity for methane-hydrogen-air mixtures at wider boundary conditions. *Author links open overlay panel*, 2023. Citado na página [24](#).
- WARNATZ, J.; MAAS, U.; DIBBLE, R. W. *Combustion: Physical and Chemical Fundamentals, Modeling and Simulation, Experiments, Pollutant Formation*. 4th. ed. Berlin, Germany: Springer, 2006. ISBN 978-3540259922. Citado 2 vezes nas páginas [22](#) e [37](#).

WESTBROOK, C. K.; DRYER, F. L. Simplified reaction mechanisms for the oxidation of hydrocarbon fuels in flames. *Combustion Science and Technology*, Taylor & Francis, v. 27, n. 1-2, p. 31–43, 1981. Citado 2 vezes nas páginas 38 e 51.

WHITE, F. M. *Fluid Mechanics*. 8th. ed. New York, NY: McGraw-Hill, 2017. ISBN 978-0073398273. Citado 2 vezes nas páginas 30 e 31.

XU, C.; KONNOV, A. A. Validation and analysis of detailed kinetic models for ethylene combustion. *Energy, Elsevier*, v. 43, n. 1, p. 19–29, 2012. Citado na página 38.

XU, Y.; SMOOKE, M. D. Application of a primitive variable newton's method for the calculation of an axisymmetric laminar diffusion flame. *Journal of Computational Physics*, Elsevier, v. 104, p. 99–109, 1993. Citado 2 vezes nas páginas 23 e 24.

ZETTERVALL, N.; FUREBY, C.; NILSSON, E. J. Evaluation of chemical kinetic mechanisms for methane combustion: A review from a cfd perspective. *Fuels, MDPI*, v. 2, n. 2, p. 210–240, 2021. Citado na página 38.

ZETTERVALL, N.; FUREBY, C.; NILSSON, E. J. K. Evaluation of chemical kinetic mechanisms for methane combustion: A review from a cfd perspective. MDPI, 2021. Citado na página 31.

5.1 APÊNDICE A

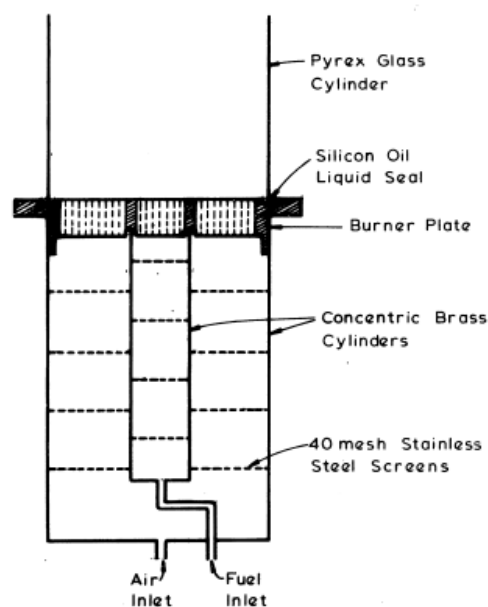


Figura 16 – Combustor de Mitchell Fonte: (MITCHELL, 1975)