

**UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
ESCOLA DE ENGENHARIA DE SÃO CARLOS**

André Marra Lopes

**Estudo inicial de modelo LES e Flamelet para Análise de
Combustão**

São Carlos

2020

André Marra Lopes

**Estudo inicial de modelo LES e Flamelet para Análise de
Combustão**

Monografia apresentada ao Curso de Engenharia Aeronáutica, da Escola de Engenharia de São Carlos da Universidade de São Paulo, como parte dos requisitos para obtenção do título de Engenheiro Aeronáutico.

Orientador: Prof. Dr. Paulo Celso Greco Júnior

**São Carlos
2020**

AUTORIZO A REPRODUÇÃO TOTAL OU PARCIAL DESTE TRABALHO,
POR QUALQUER MEIO CONVENCIONAL OU ELETRÔNICO, PARA FINS
DE ESTUDO E PESQUISA, DESDE QUE CITADA A FONTE.

Ficha catalográfica elaborada pela Biblioteca Prof. Dr. Sérgio Rodrigues Fontes da
EESC/USP com os dados inseridos pelo(a) autor(a).

Lopes, André Marra
Estudo inicial de modelo LES e Flamelet para
LL864e Análise de Combustão / André Marra Lopes; orientador
Paulo Celso Greco Júnior. São Carlos, 2020.

Monografia (Graduação em Engenharia Aeronáutica)
-- Escola de Engenharia de São Carlos da Universidade
de São Paulo, 2020.

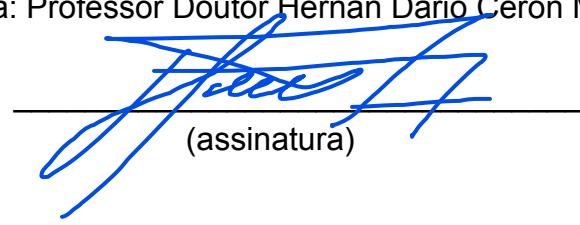
1. Combustão. 2. CFD. 3. LES. 4. Viabilidade. 5.
Flamelet. I. Título.

FOLHA DE APROVAÇÃO

Candidato: André Marra Lopes
Título do TCC: Estudo inicial de modelo LES e Flamelet para Análise de Combustão
Data de defesa: 09/12/2020

Comissão Julgadora	Resultado
Professor Doutor Hernan Dario Ceron Muñoz	
Instituição: EESC - SAA	
Professor Associado Marcello Augusto Faraco de Medeiros	
Instituição: EESC - SAA	

Presidente da Banca: Professor Doutor Hernan Dario Ceron Muñoz


(assinatura)

AGRADECIMENTOS

Em primeiro lugar, gostaria de agradecer a minha família pelo apoio e confiança que me deram em todos esses anos longe de casa. A minha mãe, Sonia Gimenes Marra, a meu pai, Albacir Lopes de Souza, e a meu irmão, Matheus Marra Lopes. Se não fosse por eles, nada disso seria possível, toda essa trajetória que me orgulho muito.

A todos meus amigos que conheci fora da universidade, que sem o suporte e amizade toda esse teria sido bem mais difícil, e tedioso. A todos os amigos que fiz na graduação que em momentos de dificuldade serviram de apoio, como professores nas horas de desespero e me propiciaram momentos de alegria. A todas as noites passadas em claro, aos trabalhos feitos em grupo e as conversas entre as aulas.

Aos bons amigos que fiz no TOPUS, que me levaram onde eu jamais imaginaria pisar, seja nos Estados Unidos ou em um curso técnico de fabricação mecânica. Aos principais dessa trajetória Jhonatan, Rodrigo e Jorge, principais pilares que nos permitiram ir tão longe. As noites em claro que já não eram poucas que escolhi passar em claro para levar o nome da universidade mais longe. Agradeço a todos os técnicos da USP(e amigos) que me ajudaram durante a graduação, e aceitaram todos os meus pedidos de bom grado. Sem eles o engenheiro que eu vou me tornar não seria possível.

Um agradecimento em especial ao professor Paulo Greco, meu orientador e coordenador do TOPUS. Sem o seu apoio e conhecimento, desde os meus tempos de bixo no TOPUS até a elaboração desse trabalho de conclusão de curso. Agradeço também ao professor Ricardo, e ao professor Catalano que me permitiram participar do HPA, e todos os amigos que fiz nessa aventura.

Um agradecimento final a Gabriela Peron, minha namorada, que me apoiou, incentivou e tolerou durante a graduação e fora dela, sem ela nada disso seria possível. Deixo essa frase que ilustra bem o meu tempo na Universidade de São Paulo, estudante e hobbysta: *sic itur ad astra*.

RESUMO

LOPES, A. M. **Estudo inicial de modelo LES e Flamelet para Análise de Combustão.** 2020. 48p. Monografia (Trabalho de Conclusão de Curso) - Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2020.

O uso de ferramentas computacionais para a mecânica dos fluidos tem sido popularizada nas últimas décadas. A presença do método RANS como dominante se explica devido a grande aplicação nos mais diversos problemas, e no menor custo computacional entre as opções. Apesar de ser o método mais difundido, apresenta limitações que são supridas por outros métodos como LES, DNS, etc. Com a redução as limitações também se inclui o aumento do custo computacional, e outras restrições surgem. O uso do método LES é objetivo de estudo desse trabalho dado aos interesses do Departamento de Engenharia Aeronáutica. Como objetivos estão aumentar a compreensão dos requisitos do uso de LES e compreender o custo computacional do modelo. Para realizar essa análise se utilizou de um experimento conhecido como SandiaD, idealizado pela Universidade de Sidney, devido ao interesse de estudo de simulação computacional em conjunto com a Texas AM University, parceira do Departamento de Engenharia Aeronáutica. O experimento consiste em uma chama de metano-ar, um caso com combustão relativamente simples para se analisar.

Palavras-chave: LES, Combustão, RANS, análise, comparação, flamelet, Fluent.

ABSTRACT

LOPES, A. M. **Initial study of LES and Flamelet for Combustion Analysis.** 2020. 48p. Monografia (Trabalho de Conclusão de Curso) - Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2020.

The use of computational fluid mechanics is widely been adopted in the last couple decades. The dominance of RANS as a method for simulating flow is based in the widely application for several flow cases, in the reduced computational cost if compared to other alternatives. Despite being the most adopted method, its limitations are fulfilled by solutions as LES, DNS, etc. With the restrictions reduced the computational cost is increased by consequence. The study of LES application for simulation is the focus of this work due to the interest of the Departamento de Engenharia Aeronáutica from the University of São Paulo. The main objective is to increase the comprehension of the requirements, leading to the understanding of the costs involved. For this work, an experimental case (Sandia D, from University of Sydnei) is selected due to the interest in cooperation with Texas AM University, who is conducting a study based in the same experiment. The case study consists in a flame of methane-air.

Keywords: LES, combustion, RANS, analysis, flamelet, fluent.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – Espectro de energia cinética. A energia é injetada nos menores números de onda (maiores escalas), e é transferida devido a instabilidade dos vórtices até as menores escalas, onde é dissipada. Autoria própria.	25
Figura 2 – Espectro de energia cinética. A microescala de Taylor se posiciona no início da região de dissipação, e a escala de Kolmogrov se posiciona no fim dessa escala, descrevendo os menores vórtices do escoamento. Autoria própria.	27
Figura 3 – Relação entre os modelos RANS, LES e DNS em função do que é calculado diretamente e o que é modelado. Autoria própria.	29
Figura 4 – Chama D, com enfase na saída do jato principal(circunferência interna) e da chama piloto(anel).	31
Figura 5 – Ilustração do domínio inicial utilizado.	33
Figura 6 – Seção do Domínio	33
Figura 7 – Vista da malha na seção de entrada dos gases.	34
Figura 8 – Temperatura. Ultima iteração da simulação. $t=0,5\text{s}$	38
Figura 9 – Fração mássica de O_2 . Ultima iteração da simulação. $t=0,5\text{s}$	38
Figura 10 – Fração mássica de CH_4 . Ultima iteração da simulação. $t=0,5\text{s}$	39

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Dimensões do domínio.	32
Tabela 2 – Condições de pressão e velocidade do jato e piloto.	32
Tabela 3 – Conjunto de Dados 1 obtidos do SandiaD.	47
Tabela 4 – Condições de pressão e velocidade do jato e piloto.	47
Tabela 5 – Condições de pressão e velocidade do jato e piloto.	47

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

CFD	Computational Fluid Dynamics
RANS	Reynolds Averaged Navier-Stokes
LES	Large Eddy Simulation
DNS	Direct Numerical Simulation
WALE	Wall Adapting Local Eddy-viscosity
SGS	Sub-grid Scale

LISTA DE SÍMBOLOS

∂	Operador de derivada parcial
ρ	Letra grega minúscula ro - densidade do fluido
u_i	Velocidade do fluido
\bar{u}	Velocidade média do fluido
u'	Residual da velocidade, variação em relação a média
τ	Pressão
t	Tempo
Re	Número de Reynolds (adimensional)
v	Velocidade
D	Comprimento característico
μ	Viscosidade dinâmica do fluido
x_i	Direção x,y, ou z para i =1,2,3 respectivamente
f	Forças externas aplicadas no elemento de fluido
ϕ	Razão combustível-ar em número de mols
Fx	Fração de mistura da molécula x
T	Temperatura em Kelvin
Yx	Fração mássica do elemento x
λ	Comprimento da microescala de Taylor
$\langle v' \rangle_{rms}$	Média quadrática da flutuação da velocidade média

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	21
1.1	Motivação	21
1.2	Objetivos	22
2	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	23
2.1	Mecânica dos Fluídos Computacionais	23
2.2	Turbulência	24
2.2.1	A cascata de Energia	25
2.2.2	A escala de Kolmogrov	25
2.2.3	A escala de Taylor	26
2.3	Modelos para Turbulência	27
2.3.1	RANS	27
2.3.2	LES	28
2.3.3	DNS	29
2.3.4	Combustão	29
2.4	Chama SandiaD	30
2.4.1	Chama Sandia D	30
2.4.2	A geometria e Condições de Contorno	31
3	METODOLOGIA	33
3.1	Geometria	33
3.2	Fronteira	34
3.3	LES	34
3.4	Máquina	35
4	RESULTADOS E DISCUSSÕES	37
4.1	Malha	37
4.2	Custo Computacional	37
4.3	Qualidade do Resultado	37
5	CONCLUSÃO E COMENTÁRIOS	41
	REFERÊNCIAS	43

ANEXOS **45**

ANEXO A – ANEXOS 47

1 INTRODUÇÃO

Com a modernização dos computadores, e a consequente evolução das ferramentas computacionais, o uso da Mecânica dos Fluidos Computacionais tem se tornado frequente em aplicações de engenharia, presente desde pequenas empresas a grandes multinacionais. A depender da estrutura computacional disponível, o uso dessas ferramentas pode fazer parte desde da avaliação de projetos com um grande nível de detalhamento até o uso em algorítimos de otimização em fases mais iniciais do projeto.

Segundo [Versteeg e Malalasekera \(2007\)](#) o modelo mais utilizado de Mecânica dos Fluidos Computacionais atualmente e por um futuro próximo são os modelos via Equações de Médias de Reynolds (RANS - Reynolds Averaged Navier-Stokes) que satisfazem as necessidades de valores médios(e.g. médias de velocidades, médias de tensões, médias de pressões) na maioria das aplicações de engenharia. Como os resultados são médias temporais dos valores, detalhes das flutuações instantâneas são perdidas com simulações dessa natureza, além disso a depender do sistema físico a ser simulado, podem ocorrer divergências como por exemplo no formato de um jato em uma camara de combustão, como observado pelo [Yang X.; Gupta e Gopalakrishnan \(2014\)](#).

Outros modelos como Simulações de Grandes Escalas (LES - Large Eddy Simulation), e as Simulações Numéricas Diretas (DNS - Direct Numerical Simulation) se tornam ferramentas mais apropriadas para modelos em que tem-se interesse nas flutuações temporais. Da mesma forma que esses últimos dois modelos apresentam melhores resultados, também tem o custo computacional significativamente mais elevado para domínios iguais.

1.1 Motivação

O estudo de casos em que o histórico temporal do escoamento é de grande interesse em principalmente estudos de combustão, troca de calor e aeroacústica. Dada essas aplicações, por interesse de alguns membros do Departamento de Engenharia Aeronáutica(EESC-USP) em combustão, faz-se a necessidade de quantizar o custo computacional e a viabilidade de métodos computacionais que forneçam o histórico temporal. O interesse também se faz devido a parceria com a Texas AM University, responsáveis pela pesquisa de dados experimentais termodinâmicos ([BARLOW et al., 2005](#)) para uso em simulações de escoamentos de alta velocidade reativos. Os pesquisadores compilaram os dados com o objetivo de serem utilizados para simulações utilizando o modelo flamelet para combustão. Os dados foram obtidos para uma chama pilotada de metano-ar que será contextualizada.

Entre as opções que satisfazem as necessidades citadas estão o LES e o DNS, sendo que a segunda é conhecida notoriamente por tem um custo computacional elevadíssimo,

inviável dada as necessidades e recursos disponíveis. O principal interesse do departamento é o estudo de combustão, principalmente em motores de combustão interna, em especial motores-foguete.

Além do interesse em quantizar o custo computacional ao se utilizar o LES, tem-se pouco conhecimento prático sobre o custo do cálculo da combustão, e principalmente interesse em se utilizar flamelet com dados termodinâmicos obtidos por passageiros do departamento, como já citado. Tal uso reduziria o custo computacional de escoamentos com combustão. Em resumo, tem-se os seguintes problemas:

- Falta de conhecimento prático do custo quantitativo computacional de LES;
- Falta de conhecimento na definição dos parâmetros de malha e simulação LES;
- Falta de experiência no uso de modelos flamelet;

Dessa forma, o presente trabalho se propõe a trazer um maior conhecimento sobre simulações LES, geração de malha adequada, e o uso de modelo de combustão flamelet.

1.2 Objetivos

Devido ao interesse do Departamento de Engenharia Aeronáutica (EESC-USP) em propulsão, e consequentemente em combustão, faz-se necessária a análise de alternativas aos Modelos RANS, dada a necessidade da obtenção informações que tais modelos não fornecem. Tal interesse se alinha com a parceria com a Texas AM University, que tem pesquisadores atuando no estudo geração de dados para aplicação em modelos flamelet. Os dados são baseados em uma chama piloto metano/ar inicialmente proposta pela Universidade de Sydnei. Com essa chama como objeto de modelagem temos como objetivos:

- Compreender os pontos críticos na modelagem do problema (e.g. dimensões, fronteiras, condições de fronteiras, refinamento de regiões);
- Comparar o custo computacional de simulação RANS e LES para um mesmo domínio;
- Quantizar o custo computacional de cada configuração;
- Quantizar o custo computacional de cada modelo físico na simulação LES (e.g. cinemática, combustão, compressibilidade).

Todas as simulações serão feitas através do software Ansys Fluent e base de dados experimentais utilizada será a fornecida pela universidade de Sydnei, da chama Sandia D ([BARLOW; FRANK, 2007](#)), de forma pavimentar o caminho para a cooperação com a Texas AM University.

2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

2.1 Mecânica dos Fluídos Computacionais

A mecânica dos fluidos computacionais é uma área de estudo que envolve desde modelagem física do problema até as ferramentas para resolução do problema de forma computacional. Usualmente referida como CFD, do inglês *computational fluid dynamics*, tem seu uso difundido na indústria, desde o setor aeroespacial, civil, pesquisa meteorológica, energética, entre outras. Alguns problemas comumente estudados estão:

- Corpos Aerodinâmicos;
- Fenômenos Meteorológicos;
- Aquecimento, ventilação;
- Combustão;
- Correntes Oceânicas;
- Trocadores de Calor;

O uso de mecânica dos fluídos se dá principalmente como alternativa a experimentos, que muitas vezes tem o custo elevado dada a necessidade de equipamentos de medição, escalas próximas a 1:1 para manter a semelhança do escoamento, e equipamento para gerar o escoamento(túneis de vento, combustores, etc). Dado o estado atual da tecnologia, nem sempre é possível substituir experimentos por simulações dado a necessidade de informações sobre o escoamento ou complexidade do mesmo devido ao custo e os recursos disponíveis do interessado. Como exemplo temos geometrias muito complexas, problemas multifísicos, problemas multifásicos, e informações temporais sobre o escoamento, que tem um impacto no custo computacional.

A mecânica dos fluidos tem como um dos alicerces mais importantes as equações de Navier-Stokes, que descrevem a conservação da massa e a conservação do momento para fluidos Newtonianos. Essas são equações parciais diferenciais, que na maioria dos casos não tem solução analítica encontrada, portanto requerem métodos numéricos para encontrar uma solução.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial [\rho u_j]}{\partial x_j} = 0 \quad (2.1)$$

$$\frac{\partial(\rho u_j)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}[\rho u_i u_j + p \delta_{ij} - \tau_{ji}] = 0, i = 1, 2, 3 \quad (2.2)$$

$$\frac{\partial(\rho e_0)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} [\rho u_j e_0 + u_j p + q_j - u_j \tau_{ij}] = 0 \quad (2.3)$$

A equação 2.1 descreve a continuidade do fluido, a equação 2.2 descreve a conservação do momento do fluido e por fim a equação 2.3 descreve a conservação da energia. Para se obter uma solução dessas equações quando não se tem uma solução analítica, é necessário utilizar-se de discretizações finitas do domínio espacial e temporal e aproximar as derivadas parciais. Com essas alterações pode-se obter um sistema linear, algo que pode ser resolvido por métodos numéricos computacionais. Resolver diretamente as equações citadas acima é custoso computacionalmente, e métodos para reduzir o custo serão descritos a seguir.

2.2 Turbulência

Diferentemente de um escoamento laminar, onde o fluido se comporta como laminas ao se deslocar, a turbulência já é um evento bem mais imprevisível. A turbulência é um fenômeno físico facilmente observável no cotidiano, seja a fumaça de um palito de fósforo, a água de um rio ou até um copo sendo enchido. Todos esses eventos se caracterizam pelo movimento não estacionário, irregular, aparentemente aleatório e caótico (POPE, 2001). Tais fenômenos intensificam a transferência de calor, momento e difusão no fluido, alternando o seu comportamento significativamente, além das forças oscilatórias observadas mais diretamente.

Pode-se caracterizar o escoamento turbulento como rotacionais, tridimensionais e dissipativos. Ser rotacional significa que as partículas do fluido tem rotação em relação ao próprio eixo, dissipativo significa que a energia cinética disponível reduz com o tempo, sendo transformada em energia interna do fluido.

Um número adimensional que caracteriza fluidos é o número de Reynolds. É obtido pela relação de forças iniciais e as forças viscosas, sendo normalmente utilizado como parâmetro para caracterizar o escoamento quanto ao fluxo: laminar ou turbulento. A equação é a seguinte:

$$Re = \frac{\rho v D}{\mu} \quad (2.4)$$

Onde ρ é a densidade do fluido, v é a velocidade do fluido, D é o comprimento característico do fluido, e μ é a viscosidade dinâmica do fluido. A caracterização do escoamento quando ao número de Reynolds não é algo universal, é dependente do fluido e da geometria sendo que um valor de Reynolds que o escoamento é turbulento em caso A, pode ser laminar em um caso B. Além disso, a transição de laminar para turbulento é gradual, mais ou menos, agressiva a depender das características do escoamento.

2.2.1 A cascata de Energia

Segundo (POPE, 2001, p.182), originalmente descrito por Richardson em 1922, a energia cinética adentra a turbulência (através do mecanismo de produção através do cisalhamento) nas maiores escalas do movimento. Essa energia então é transferida através de processos inviscidos para as escalas menores, até que é dissipada por efeitos de viscosidade. Para Richardson, cada vórtice tem um tamanho característico l_0 , e uma velocidade que é função de seu tamanho $u_0 = u(l_0)$. Para os grandes vórtices, a velocidade é da mesma grandeza que a da flutuação de velocidade observada no fluido. O número de Reynolds desses grandes vórtices, $R_{e_0} = u_0 l_0 / \nu$ é grande, portanto os efeitos de viscosidade são pequenos, e consequentemente a dissipação também.

Outro ponto defendido por Richardson é que os grandes vórtices são instáveis e se quebram, transferindo sua energia para vórtices menores. O processo se repete até que o número de Reynolds seja pequeno o suficiente para que os vórtices sejam estáveis, e a viscosidade molecular é responsável por dissipar a energia. Richardson também definiu a escala de tempo dos vórtices $\tau = l_0 / u_0$. Em suma, a energia cinética tem como entrada no processo de turbulência através dos grandes vórtices e é transferida até os pequenos vórtices, onde a energia é dissipada através da viscosidade molecular.

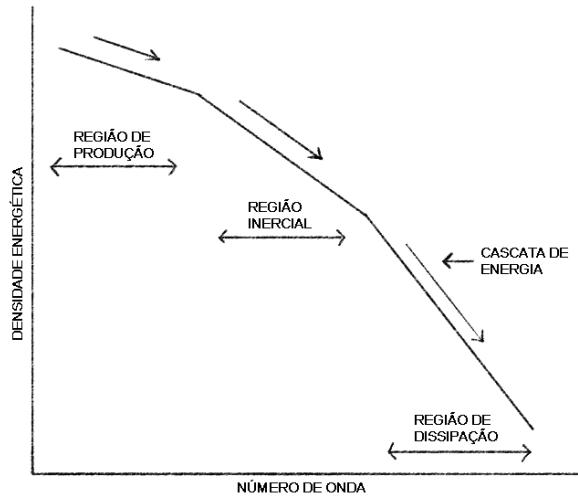


Figura 1 – Espectro de energia cinética. A energia é injetada nos menores números de onda (maiores escalas), e é transferida devido a instabilidade dos vórtices até as menores escalas, onde é dissipada. Autoria própria.

2.2.2 A escala de Kolmogrov

Richardson não descreveu como a velocidade e escala de tempo varia em função do tamanho do vórtice l , nem qual o tamanho dos vórtices responsáveis pela dissipação energética. Kolmogrov em 1941, elaborou três hipóteses para explicar em mais detalhes o funcionamento dos vórtices turbulentos.

A primeira hipótese diz que os movimentos turbulentos de pequena escala são isotrópicos. Isso implica que a informação direcional, e sobre a geometria dos grandes vórtices é perdida conforme a energia desce a cascata de energia. A segunda hipótese é referente as propriedades dos vórtices de pequena escala, que são unicamente descritos por ν e ϵ , viscosidade cinemática e dissipação viscosa respectivamente. A terceira hipótese é referente a região entre as grandes (produção) e pequenas (dissipação) escalas, a região inercial. A hipótese afirma que entre essas duas escalas tem uma forma universal dependente das maiores escalas, independente de ν . Com essas hipóteses, Kolmogrov foi capaz de descrever matematicamente o fluxo de energia na escala de energia de turbulência, desde o ponto onde a energia é injetada na cascata até o ponto onde é dissipada, incluindo a taxa transferência de energia entre as diferentes escalas de vórtice, conhecida como a regra dos $-5/3$, referente ao coeficiente angular do trecho inercial da cascata.

O ponto onde ocorre a dissipação é definido por Kolmogrov através de 3 parâmetros: comprimento, tempo e velocidade.

$$\eta = \left(\frac{\nu^3}{\epsilon} \right)^{1/4} \quad (2.5)$$

$$\tau_\eta = \left(\frac{\nu}{\epsilon} \right)^{1/2} \quad (2.6)$$

$$u_\eta = (\nu \epsilon)^{1/4} \quad (2.7)$$

2.2.3 A escala de Taylor

Outra escala relevante para análise energética da turbulência é a microescala de Taylor. Segundo (VALENTE; VASSILICOS, 2015), tal escala é a escala em que as forças viscósas afeta significativamente a dinâmica dos vórtices turbulentos. Como já descrito, tal ponto é chamado de escala dissipativa, região em que as forças viscósas são significativas o suficiente (e os vórtices terem uma vida mais longa) para que ocorra a dissipação energética.

A dimensão da microescala pode ser obtida por:

$$\lambda = \sqrt{15 \frac{\nu}{\epsilon}} < v' >_{rms} \quad (2.8)$$

Onde v_{rms} é a média quadrática da flutuação da velocidade média. O conceito de velocidade média e resíduo será explorada adiante. A microescala de Taylor pode ser aproximadas por:

$$\lambda = \sqrt{10 \nu \frac{k}{\epsilon}} \quad (2.9)$$

De forma ilustrativa, a microescala de Taylor e Kolmogrov se posicionam da seguinte forma no espectro energético:

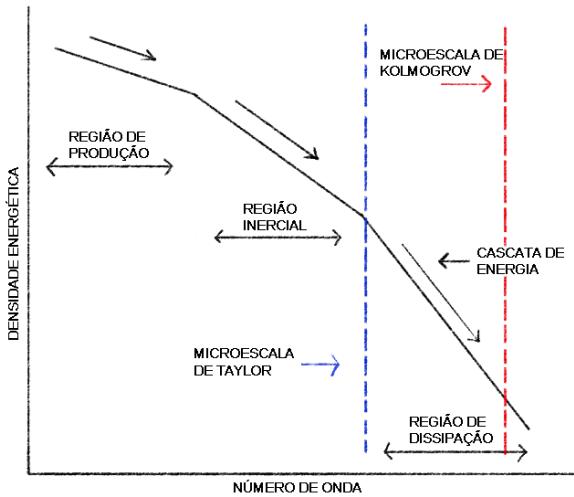


Figura 2 – Espectro de energia cinética. A microescala de Taylor se posiciona no início da região de dissipação, e a escala de Kolmogrov se posiciona no fim dessa escala, descrevendo os menores vórtices do escoamento. Autoria própria.

2.3 Modelos para Turbulência

2.3.1 RANS

Entre os modelos numéricos mais difundidos para predição de turbulência estão as Equações Médias de Reynolds(RANS - Reynolds Averaged Navier-Stokes), que se destacam como mais utilizada e o método menos custoso computacionalmente. Tem sido utilizado a mais de 3 décadas, tendo o maior número de estudos publicados entre todos os métodos que serão descritos nesse texto. A sua principal característica é a solução do escoamento médio, obtido através da média temporal das equações de Navier-Stokes, ou seja, não é possível obter informação histórica do escoamento.

O método de RANS se baseia na decomposição da velocidade em um valor médio e uma flutuação, conforme a equação abaixo.

$$u(x, y, z, t) = \bar{u}(x, y, z) + u'(x, y, z, t) \quad (2.10)$$

Ao se substituir tal decomposição na equação do momento, obtém-se a seguinte equação:

$$\rho \bar{u}_j \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} = \rho \bar{f}_i + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[-\bar{p} \delta_{ij} + \mu \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) - \rho \bar{u}'_i \bar{u}'_j \right] \quad (2.11)$$

O lado esquerdo representa o momento médio do fluido, já o lado direito tem presente o termo de força média (força gravitacional, eletromagnética, etc) sobre o elemento do fluido, e em seguida a tensão sobre o elemento. O primeiro termo é devido ao campo de pressão, o segundo termo é oriundo da viscosidade (descrito por Newton) e o terceiro termo, é o tensor aparente, mais conhecido como tensor de Reynolds. Esse ultimo termo é o objeto principal de estudo do método, tendo várias modelagens conhecidas.

Dada a natureza do RANS, a solução é dependente da modelagem da turbulência utilizada, portanto dada as propriedades do escoamento de estudo cada um ou outro método será mais adequado. Entre os modelos mais conhecidos estão os algébricos, o modelo de Spalart-Allmaras, $k - \epsilon$, $k - \omega$, modelo do Tensor de Reynolds, etc. Para o modelo RANS, dada a sua grande aplicação na indústria, existem diversos parâmetros e ferramentas para avaliar a qualidade da malha e do resultado obtido através da simulação. O modelo normalmente apresenta um bom resultado em camadas limites, pecando em casos onde existem múltiplas escalas de grandeza no domínio. Alguns casos onde a qualidade do resultado pode ser prejudicada é quando existe ondas de choque, gradientes de pressão, estagnação, e transição laminar-turbulenta.

2.3.2 LES

Diferentemente do modelo RANS que aproxima todas as escalas de turbulência, o modelo LES simula diretamente os maiores vórtices turbulentos e utiliza-se de aproximações dos menores vórtices de turbulência, de forma a reduzir o custo computacional. Tal feito é possível devido ao uso de um filtro passa-baixa aplicado às equações de Navier-Stokes. O trecho que foi filtrado, os vórtices turbulentos de menor escala são modelados a parte, dada a sua importância na dissipação energética da turbulência. Tal estratégia, se comparada com RANS, de forma geral tem menos aproximações das equações, portanto o resultado tende a ser mais próximo da solução direta das equações.

Segundo ([POPE, 2001](#)), o modelo se baseia nos principais pontos:

- A filtragem da velocidade em um termo que é resolvido diretamente, e um termo residual (escala sub-malha).
- O termo resolvido é feito através das equações de Navier-Stokes com a adição do tensor residual
- O resíduo é modelado por um modelo de viscosidade turbulenta.

O termo residual pode ser modelado de várias formas, sendo os modelos mais conhecidos o modelo de Smagorinsky, WALE. Em simulações LES, o resultado é dependente da malha, dado ao fato que a discretização altera o erro numérico e o quanto o modelo SGS impacta no resultado [Klein, 2005, Clik et., 2005]. O custo computacional elevado é uma das características do LES, que além de requerer uma malha mais refinada que RANS, é necessário ainda mais refinamento nas regiões de camada limite. Segundo Celik, citado por ([GAITONDE, 2008](#)), "um bom LES é quase um DNS", devido a correta predição de camada limite e predição de transição.

2.3.3 DNS

O modelo DNS resolve diretamente as equações de Navier-Stokes sem um modelo de turbulência, portanto é a solução com menos simplificações impostas. Além disso, é preciso que a malha e o passo temporal utilizado na simulação respeite as micro-escalas de Kolmogrov, ou seja, tem um passo temporal muito pequeno, e um refinamento de malha extremo tornando extremamente custosa a simulação. Além disso, por simular a turbulência em sua totalidade, e essa ser caótica, apresenta sensibilidade em relação as condições iniciais. Entre todos os modelos citados, é o que mais se aproxima da realidade.

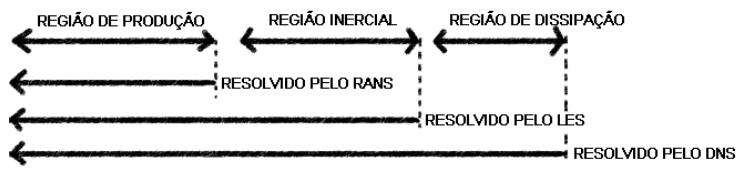


Figura 3 – Relação entre os modelos RANS, LES e DNS em função do que é calculado diretamente e o que é modelado. Autoria própria.

2.3.4 Combustão

Todos os modelos citados até aqui são puramente mecânicos, e atuam na determinação do movimento e propriedades físicas do escoamento. Em casos que existem outros fenômenos ocorrendo, por exemplo adição de energia no sistema ou forças externas, é necessário ter um modelo para realizar tais cálculos. Para o caso de estudo de interesse, a combustão, é necessário ter um modelo que possa fornecer as informações necessárias para o cálculo.

Segundo (PITSCH; STEINER, 2000), muitos modelos nos últimos anos vêm sendo proposto para aplicação em LES. Muito dos modelos já vêm sendo usados, ou podem ser aplicados para RANS com poucas modificações. Tais modelos podem ser divididos em quatro categorias: modelo direto, modelo linear-eddy, o método de transporte da função de distribuição de probabilidade(fdp), e o método da conservação escalar.

A modelagem direta da combustão é um problema desafiador. Entre os modelos, a modelagem das reações com as informações da escala resolvida resulta em resultados ruins, como mostrado por (COLUCCI et al., 1998). O motivo dessa divergência se dá devido a hipótese feita pelos modelos, em que as menores escalas resolvidas são estatisticamente similares as maiores escalas não resolvidas (escalas sub-malha), o que causa divergência com a realidade. A divergência vem do fato que a combustão turbulenta sem pré-mistura ocorrem através nas escalas dissipativas, e não nas escalas maiores não resolvidas. Dado esse problema, não é um modelo muito adequado para LES.

O método LEM (Linear-Eddy Model) da mistura escalar é descrita em linhas, os

vórtices lineares, que são transportados convectivamente com o escoamento médio. As equações unidimensionais que regem o modelo incluem transporte molecular e a convecção turbulenta.

O método de transporte da função de probabilidade já vem sendo aplicado a escoamentos reativos em simulações RANS e tem extensões para aplicações em LES. As extensões aplicam às escalas sub-malha funções de distribuição de probabilidade baseadas nas frações de massa das espécies envolvidas. Tal método apresenta boas previsões para a escala sub-malha, funcionando muito melhor para simulações LES do que RANS. O modelo flamelet se encaixa nessa categoria.

2.4 Chama SandiaD

Para validar um modelo computacional, é necessário ter um caso experimental para que se possa comparar os resultados com os dados medidos. Alguns requisitos para a escolha desse caso são que o experimento tenha confiabilidade, ou seja, tenha sido replicado por outras instituições para a validação, e tenha seja o mais completo para validar o máximo de parâmetros da simulação. Dado esses pontos, a chama Sandia D foi selecionada.

2.4.1 Chama Sandia D

Na Universidade de Sydney, foi desenvolvido um conjunto de experimentos de chama de difusão metano/ar com chama piloto, com o objetivo de disponibilizar os dados para comparação como parte do International Workshop on Measurement and Computation of Turbulent Nonpremixed Flames. Os dados medidos são a temperatura, fração de mistura N_2 , O_2 , H_2O , H_2 , CH_2 , CO , CO_2 , OH , e NO , e medições de velocidade. Os dados incluem um conjunto de 4 experimentos, C, D, E e F, nas quais a velocidade no jato principal e no jato piloto aumentam nos experimentos.



Figura 4 – Chama D, com enfase na saída do jato principal(circunferência interna) e da chama piloto(anel).

O jato é composto de uma parte de metano para 3 partes de ar em volume, tal proporção evita a formação de fuligem melhorando a acurácia das medidas escalares. A pre-mistura de metano e ar produz uma chama mais robusta e menor do que metano puro ou metano diluído no nitrogênio. Em consequência de todas essas escolhas, a chama pode ser operada com baixa ou nenhuma extinção local em números de Reynolds razoavelmente elevados, sendo turbulenta, mesmo com uma chama piloto modesta. A razão de mistura é alta o suficiente para que a chama seja de difusão, ou seja, existe uma única zona de reação próxima a queima estequiométrica.

A chama piloto, responsável por manter o jato aceso, é uma mistura pobre($\lambda = 1,29$) composta de C_2H_2 , H_2 , ar e N_2 com a mesma entalpia nominal e composição de equilíbrio que o jato. A energia liberada durante a combustão pela chama piloto é aproximadamente 6% do jato principal ([BARLOW; FRANK, 2007](#)).

2.4.2 A geometria e Condições de Contorno

A chama principal tem 7,2mm de diâmetro, e a parede do tubo tem 0,25mm de espessura. O diâmetro externo do piloto é de 18,2 mm com 0,35 mm de parede. Ao redor do jato, existe um fluxo de ar a 0,9 m/s ($\pm 2m/s$) a 291K e 0,993atm. Como já dito, o jato principal é composto de ar seco a 294K e 0,993 atm a 49,6m/s($\pm 2m/s$). A chama foi posicionada a 15cm da saída do túnel de vento, que tem 30cm por 30cm de seção.

Diametro interno do jato principal	7,2mm
Diametro interno do piloto	7,7mm
Diametro externo do piloto	18,2mm
Diâmetro Externo	18,9mm
Saída do Tunel de Vento	300mmx300mm

Tabela 1 – Dimensões do domínio.

Velocidade do Escoamento Externo	0,9m/s (\pm 0,05 m/s) @291K, 0,993 atm
Velocidade do Jato Principal	49,6m/s (\pm 2 m/s) @294K, 0,993 atm
Vicosidade do Jato Principal	1.58e-05 m^2/s (obtido do chemkin)

Tabela 2 – Condições de pressão e velocidade do jato e piloto.

As propriedades do escoamento inicial, como a fração mássica pode ser vista nos anexos 3, 4, 5.

3 METODOLOGIA

Para realização da simulação optou-se pelo uso das ferramentas distribuídas pela Ansys. Dentre elas, dada disponibilidade de licença e conhecimento prévio pelo orientador, o Fluent foi selecionado.

3.1 Geometria

Como referência, utilizou-se um domínio de dimensões semelhantes ao utilizado em outras publicações ([PITSCH; STEINER, 2000](#)) dada a concordância experimental. O domínio é constituído por um tronco de cone com comprimento de 576mm, com o diâmetro menor de 108mm e diâmetro maior de 288mm. O desenho técnico pode ser encontrado nos anexos [A](#).

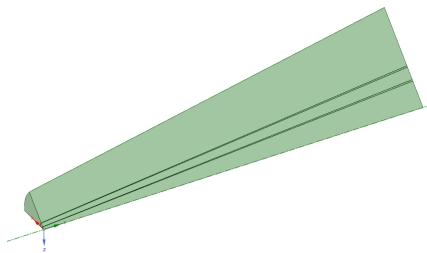


Figura 5 – Ilustração do domínio inicial utilizado.

Dada a simetria axial do escoamento, optou-se por simular apenas parte do domínio. Seccionou-se o domínio em uma cunha de 45° para reduzir o tempo de simulação e ainda assim captar os maiores vórtices, necessários para simulação.

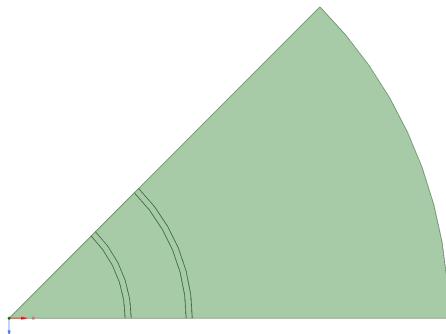


Figura 6 – Seção do Domínio

De forma a reduzir o custo computacional, optou-se por relaxar o refinamento da malha nas regiões onde existem menos gradientes do escoamento, ou seja, longe das

interfaces das três entradas de fluido.

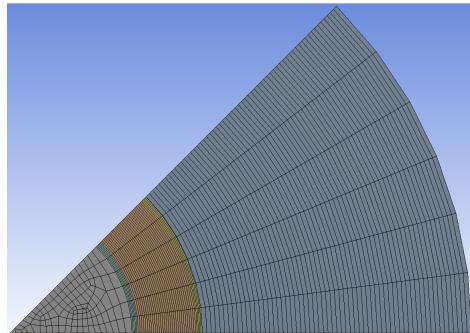


Figura 7 – Vista da malha na seção de entrada dos gases.

A discretização utilizada resultou em 167717 elementos e com 137856 nós, sendo o maior elemento tendo $30mm$, seguindo a referência de malha utilizada por ([PITSCH; STEINER, 2000](#)). Segundo a microescala de Taylor, o maior elemento deveria ser menor que $0.092426mm$, o que não se optou por cumprir devido a restrição computacional, e ao a boa qualidade dos resultados obtida pela referência utilizada.

3.2 Fronteira

Para a simulação, a entrada do jato principal, da chama piloto e o jato de menor velocidade ao redor utilizou-se a configuração de *velocity-inlet* presente no Fluent. A turbulência (oscilação RMS da velocidade) foi de 10% do valor da velocidade de cada jato. Para a saída foi escolhida a configuração de *pressure-outlet* do Fluent, sendo configurada com $0Pa$ de pressão relativa a entrada. Já a região circular, e as paredes da cunha foram configuradas como *symmetry*, ou seja, a velocidade na parede é sempre tangente a parede. A região da chama piloto, da imagem 4, onde se podem ver pequenas chamas foi considerada como uma região uniforme.

3.3 LES

Para a simulação LES, utilizou-se o modelo Smagorinsky–Lilly para a modelagem sub-malha. Com os seguintes parâmetros:

Cs	0,1
Energy Prandtl Number	0,85
Wall Prandtl Number	0,85
Turbulent Schimdt Number	0,7

Como parâmetros de simulação optou-se por simular 100 timesteps com $0.005s$ de intervalo, com 100 iterações por timestep. Tais configurações resultam em um flow thru de

0,0166 segundos, fazendo que o escoamento percorra 31 vezes o comprimento do domínio no tempo total de simulação. Para a modelagem da combustão, utilizou-se a modelagem do Fluent de Transporte de Espécies com reações Volumétricas. As concentrações na fronteira foram definidas conforme os dados experimentais. Nenhuma propriedade termodinâmica fornecida pelo Fluent foi alterada.

3.4 Máquina

Para a simulação, foi utilizada um computador pessoal, as configurações serão listadas abaixo. O Fluent foi configurado com processamento paralelo utilizando 14 threads. A função de precisão dupla foi ativada. As configurações da máquina utilizada estão abaixo:

Processador	AMD Ryzen 7 3700X
Memória RAM	2x8GB G.Skill 3466Mhz (XMP Ativado, Dual Channel)
Armazenamento	SSD 850 Evo 250GB
Placa Mãe	B550I AORUS PRO AX
Sistema Operacional	Windows 10 Build 19042

4 RESULTADOS E DISCUSSÕES

Os resultados obtidos serão discutidos abaixo.

4.1 Malha

Segundo a referência utilizada ([PITSCH; STEINER, 2000](#)) para a simulação, o elemento de malha utilizado era quase 300x maior que o obtido ao se calcular com a equação fornecida pela microescala de Taylor. Acredita-se que a qualidade dos resultados obtidos na referência, mesmo que em violação as recomendações gerais de malha, pode ser explicada pelas condições do escoamento. A microescala de Taylor descreve o tamanho a partir do qual os vórtices passam a ser dissipativos, portanto não quantiza o quanto a dissipação é significativa naquele domínio para aquelas condições de escoamento. No caso estudado, por ser um escoamento de alta velocidade, é razoável supor que o tempo que a molécula permanece no domínio é pequeno, portanto a presença de pequenos vórtices turbulentos é reduzida, justificando a boa qualidade do resultado (da referência) mesmo que com o uso de uma malha pouco refinada.

4.2 Custo Computacional

Para o caso específico estudado, com os parâmetros citados na seção [3](#) o tempo de simulação foi de 23 horas e 50 minutos. Uma simulação sem combustão também foi realizada resultando em 21 horas e 30 minutos, o que resulta em cerca de 11% a mais de tempo de simulação com a combustão habilitada. Para uma simulação RANS(sem combustão), com o mesmo refinamento de malha o tempo de simulação foi de cerca de 9,3 vezes menor que o tempo da simulação LES. Tal comparação é de certa forma grosseira já que nenhuma avaliação de independência de malha foi feita.

4.3 Qualidade do Resultado

Dos resultados obtidos sem ocorrência de combustão, estão ilustrados abaixo.

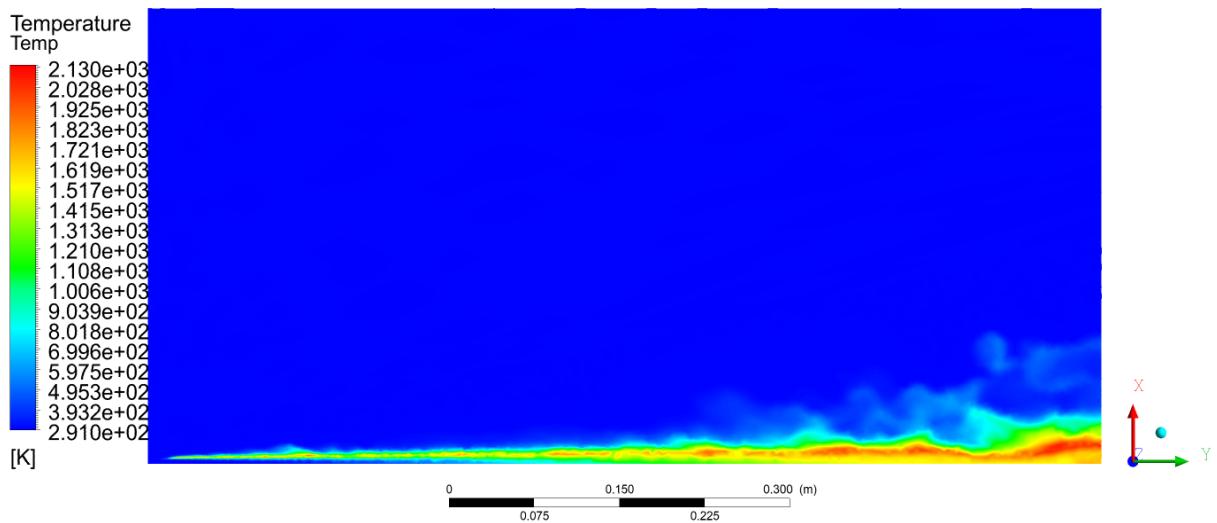


Figura 8 – Temperatura. Ultima iteração da simulação. $t=0,5\text{s}$



Figura 9 – Fração mássica de O_2 . Ultima iteração da simulação. $t=0,5\text{s}$



Figura 10 – Fração mássica de CH_4 . Ultima iteração da simulação. $t=0,5s$

Não foi realizada nenhuma análise quantitativa dos resultados em comparação ao experimento.

5 CONCLUSÃO E COMENTÁRIOS

O estudo realizado por esse trabalho nos mostra que o uso do modelo LES é custoso mas pode ser realizado dada algumas restrições. Em linhas gerais, o uso de modelos RANS é satisfatório para a maioria dos casos e é ainda o modelo mais recomendado, dado o conhecimento prévio dos membros do departamento, o custo computacional significativamente menor se comparado a outros modelos, e a relativa qualidade na solução dado o caso de estudo.

Já em problemas em que é necessário obter o histórico temporal, ou existem várias escalas no modelo, o modelo LES se apresenta como uma possível candidato. Como explicado, casos com camada limite são críticos, dada a presença de vórtices turbulentos extremamente pequenos, e requerem um refinamento de malha que aumenta significativamente o custo da simulação. Além disso, quanto mais complexo o caso de estudo, por exemplo reações químicas, campo elétrico, campo gravitacional, radiação, maior o custo envolvido na obtenção da solução, sendo que deve ser bem ponderado quanto devido aos recursos disponíveis.

Outro ponto importante é a não necessidade de cumprimento da microescala de Taylor para obtenção de bons resultados (observada nas referências) em que se supõe ser devido a ausência de camada limite, e o relativo tempo em que o escoamento permanece dentro domínio, reduzindo a influência dos pequenos vórtices turbulentos.

As conclusões obtidas a partir das simulações realizadas são as seguintes: a presença de combustão nesse caso específico aumentou o tempo de simulação em cerca de 10%, a simulação demonstrou um indicativo de bons resultados, indicando que a resolução de malha utilizada e os parâmetros são adequados. Além disso, o tempo de uma simulação LES é pelo menos uma ordem de grandeza maior que uma simulação RANS, guardada as devidas particularidades.

Em suma, o problema deve ser analisado quanto a real necessidade de uma simulação LES, e o quantos modelos físicos devem ser adicionados na simulação devido ao custo computacional. A possibilidade do uso de uma malha menos refinada que a microescala de Taylor deve ser o ponto crítico do estudo da viabilidade da simulação, separando a simulação do viável da simulação inviável. De forma geral, simulações LES apresentam um bom resultado de respeitadas todos os requisitos da simulação.

Como sugestão para estudos futuros está em compreender melhor os requisitos de malha, desde a encontrar alguma forma de quantizar o tamanho necessário de elementos, até uso de ferramentas mais avançadas como malha adaptativa. Além disso, seria de extremo benefício elaborar uma metodologia de análise do resultado em função dos dados

experimentais, assim como foi feito na referência (PITSCH; STEINER, 2000). Outro ponto para fomentar a parceria com a Texas AM University é compreender melhor os modelos de combustão, e quantizar precisamente os ganhos do uso do modelo Flamelet, em especial com os dados obtidos pelos pesquisadores.

REFERÊNCIAS

- BARLOW, R.; FRANK, J. Piloted ch4/air flames c, d, e, and f – release 2.1. <https://www.sandia.gov/TNF/DataArch/FlameD.html>, p. 1–12, 2007.
- BARLOW, R. et al. Piloted methane/air jet flames: Transport effects and aspects of scalar structure. **Combustion and Flame**, v. 143, n. 4, p. 433 – 449, 2005. ISSN 0010-2180. Special Issue to Honor Professor Robert W. Bilger on the Occasion of His Seventieth Birthday. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0010218005002282>>.
- COLUCCI, P. J. et al. Filtered density function for large eddy simulation of turbulent reacting flows. **Physics of Fluids**, v. 10, n. 2, p. 499–515, 1998. Disponível em: <<https://doi.org/10.1063/1.869537>>.
- GAITONDE, U. **Quality Criteria for Large Eddy Simulation**. [S.l.], 2008. 1-88 p.
- PITSCH, H.; STEINER, H. Large-eddy simulation of a turbulent piloted methane/air diffusion flame (sandia flame d). **Physics of Fluids**, v. 12, n. 10, p. 2541–2554, 2000. Disponível em: <<https://aip.scitation.org/doi/abs/10.1063/1.1288493>>.
- POPE, S. B. Turbulent flows. **Measurement Science and Technology**, IOP Publishing, v. 12, n. 11, p. 2020–2021, oct 2001. Disponível em: <<https://doi.org/10.1088%2F0957-0233%2F12%2F11%2F705>>.
- VALENTE, P.; VASSILICOS, J. The energy cascade in grid-generated non-equilibrium decaying turbulence. **Physics of Fluids**, v. 27, p. 045103, 04 2015.
- VERSTEEG, H. K.; MALALASEKERA, W. **An Introduction to Computational Fluid Dynamics, Second Edition**. United Kingdom, London: Pearson Prentice Hall, 2007. 65-100 p. ISBN 978-0-13-127498-3.
- YANG X.; GUPTA, S. K. T. X.; GOPALAKRISHNAN, V. Rans and large eddy simulation of internal combustion engine flows—a comparative study. **Journal of Engineering for Gas Turbines and Power**, v. 136, n. May, p. 1–10, 2014.

Anexos

ANEXO A – ANEXOS

phi	0.77
Fch	0.27
Yn2	0.734
Yo2	0.056
Yh2o	0.092
Yco2	0.110
Yoh	0.022

Tabela 3 – Conjunto de Dados 1 obtidos do SandiaD.

phi	0.77
Fch	0.27
T	1880 K (\pm 50 K)
rho	0.180 kg/m ³
Yn2	0.7342
Yo2	0.0540
Yo	7.47e-4
Yh2o	0.092
Yh2	1.29e-4
Yh	2.48e-5
Yh2o	0.0942
Yco	4.07e-3
Yco2	0.110
Yoh	0.022
Yno	4.8e-06

Tabela 4 – Condições de pressão e velocidade do jato e piloto.

Velocidade do Escoamento Externo	0,9m/s (\pm 0,05 m/s) @291K, 0,993 atm
Velocidade do Jato Principal	49,6m/s (\pm 2 m/s) @294K, 0,993 atm
Vicosidade do Jato Principal	1.58e-05 m ² /s (obtido do chemkin)

Tabela 5 – Condições de pressão e velocidade do jato e piloto.

