

ESCOLA POLITÉCNICA DA UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

NATÁLIA BERNARDI GHISI

**ESTUDO DE CONDIÇÕES DE INSTABILIDADES EM CÂMARAS
DE COMBUSTÃO DE MICRO-TURBINAS A GÁS**

São Paulo

2008

ESCOLA POLITÉCNICA DA UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA MECÂNICA

**ESTUDO DE CONDIÇÕES DE INSTABILIDADES EM CÂMARAS DE
COMBUSTÃO DE MICRO-TURBINAS A GÁS**

Trabalho de formatura apresentado à Escola
Politécnica da Universidade de São Paulo para
obtenção do título de Graduação em
Engenharia.

Natália Bernardi Ghisi

Orientador: Guenther
Carlos Krieger Filho, Eng.
Dr. Ing.

Área de concentração:
Engenharia Mecânica

São Paulo

2008

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

FICHA CATALOGRÁFICA

Ghisi, Natália Bernardi

Estudo de condições de instabilidades em câmaras de combustão de micro-turbinas a gás / N.B. Ghisi. – São Paulo, 2008.

74 p.

Trabalho de Formatura - Escola Politécnica da Universidade de São Paulo. Departamento de Engenharia Mecânica.

1.Combustão 2.Métodos numéricos em dinâmica de fluidos 3.Turbulência (Modelagem computacional) I.Universidade de São Paulo. Escola Politécnica. Departamento de Engenharia Mecânica II.t.

Dedico este trabalho aos meus
pais que tanto me apoiaram ao
longo de seu desenvolvimento.

AGRADECIMENTOS

Agradeço primeiramente a Deus por me dar perseverança para a realização deste trabalho. Agradeço também ao Prof.º Guenther pela paciência, dedicação e apoio fundamentais, sem os quais este trabalho não seria possível.

Ao Prof.º Fernando, pelas aulas de matemática que muito acrescentaram no entendimento e desenvolvimento do trabalho.

Aos meus colegas do LETE, pelo apoio, fornecimento de dados, discussões, amizade e por não desligarem as minhas simulações.

Aos meus colegas de curso, especialmente Rafael Cavalcanti, Francisco Profito, João Arthur e Guilherme Peresi pelos dias de estudos, discussões e amizade sempre presente.

Aos meus pais que me trouxeram calma e sabedoria durante a reta final do curso.

Enfim, a todos que de alguma forma colaboraram para que este trabalho fosse possível.

“Quando a noite esconde a luz, Deus acende as estrelas.”

Pe. Fábio de Melo

RESUMO

O objetivo deste trabalho é obter um modelo que avalie as condições de instabilidades na câmara de combustão de uma micro-turbina a gás, em função das vazões de ar e de combustível.

O modelo é obtido através da utilização de modelos de reatores existentes no software comercial Chemkin, onde será implementada a cinética detalhada do processo de combustão que ocorre no interior da câmara.

Para a avaliação das variações da taxa de turbulência no interior da câmara de combustão é feito um acoplamento com o software comercial de mecânica dos fluidos computacional Fluent. Os parâmetros da turbulência do escoamento no interior da câmara de combustão são utilizados como dados de entrada do modelo termodinâmico a ser simulado em Chemkin.

Posteriormente à obtenção desse modelo são feitas observações das condições de operação da micro-turbina a gás instalada no LETE com o objetivo de coletar dados para a validação do modelo obtido.

ABSTRACT

The purpose of this work is to obtain a model that measures the conditions of instability in the combustion chamber of a micro gas turbine, depending on the flow rate of air and fuel.

The model is obtained through the use of existing models of reactors in the commercial software Chemkin, where will be implemented by detailed kinetics of the combustion process that occurs inside the chamber.

For the evaluation of the variations in the rate of turbulence inside the combustion chamber, the commercial software of computational fluid mechanics Fluent is used. The parameters of turbulence of the flow of combustion chamber are used as data entry of the thermodynamic model to be simulated in Chemkin.

After obtaining such a model, will be carried out observations on the operational conditions of the micro gas turbine installed at LETE. With this data the validation of the model will be done and its constants will be adjusted for improving the representation of the chamber.

SUMÁRIO

LISTA DE FIGURAS

LISTA DE TABELAS

LISTA DE SÍMBOLOS

1.INTRODUÇÃO	1
1.1. Motivação	1
1.2. Funcionamento da Micro-Turbina a Gás	2
1.3. Câmara de Combustão	3
2.OBJETIVOS	5
3.METODOLOGIA	7
3.1. Descrição das etapas a serem desenvolvidas	7
3.2. Cronograma físico	9
4. MODELO TERMODINÂMICO DA CÂMARA DE COMBUSTÃO	10
5. ANÁLISE DO MODELO TERMODINÂMICO	15
6. UTILIZAÇÃO DE CFD PARA SIMULAÇÕES ACÚSTICAS	16
7.MODELOS DE REATORES QUÍMICOS	18
7.1. Reator de pressão constante e massa fixa	18
7.2. Reator de volume constante e massa fixa	19
7.3. Reator perfeitamente misturado(PSR)	19
7.4. Reator parcialmente misturado (PaSR)	20
7.5. Parâmetros utilizados no PaSR	22
8. ANÁLISE DOS MODELOS DE REATORES	24
9. MÉTODOS PDF PARA ESCOAMENTOS TURBULENTOS E REATIVOS	26
10. SIMULAÇÕES PRELIMINARES REALIZADAS EM CHEMKIN	33
11. PARÂMETROS DA CÂMARA DE COMBUSTÃO	40
12.SIMULAÇÕES UTILIZANDO OS DADOS DA CÂMARA DE COMBUSTÃO	42
13.CONCLUSÕES	48
14.BIBLIOGRAFIA	49
15.ANEXO I	50

16.ANEXO II	61
17.ANEXO III	64
18.ANEXO IV	69

LISTA DE FIGURAS

Figura 1. Representação do Ciclo Brayton

Figura 2. Equipamento atualmente instalado no LETE

Figura 3. Esquema da câmara de combustão

Figura 4. Regiões da câmara de combustão

Figura 5. Valores de k no interior da câmara de combustão

Figura 6. Valores de ε nas proximidades do swirler

Figura 7. Gráfico típico da função distribuição

Figura 8. Gráfico da PDF

Figura 9. Gráfico indicando a não-reação de metano com ar

Figura 10. Gráfico que caracteriza a combustão do propano

Figura 11. Gráfico de evolução de temperatura no interior do reator

Figura 12. Gráfico que ilustra o consumo de combustível

Figura 13. Fração molar do CH_4 na simulação #6

Figura 14. Fração molar de CO na simulação 36

Figura 15. Temperatura na simulação #6

Figura 16. Exemplo de função Delta de Dirac

Figura 17. Exemplos de curvas Gaussianas

Figura 18. Campo de velocidades

Figura 19. Distribuição discreta de massa

Figura 20. Esquema do exemplo simulado

Figura 21. Detalhe da malha gerada

Figura 22.Campo de velocidades

Figura 23.Detalhe do campo de velocidades, na entrada de ar e combustível

Figura 24.Fração de mistura de CH₄

Figura 25.Detalhe de fração de mistura de CH₄

Figura 26.Gráfico da fração de mistura e temperatura ao longo do comprimento do domínio

LISTA DE TABELAS

Tabela 1. Estado do fluido em cada ponto

Tabela 2. Cronograma de atividades

Tabela 3. Dados de entrada para 1ª a simulação

Tabela 4. Tabelas de simulação com PSR

LISTA DE SÍMBOLOS

E	energia
$\dot{m}$	fluxo mássico
T	temperatura
$\dot{Q}$	calor
P	pressão
γ	é a relação $\frac{c_p}{c_v}$ dos gases
ρ	massa específica
e	energia interna por unidade de massa dos gases
τ_{mist}	tempo característico de mistura
τ_{comb}	tempo característico de combustão
$\tau_{saída}$	tempo característico de saída
V	volume
t	tempo
c_p	calor específico
c_0	velocidade do som no fluído
$\bar{h}_i$	entalpia da espécie i
$\dot{w}_i$	taxa de produção da espécie i
$[X_i]$	concentração molar da espécie i
Y_i	fração mássica da espécie i
MW_i	peso molecular da espécie i

t_r	tempo de residência
t_{mix}	tempo de mistura
C_D	constante para tempo de mistura
$\tilde{k}$	energia cinética turbulenta média
$\tilde{\epsilon}$	dissipação da energia cinética turbulenta média
nm	não-misturabilidade
ξ	fração de mistura oxidante/combustível
C_ϕ	coeficiente de modelo de mistura
F_ϕ	função distribuição da variável ϕ
f_ϕ	função densidade de probabilidade da variável ϕ
Γ	difusividade
S_ϕ	taxa de reação

1. INTRODUÇÃO

1.1. Motivação

A utilização de micro-turbinas a gás é muito interessante no atual cenário, onde a demanda de energia vem aumentando e são necessárias formas alternativas de geração de energia elétrica.

Micro-turbinas a gás caracterizam uma classe chamada de “geração distribuída”, onde a geração de energia se dá no local onde ela será consumida, reduzindo assim os custos com linhas de transmissão. Os motores a diesel também fazem parte dessa classe de geração, porém as micro-turbinas apresentam vantagens sobre esses, como uma maior razão peso/potência.

Estudos sobre a geração de potência para acionamento de um gerador elétrico a partir de uma micro-turbina a gás estão sendo realizados no Laboratório de Engenharia Térmica e Ambiental (LETE) da Escola Politécnica da USP. Esses estudos são multidisciplinares, abrangendo várias frentes da engenharia mecânica, como o projeto aerotermodinâmico do segundo estágio da turbina, projeto mecânico dos componentes do conjunto, análise estrutural e dinâmica do rotor, simulações em CFD da câmara de combustão e, finalmente o estudo das instabilidades da câmara de combustão, objetivo desse trabalho.

Esse trabalho será desenvolvido paralelamente com a construção do segundo estágio para a micro-turbina atualmente instalada no laboratório. Essas instalações e os trabalhos de outros alunos envolvidos com o projeto serão utilizados como apoio para o desenvolvimento de modelos e experimentos necessários para a realização desse trabalho de formatura.

1.2. Funcionamento da Micro-Turbina a Gás

A micro-turbina a gás funciona de acordo com o ciclo Brayton. Ar atmosférico é admitido por um compressor e, após a compressão, segue para a câmara de combustão. Os gases quentes resultantes da queima são encaminhados para a turbina, onde ocorre a expansão e a conversão em trabalho de eixo.

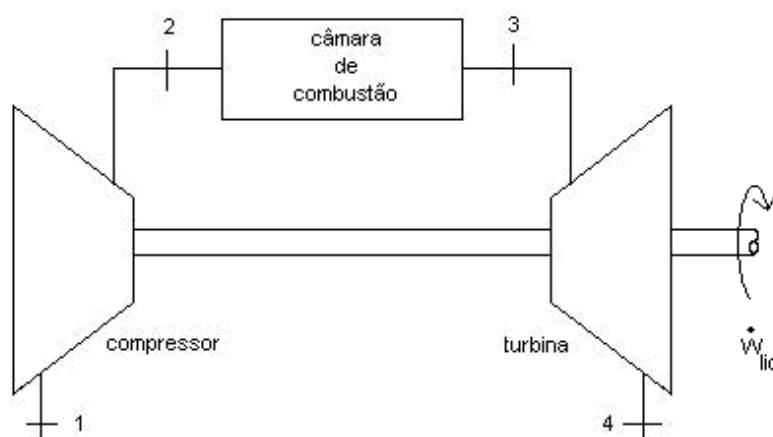


Figura 1. Representação do Ciclo Brayton.

O ciclo que opera atualmente no LETE possui os seguintes dados termodinâmicos para o fluido circulante:

Ponto	Temperatura[K]	Pressão[Pa]	Entalpia[kJ/kg]
1	300,0	101325,0	300,4
2	372,9	182385,0	373,9
3	973,0	182385,0	1015,0
4	858,8	101325,0	887,3

Tabela 1. Estados do fluido em cada ponto.

Esse ciclo utiliza um turbo-compressor automotivo comercial e uma câmara de combustão projetada e construída especialmente para o projeto.

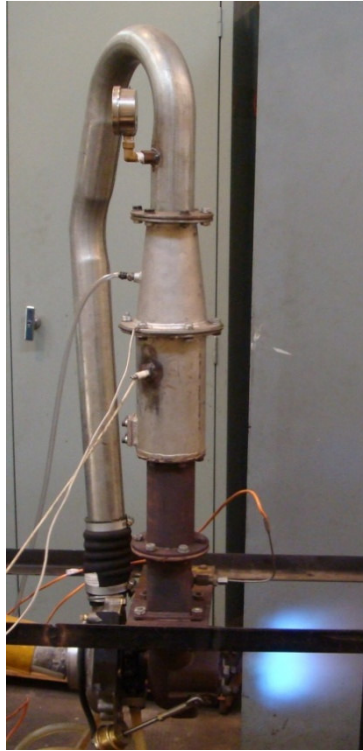


Figura 2. Equipamento atualmente instalado no LETE.

1.3. Câmara de Combustão

Na câmara ocorre a reação de combustão, que tem como objetivo aumentar a entalpia dos gases a serem expandidos na turbina.

Uma boa estabilidade do processo de combustão garante uma melhor operação da turbina, maiores rendimentos e diminuição na emissão de poluentes.

A câmara de combustão da micro-turbina a ser estudada é constituída dos seguintes componentes:

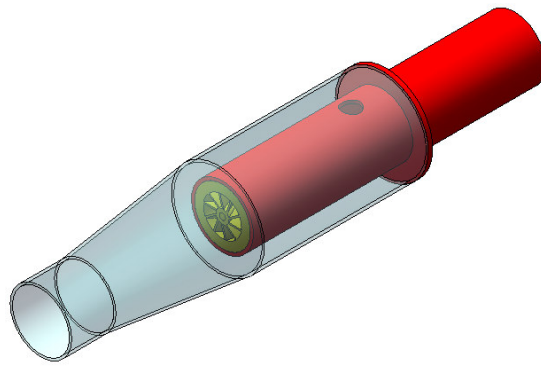


Figura 3. Esquema da câmara de combustão.

- *Liner-vermelho*
- Difusor e *casing*-transparente
- *Swirler*-amarelo
- Injeção de combustível-amarelo

Seu funcionamento se dá da seguinte forma: a combustão ocorre no *liner*, utilizando ar primário que foi misturado com o fluxo de combustível através do *swirler*. Ar secundário é utilizado para resfriar a temperatura dos gases de saída da câmara, limitada pelo material construtivo da turbina. O difusor é utilizado para diminuir a velocidade e aumentar a pressão dos gases na entrada do *liner*.

Uma boa mistura ar/combustível é imprescindível para a estabilidade da combustão. Estudos realizados anteriormente sobre essa câmara de combustão mostraram que o método que proporciona uma melhor mistura é o *swirler*.

2. OBJETIVOS

Esse trabalho tem como objetivo a obtenção de um modelo que avalia as condições de instabilidades na câmara de combustão de uma micro-turbina a gás, em função das vazões de ar e de combustível.

A obtenção desse modelo se dá através de uma análise termodinâmica das regiões da câmara de combustão. Como dito anteriormente, uma boa mistura ar/combustível é fundamental para a estabilidade da combustão, portanto, serão realizadas parametrizações do tempo de mistura turbulenta e do tempo de reação para a simulação do modelo obtido.

Através desse modelo, pretende-se obter as flutuações de pressão causadas pelas instabilidades de combustão. Essas flutuações de pressão serão utilizadas como parâmetro para o estudo das instabilidades.

Esse modelo consiste em equações integrais do balanço de massa e energia de cada uma das regiões da câmara de combustão. As equações de balanço são integradas numericamente para a análise das variações de pressão causadas por diferentes vazões, taxas de mistura e taxas de reação.

Além de uma integração numérica das equações de balanço, o modelo das regiões da câmara de combustão deve ser adaptado aos modelos de reatores disponíveis no software comercial Chemkin, onde a cinética detalhada do processo de combustão será implementada.

O software comercial de mecânica dos fluidos Fluent será utilizado para a obtenção dos parâmetros da turbulência do escoamento no interior da câmara de combustão, que serão utilizados como entradas para o modelo termodinâmico e o modelo de reatores.

Posteriormente à obtenção desse modelo pretende-se realizar estudos experimentais nas instalações construídas da micro-turbina a gás. Nesses experimentos será medida a vazão mássica de combustível, a vazão de ar, a temperatura e as concentrações de

O₂ e CO na saída da câmara de combustão. Esses dados serão utilizados para uma validação do modelo e um ajuste de suas constantes para melhor representar a câmara.

3. METODOLOGIA

3.1. Descrição das etapas a serem desenvolvidas

3.1.1. Revisão teórica

As principais áreas de conhecimento envolvidas na elaboração desse trabalho são:

- Termodinâmica
- Combustão
- Cinética Química
- Turbulência

Primeiramente foram feitos estudos sobre o funcionamento da câmara de combustão de uma micro-turbina a gás. Esses estudos foram baseados principalmente em trabalhos anteriormente realizados por alunos do LETE.

Os fundamentos de combustão necessários para o estudo da câmara de combustão foram adquiridos através da matéria PME-2511 (Processos e Sistemas de Combustão) e através de estudos utilizando o livro *An Introduction to Combustion* de Stephen R. Turns.

Foram realizados estudos sobre CFD em conjunto com alunos do LETE e com o Prof. Dr. Guenther C. Krieger Filho, onde foram abordados tópicos de Turbulência, porém será necessária uma abordagem mais detalhada do assunto para melhor caracterizar o processo de mistura turbulenta que ocorre na câmara de combustão estudada. Esses estudos serão direcionados de acordo com resultados apresentados em simulações em CFD do fluxo de gases na câmara de combustão, que estão sendo realizadas paralelamente por alunos do LETE.

3.1.2. Elaboração do Modelo Termodinâmico

A câmara de combustão foi dividida em zonas, e em cada uma dessas zonas foi aplicada a primeira lei da termodinâmica. Uma explicação detalhada da obtenção desse modelo se encontra no tópico 5.1 desse relatório.

3.1.3. Aplicação do Modelo em EES

O modelo termodinâmico obtido foi implementado em EES, as equações de balanço obtidas através da Primeira Lei da Termodinâmica são integradas numericamente com o propósito de obter a variação de pressão da região de combustão em função do tempo.

Esse é um modelo simplificado, considerando uma cinética química muito simples. Dessa forma, essa é uma aplicação apenas de caráter didático do modelo obtido.

3.1.4. Familiarização com o Chemkin

O software comercial Chemkin foi estudado com o propósito de aprender seu funcionamento e entender os fundamentos teóricos utilizados em seus modelos disponíveis para a simulação de reações químicas. Com esses estudos foi possível escolher os modelos de reatores que melhor representam o modelo termodinâmico elaborado para a câmara de combustão.

3.1.5. Implementação do modelo em Chemkin

Após a familiarização com o software, o modelo termodinâmico está sendo implementado para a simulação. Através das simulações realizadas, pretende-se obter uma correlação entre as instabilidades de combustão e as vazões de ar e combustível injetadas na câmara de combustão da micro-turbina a gás.

3.1.6. Realização de experimentos

Pretende-se realizar experimentos no protótipo da micro-turbina a gás construído por alunos do LETE. Nesses experimentos serão observadas condições de vazões mássicas na entrada que garantem a estabilidade de operação.

Além disso serão medidas as temperaturas e pressões na saída da câmara de combustão.

3.1.7. Validação do Modelo e redação do relatório final

Os modelos obtidos serão validados com a utilização dos dados experimentais e serão feitos os estudos necessários para a conclusão do trabalho e redação do relatório final.

3.2. Cronograma físico

Mês Atividade	Jan	Fev	Mar	Abr	Mai	Jun	Jul	Ago	Set	Out	Nov
Revisão teórica											
Elaboração do Modelo Termodinâmico											
Aplicação do Modelo em EES											
Familiarização com o Chemkin											
Implementação do Modelo em Chemkin											
Realização de Experimentos											
Validação do Modelo e redação do Relatório Final											

Tabela 2. Cronograma de atividades.

4. MODELO TERMODINÂMICO DA CÂMARA DE COMBUSTÃO

Para o equacionamento do modelo termodinâmico, a câmara de combustão da micro-turbina a gás foi dividida em regiões. Por hipótese foi admitido que cada região possui um comportamento característico uniforme, e que as propriedades termodinâmicas são constantes numa mesma região.

A câmara de combustão foi separada em seis regiões, como mostra a figura abaixo.

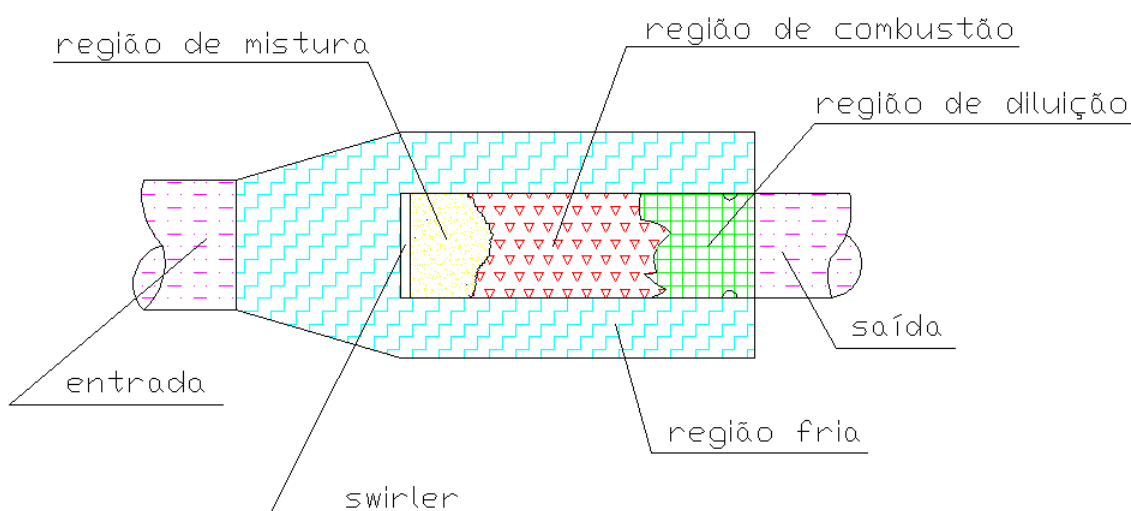


Figura 4. Regiões da Câmara de Combustão.

- Região de entrada: nessa região ocorre a admissão do ar comprimido pelo compressor.

As propriedades termodinâmicas nessa região correspondem ao estado do ar admitido.

- Região fria: corresponde a circulação do ar admitido ao redor do liner.

Existem dois fluxos de ar que deixam essa região: o ar estequiométrico que deixa a região fria através do swirler, e o ar de diluição, que circula ao redor do liner e é admitido no interior do mesmo através de orifícios localizados após a região de combustão.

As propriedades termodinâmicas nessa região correspondem também ao estado do ar comprimido admitido.

- Região de mistura: está localizada imediatamente após o swirler.

Existem dois fluxos de entrada nessa região: o ar estequiométrico que deixa a região fria, e o combustível que é injetado radialmente no swirler.

Nessa região ocorre a mistura ar/combustível que é controlada por parâmetros da turbulência gerada pelo swirler.

O fluxo que deixa essa região é o chamado “fluxo misturado” que corresponde à fração de ar e combustível que está totalmente misturada.

As propriedades dessa região correspondem às propriedades da mistura do ar nas condições de admissão e do combustível nas condições de injeção.

- Região de combustão: é a principal região a ser estudada por esse trabalho e corresponde a região onde ocorre a reação de combustão propriamente dita.

O fluxo de entrada nessa região é o chamado “fluxo misturado” e o fluxo de saída corresponde aos produtos de combustão.

Nessa região ocorre uma geração de calor que corresponde ao calor gerado pela combustão, que é controlado pela taxa de reação determinada através da cinética química.

Como o objetivo desse trabalho consiste em obter as variações de pressão dessa região ao longo do tempo, foi tomada como hipótese a condição de volume constante para essa região. Dessa forma a ocorrência ou não da reação de combustão afetará somente a pressão e a temperatura da região, sendo assim possível realizar a análise proposta nesse trabalho.

- Região de diluição: corresponde a região onde ocorre a mistura de ar secundário com os gases de combustão.

Essa diluição tem o objetivo de reduzir a temperatura dos gases na saída da câmara de combustão para que os gases em alta temperatura não venham a danificar os componentes construtivos da micro-turbina.

As propriedades nessa região são as propriedades da mistura de gases de combustão com o ar de diluição.

- Região de saída: corresponde ao escape dos gases de combustão já diluídos pelo ar secundário.

As propriedades termodinâmicas nessa região são as mesmas da região de diluição. Foi aplicado um balanço de massa e energia em cada uma das regiões, de acordo com a 1ª Lei da Termodinâmica, com o objetivo de obter o equacionamento para o modelo.

O balanço de energia da região de combustão é da seguinte forma:

$$\Delta E = \dot{m}_{mist} \cdot c_{p_{mist}} \cdot T_{mist} + \dot{Q}_{comb} \cdot V_{comb} - \dot{m}_{gascomb} \cdot c_{p_{gascomb}} \cdot T_{saída} \quad (1)$$

Onde:

- $\dot{m}_{mist}$: é o chamado “fluxo misturado”
- $c_{p_{mist}}$: é o calor específico da mistura ar/combustível
- T_{mist} : é a temperatura da mistura ar/combustível
- $\dot{Q}_{comb}$: é o calor liberado pela combustão por unidade de volume
- V_{comb} : é o volume da região de combustão
- $\dot{m}_{gascomb}$: é o fluxo dos produtos de combustão
- $c_{p_{gascomb}}$: é o calor específico dos produtos de combustão
- $T_{saída}$: é a temperatura da saída dos produtos de combustão da região de combustão, ainda sem a diluição.

Admitindo que a mistura ar/combustível e que os gases de escape se comportam como gases perfeitos, podemos escrever a seguinte relação:

$$P = (\gamma - 1) \cdot \rho \cdot e \quad (2)$$

Onde:

- P : é a pressão dos gases
- γ : é a relação $\frac{c_p}{c_v}$ dos gases
- ρ : é a massa específica dos gases
- e : é a energia interna por unidade de massa dos gases

A equação (2) pode ser reescrita da seguinte forma:

$$\Delta E = \frac{V}{(\gamma - 1)} \frac{\Delta P}{\Delta t} \quad (3)$$

Substituindo a equação (3) na equação (1) é possível obter:

$$\frac{\Delta P}{\Delta t} \cdot \frac{V_{comb}}{(\gamma_{mist} - 1)} = \dot{m}_{mist} \cdot c_{p_{mist}} \cdot T_{mist} + \dot{Q}_{comb} \cdot V_{comb} - \dot{m}_{gascomb} \cdot c_{p_{gascomb}} \cdot T_{saída} \quad (4)$$

Para ser possível fazer a integração da equação (4) precisamos escrever cada termo em função do tempo. Para isso é necessário parametrizar a equação fazendo o uso de algumas variáveis que serão definidas como tempos característicos.

$$\tau_{mist} = \frac{\rho_{mist} \cdot V_{comb}}{\dot{m}_{mist}} \quad [s] \quad (5)$$

$$\tau_{comb} = \frac{P_A}{\dot{Q}_{comb} \cdot (\gamma - 1)} \quad [s] \quad (6)$$

$$\tau_{saída} = \frac{\rho_{gascomb} \cdot V_{comb}}{\dot{m}_{gascomb}} \quad [s] \quad (7)$$

Substituindo as equações (5), (6) e (7) na equação (4), obtêm-se a expressão abaixo.

$$\begin{aligned}
\frac{\Delta P}{\Delta t} \cdot \frac{1}{(\gamma_{mist}-1)} &= \frac{\rho_{mist} \cdot cp_{mist} \cdot T_{mist}}{\tau_{mist}} - \frac{V_{comb}}{\tau_{comb} \cdot (\gamma - 1)} \\
&\quad - \frac{\rho_{gascomb} cp_{gascomb} \cdot T_{gascomb}}{\tau_{saída}} \quad (8)
\end{aligned}$$

A equação (8) pode ser escrita da seguinte forma:

$$dP \cdot \frac{1}{(\gamma_{mist}-1)} = \frac{\rho_{mist} \cdot cp_{mist} \cdot T_{mist}}{\tau_{mist}} \cdot t - \frac{V_{comb}}{\tau_{comb} \cdot (\gamma - 1)} \cdot t - \frac{\rho_{gascomb} cp_{gascomb} \cdot T_{gascomb}}{\tau_{saída}} \cdot t \quad (9)$$

Integrando essa equação ao longo do tempo é possível obter a variação de pressão da câmara de combustão em função dos parâmetros de vazão de ar e combustível, como desejado.

5. ANÁLISE DO MODELO TERMODINÂMICO

O modelo acima desenvolvido é muito simples, dessa forma acredita-se não ser possível a obtenção de resultados coerentes. Um modelo da câmara de combustão aplicando uma rede de reatores, baseado na divisão em regiões proposta anteriormente, utilizando software Chemkin é uma abordagem que poderá fornecer resultados mais coerentes com a realidade e mais úteis para a operação correta da câmara de combustão da micro-turbina a gás.

Esse modelo a ser desenvolvido em Chemkin será construído utilizando alguns modelos de reatores já definidos, que serão arranjados em uma rede, de forma a melhor representar a câmara de combustão.

6. UTILIZAÇÃO DE CFD PARA SIMULAÇÕES ACÚSTICAS

Como descrito no modelo termodinâmico elaborado anteriormente, a intenção inicial desse projeto era obter as variações de pressão no interior da câmara de combustão como método para avaliar as instabilidades da reação química, dessa forma, a utilização de simulações de CFD aplicadas à acústica foi levada em consideração.

O software comercial FLUENT possui alguns modelos para análise acústica implementados em seu código que se baseiam na analogia de Lighthill.

A analogia de Lighthill propõe uma equação para estudar a geração de ruído através da movimentação turbulenta de fluidos, ou através de forças aerodinâmicas interagindo com superfícies. Essa equação surgiu da combinação de equações clássicas da mecânica dos fluidos com uma equação de onda.

Partindo da equação de Navier Stokes para um escoamento viscoso é possível, a partir de manipulações matemáticas, obter uma equação de onda não homogênea que então fará uma analogia acústica com a mecânica dos fluidos. A equação proposta por Lighthill é indicada abaixo.

$$\frac{\partial^2 \rho}{\partial t^2} - c_0^2 \nabla^2 \rho = \nabla^2 (\rho v v) \quad (10)$$

Através dessa analogia o software FLUENT é capaz de calcular as flutuações de pressão causadas pelo ruído gerado por um escoamento turbulento, porém não é possível analisar acusticamente um escoamento turbulento reativo, escopo desse projeto.

Além dessa limitação, o FLUENT só permite a análise de uma fonte emissora de ruído e possui a capacidade de analisar pontos que distam no máximo $100.r$ da fonte, onde r é o raio da fonte.

Devido a essas limitações apresentadas pela análise acústica do FLUENT, a sua utilização como ferramenta para obter as flutuações de pressão no interior da câmara foi descartada.

Uma vez que o modelo termodinâmico proposto não será capaz de representar as flutuações de pressão no interior da câmara de forma coerente, e o software

FLUENT não é capaz de analisar a acústica de um escoamento turbulento e reativo, a abordagem adotada para esse trabalho será direcionada para simulações utilizando os modelos de reatores disponíveis no software Chemkin.

7. MODELOS DE REATORES QUÍMICOS

Os modelos de reatores que poderão ser utilizados na simulação da câmara de combustão são os seguintes:

- Reator de pressão constante e massa fixa;
- Reator de volume constante e massa fixa;
- Reator perfeitamente misturado (PSR);
- Reator parcialmente misturado (PaSR).

7.1. Reator de pressão constante e massa fixa

Esse reator considera uma reação homogênea e perfeitamente misturada com pressão constante. As propriedades que variam com o tempo nesse modelo são a temperatura e o volume.

Para reações de combustão exotérmicas, a temperatura e o volume irão aumentar com o tempo e poderá existir uma transferência de calor do reator para o exterior. O funcionamento desse reator é similar a um conjunto cilindro-pistão.

A partir da conservação da energia aplicada a um sistema de massa constante, considerando o modelo de gás perfeito, é possível obter equações que regem esse reator, mostradas abaixo.

$$\frac{dT}{dt} = \frac{\left(\frac{\dot{Q}}{V}\right) - \sum_i (\bar{h}_i \cdot \dot{w}_i)}{\sum_i ([X_i] \bar{c} p_i)} \quad (11)$$

$$\frac{d[X_i]}{dt} = \dot{w}_i - [X_i] \left\{ \frac{\sum \dot{w}_i}{\sum [X_i]} + \frac{1}{T} \frac{dT}{dt} \right\} \quad (12)$$

Onde:

- $\dot{Q}$ é o calor produzido pela combustão
- T é a temperatura no interior do reator
- V é o volume do reator
- $\bar{h}_i$ é a entalpia da espécie i
- $\dot{w}_i$ é a taxa de produção da espécie i

- $[X_i]$ é a concentração molar da espécie i
- $\bar{c}p_i$ é o calor específico da espécie i

7.2. Reator de volume constante e massa fixa

Considera uma reação homogênea, perfeitamente misturada. As propriedades que variam no tempo para esse modelo são temperatura e pressão. Nesse modelo de reator não existe trabalho.

A partir da conservação da energia em um sistema de massa fixa e admitindo o comportamento de gás perfeito, é possível obter as equações que regem esse reator.

$$\frac{dT}{dt} = \frac{\left(\frac{\dot{Q}}{V}\right) + R_u \cdot T \sum_i \dot{w}_i - \sum_i (\bar{h}_i \cdot \dot{w}_i)}{\sum_i \{[X_i](\bar{c}p_i - R_u)\}} \quad (13)$$

$$\frac{dP}{dt} = R_u \cdot T \cdot \sum_i \dot{w}_i + R_u \cdot \sum_i [X_i] \frac{dT}{dt} \quad (14)$$

7.3. Reator perfeitamente misturado(PSR)

Esse modelo considera uma câmara de combustão de funcionamento contínuo, onde o combustível e o oxidante são introduzidos com uma mistura turbulenta de alta intensidade, de modo que, hipoteticamente, exista uma mistura imediata entre eles. Dessa forma o que controla a conversão entre reagentes em produtos é somente o tempo característico da cinética química e o tempo de residência dos gases no interior da câmara.

O PSR considera que reação perfeitamente misturada ocorre num volume de controle fixo, com um fluxo de massa constante e em regime permanente.

Como esse reator opera em regime permanente, as equações que o regem não são dependentes do tempo, são equações algébricas obtidas através da conservação da massa e da energia.

As equações que regem esse modelo são:

$$\dot{Q} = \dot{m} \cdot \left(\sum_i Y_{i,out} \cdot h_i(T) - \sum_i Y_{i,in} \cdot h_i(T) \right) \quad (15)$$

$$Y_i = \frac{[X_i] \cdot MW_i}{\sum_j [X_j] MW_j} \quad (16)$$

$$h_i(T) = h_{f,i}^0 + \int_{T_{ref}}^T c_{p,i} dT \quad (17)$$

Onde:

- Y_i é a fração mássica da espécie i
- MW_i é o peso molecular da espécie i
- $[X_j]$ é a concentração molar da espécie j
- MW_j é o peso molecular da espécie j

O tempo de residência, parâmetro mais importante para determinar a composição dos produtos, é descrito pela equação abaixo.

$$t_{res} = \frac{\rho \cdot V}{\dot{m}} \quad (18)$$

7.4. Reator parcialmente misturado (PaSR)

O reator parcialmente misturado é representado por uma câmara adiabática com N entradas de combustíveis e oxidantes e uma saída de produtos. Como é considerado que não existem acúmulos de massa no interior do reator, pela equação da continuidade, o fluxo de massa na saída é a soma dos fluxos de massa nas entradas. O reator possui volume constante e não apresenta variações de pressão.

Quando a taxa de mistura turbulenta não é suficientemente rápida em relação à cinética química, o grau de mistura entre o combustível e o oxidante é um fator determinante para a reação de combustão. Esse modelo é capaz de levar em conta, então, esse tempo de mistura turbulenta a nível molecular, representado assim o perfil não misturado dos fluxos reativos.

O modelo PaSR admite que as propriedades termo-químicas no interior do reator são homogêneas, porém são parcialmente misturadas no nível molecular, ou seja, pontualmente seus valores são diferentes, mas a média é a mesma em todo o reator.

O processo de mistura no interior do reator é descrito por um tempo de mistura que, por sua vez, é modelado através de uma *escala de tempo turbulenta*, um dado de entrada para a simulação do reator. A obtenção da *escala de tempo turbulenta* é feita através da dinâmica de fluidos, aplicada a câmara de combustão em questão que, nesse caso, terá seu escoamento simulado no software comercial FLUENT.

Além da escala de tempo turbulenta, outro parâmetro importante para a simulação no PaSR é o tempo de residência, variável similar à utilizada no modelo PSR, descrita pela equação 17.

A competição entre o tempo de mistura, o tempo de residência e o tempo característico de cinética química no interior do reator é o que determina os estados termodinâmicos em seu interior.

Como mencionado anteriormente, a temperatura e composição química de cada ponto do PaSR são distintas num nível molecular. A definição de seus valores pontuais é feita por uma função densidade de probabilidade (PDF). Uma vez que o campo de velocidades no interior do reator é considerado homogêneo e as flutuações de velocidades são ignoradas, a PDF utilizada envolve apenas escalares.

Os métodos PDF são largamente utilizados para simulações de escoamentos reativos. Devido à dependência não linear entre a composição química e a temperatura, a utilização da média das concentrações das espécies e da média da temperatura para calcular a média das taxas de reação não é suficiente, produzindo erros significativos. Dessa forma, a utilização de uma PDF conjugada para as variáveis escalares do escoamento se torna interessante. Por serem de grande importância para a aplicação do modelo PaSR, os métodos PDF estão sendo estudados e serão melhor descritos nas próximas etapas desse trabalho.

Além dos métodos PDF, o modelo de mistura utilizado possui grande influência nos resultados obtidos através de simulações usando reatores PaSR. O software Chemkin possui dois modelos disponíveis em sua rotina: o Modelo de Iteração pela Troca com

a Média(IEM ou LSME) e o Modelo de Curl. Esses modelos estão sendo estudados para uma escolha adequada na simulação da câmara de combustão da micro-turbina a gás.

7.5. Parâmetros utilizados no PaSR

O tempo de mistura utilizado nas simulações do PaSR é definido por

$$t_{mix} = C_D \frac{\tilde{k}}{\tilde{\varepsilon}} \quad (19)$$

Onde:

- C_D é uma constante que depende do tipo de escoamento
- $\tilde{k}$ é a energia cinática turbulenta média
- $\tilde{\varepsilon}$ é a dissipação da energia cinética turbulenta média

Nesse caso, os parâmetros $\tilde{k}$ e $\tilde{\varepsilon}$ serão obtidos através das simulações do escoamento no interior da câmara de combustão realizadas em FLUENT®.

Os modelos de mistura implementados pelo software Chemkin utilizam os parâmetros das equações 17 e 18 para calcular uma nova variável, a chamada “não-misturabilidade”.

A “não-misturabilidade” de um escoamento reativo é um valor que varia entre 0 e 1, onde 0 significa a total segregação e 1 significa o estado perfeitamente misturado.

O valor da “não-misturabilidade” é descrito pela seguinte equação:

$$nm = \frac{\langle \widetilde{\xi''\xi''} \rangle}{(1 - \langle \widetilde{\xi} \rangle) \langle \widetilde{\xi} \rangle} \quad (20)$$

Onde:

- ξ é a fração de mistura oxidante/combustível
- $\widetilde{\xi}$ é a média de Favre de ξ
- ξ'' é a flutuação de ξ

Existem dois modelos de mistura disponíveis no Chemkin, Curl's e LMSE (Linear Mean Square Estimation), esses modelos são matematicamente distintos e complexos. Os valores para a “não-misturabilidade” em cada um desses modelos para um estado estatisticamente estável é:

$$Curl's \rightarrow nm = \frac{1}{1 + t_{res}/t_{mix}} \quad (21)$$

$$LMSE \rightarrow nm = \frac{1}{1 + C_{\phi}^{t_{res}/t_{mix}}} \quad (22)$$

8. ANÁLISE DOS MODELOS DE REATORES

O modelo PaSR apresenta-se como o mais adequado para o problema em questão, uma vez que é capaz de verificar a ocorrência da reação de combustão em função da mistura turbulenta.

Com a utilização do tempo de mistura e do tempo de residência, o PaSR permite que a dinâmica dos fluidos controle a mistura de combustível e oxidante no nível molecular e assim comande as reações químicas. Dessa forma, as simulações realizadas em FLUENT® são de grande importância para o fornecimento de parâmetros fundamentais a serem utilizados como entradas no PaSR.

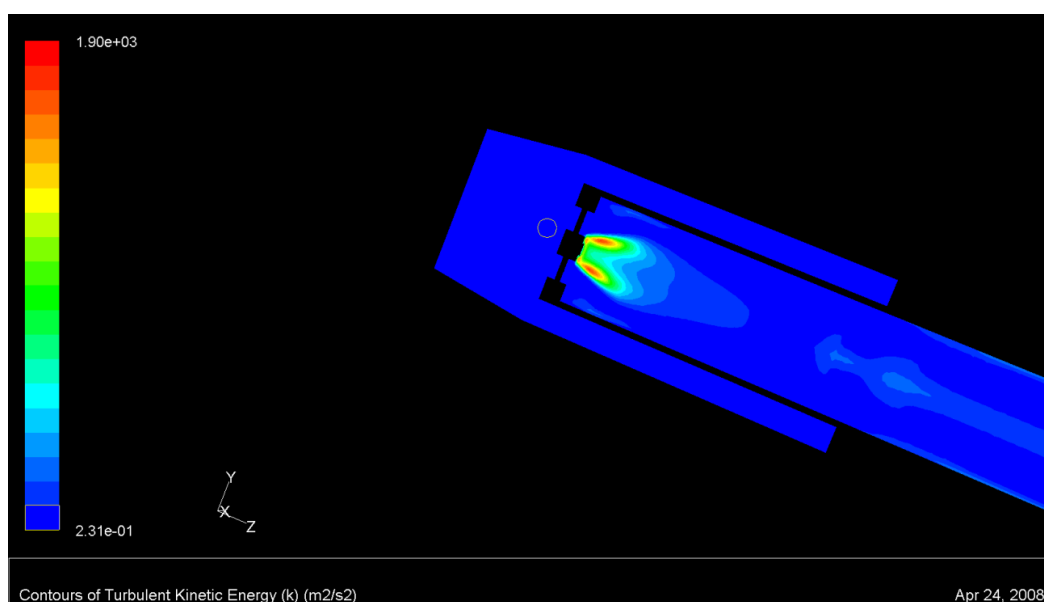


Figura 5. Valores de k no interior da câmara de combustão.

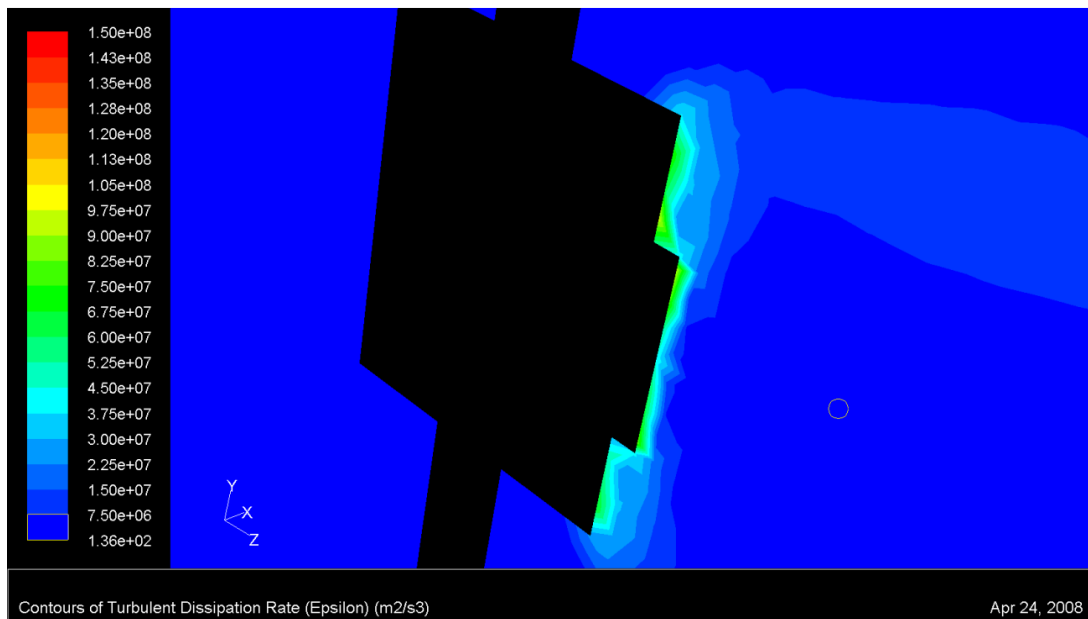


Figura 6. Valores de ε nas proximidades do swirler.

Uma vez que os valores obtidos para k e ε através do software FLUENT são valores médios, será possível somente fazer uma análise para os casos extremos, ou seja, será possível obter as condições para a ocorrência ou não da reação de combustão. Já os casos intermediários, da eminência da extinção da chama, não poderão ser estudados com as ferramentas até então propostas.

Além disso, não será possível analisar as flutuações de pressão causadas pela chama, como inicialmente pretendido, uma vez que o PaSR opera com pressão constante.

A metodologia consistirá então, em obter as vazões mássicas de ar e combustível que acusam a existência ou não de chama no interior da câmara

9. MÉTODOS PDF PARA ESCOAMENTOS TURBULENTOS E REATIVOS

Como mencionado anteriormente os métodos PDF são largamente utilizados para a determinação das várias propriedades de um fluido ao longo de um escoamento turbulento e reativo. A principal vantagem da utilização dos métodos PDF para a descrição de escoamentos turbulentos e reativos é que todas as estatísticas das propriedades de cada ponto do escoamento são descritas e que os processos convectivos e de produção química são tratados de forma exata.

O cálculo dessas propriedades é uma tarefa difícil uma vez que ocorrem variações de densidade, pressão, efeitos convectivos e reativos e também forças de campo e corpo. Os métodos numéricos envolvendo PDFs conjugadas das propriedades do fluido ao longo do escoamento tornam esses cálculos viáveis, porém uma PDF conjugada pode chegar a ter muitas variáveis independentes, o que torna a resolução de sua equação de transporte uma tarefa complicada e muitas vezes impraticável, mesmo computacionalmente. Uma forma de resolver a equação de transporte da PDF conjugada é através de métodos estocásticos, utilizando a técnica de Monte Carlo, como é feito pelo Chemkin.

Os métodos PDF são baseados nas teorias da probabilidade. O uso dessas teorias para a resolução de problemas envolvendo turbulência é muito interessante devido às características estocásticas da turbulência.

Processos estocásticos são aqueles cujos padrões surgem através de eventos aleatórios. Para um escoamento turbulento, as pequenas oscilações são amplificadas tornando as propriedades do fluido variáveis randômicas, ou seja, são eventos aleatórios.

A teoria de probabilidade utilizada não pretende determinar os valores para cada propriedade do fluido, mas sim calcular qual a probabilidade de uma variável randômica atingir certo valor. Os valores possíveis para cada variável são contidos num espaço amostral.

Seja ϕ uma variável randômica, e ψ seu espaço amostral. A F_ϕ da variável ϕ descreve completamente a distribuição da variável aleatória no espaço ψ .

$$F_\phi = P(\phi < \psi) \quad (23)$$

A função distribuição de ϕ indica qual é a probabilidade da variável possuir um valor inferior a ψ , ou seja, contido no espaço ψ . Pode-se perceber que o gráfico de F_ϕ é da forma indicada abaixo.

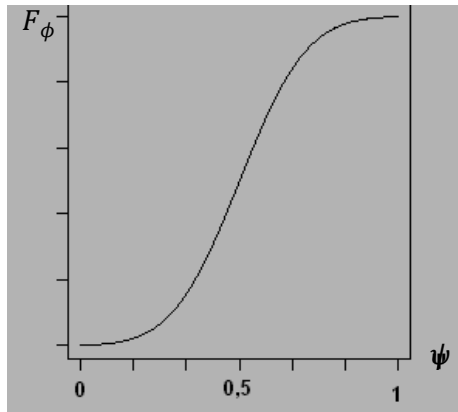


Figura 7. Gráfico típico da função de distribuição.

A função densidade de probabilidade, a PDF, é a derivada da função de distribuição em relação ao espaço ψ .

$$f_\phi = \frac{dF_\phi(\psi)}{d\psi} \quad (24)$$

Dessa forma o gráfico da PDF de uma variável, cuja função de distribuição é descrita pelo gráfico da figura 7, é conforme o gráfico mostrado na figura 8.

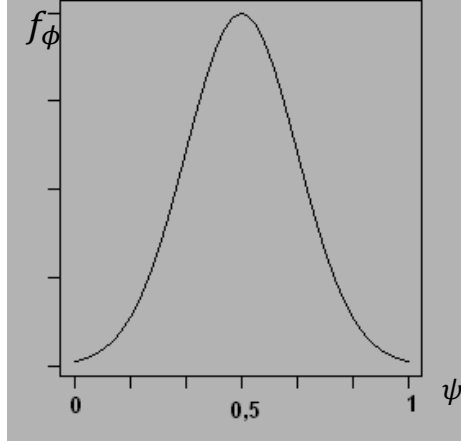


Figura 8. Gráfico da PDF.

Geralmente uma PDF é definida somente quando a função de distribuição é contínua, porém também é possível obter uma PDF de funções descontínuas, utilizando as associações indicadas abaixo.

$F_\phi \rightarrow$ função de Heaviside

f_ϕ correspondente $\rightarrow$ função Delta de Dirac

Para estudos de escoamentos turbulentos existem tanto funções contínuas como discretas. Porém, no caso do Chemkin, as funções analisadas são todas discretas.

Uma vez que existem várias propriedades a serem determinadas em cada ponto do escoamento, é necessário uma PDF conjugada envolvendo essas propriedades e correlacionando as suas probabilidades. Supondo que além da variável aleatória ϕ , tenhamos também a variável ζ cujo espaço amostral é H , uma PDF conjugada para essas duas variáveis contém informações das probabilidades das duas variáveis simultaneamente, e é definida num espaço bidimensional $H - \psi$.

$$F_{\zeta\phi} = P(\zeta < H, \phi < \psi) \quad (25)$$

$$f_{\zeta\phi} = \frac{\partial^2 F_{\zeta\phi}(H, \psi)}{\partial H \partial \psi} \quad (26)$$

Além de obter uma PDF conjugada das propriedades do fluido, é necessário transportá-la ao longo do escoamento e do tempo. Para isso é obtida a equação de transporte da PDF conjugada.

O ponto de partida para a obtenção dessa equação de transporte são as equações da continuidade, do transporte da quantidade de movimento, do transporte da fração em massa, das espécies químicas e da energia.

No Apêndice 1 é descrita a derivação da equação do transporte de uma PDF Euleriana. Nesse caso, a PDF da velocidade $f(\vec{v}; \vec{x}, t)$ é transportada ao longo do escoamento através da utilização da equação de Navier-Stokes. Através dessa derivação é possível obter a Eq. (27) descrita abaixo.

$$\frac{\partial f}{\partial t} + u_i \cdot \frac{\partial f}{\partial x_i} = - \frac{\partial}{\partial v_i} \left(f \cdot \left\langle \frac{1}{\rho} \cdot \frac{\partial P}{\partial x_i} + \nu \cdot \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_i \partial x_i} \right\rangle | \vec{v} \right) \quad (27)$$

No caso das simulações utilizando o Chemkin, a variável de interesse não é a velocidade, mas sim as propriedades termodinâmicas e as concentrações de cada espécie química para os pontos do reator. Dessa forma, a PDF a ser transportada é uma PDF de escalares e seu transporte ao longo do reator não será feito com a utilização da equação de Navier-Stokes, mas sim com a utilização da equação de transporte dos escalares Eq. (28).

$$\frac{D\phi}{Dt} = \frac{\partial \phi}{\partial t} + u_i \frac{\partial \phi}{\partial x_i} = \Gamma \nabla^2 \phi + S_\phi \quad (28)$$

Note que para essa equação o termo fonte S_ϕ está fechado, ou seja, ele é exatamente determinado através da cinética química, sem a necessidade de modelagens. Fato esse que torna a utilização da equação de transporte da PDF dos escalares ainda mais interessante para o estudo de escoamentos reativos.

Dado um campo vetorial $\phi(x, t) = [U(x, t), Y(x, t), h(x, t)]$ como sendo o conjunto do campo de velocidade, de fração mássica das espécies e da entalpia,

temos que $f_\phi(\psi; x, t)$ é sua PDF, contida num espaço amostral tridimensional V, Γ, H e definida num ponto x num instante de tempo t .

Após complicadas derivações matemáticas é possível obter a equação de transporte para a PDF conjugada $f_\phi(\psi; x, t)$ dos escalares e da velocidade, mostrada abaixo.

$$\begin{aligned} \rho(\psi) \left[\frac{\partial f_\phi(\psi; x, t)}{\partial t} + V_j \frac{\partial f_\phi(\psi; x, t)}{\partial x_j} \right] \\ = - \frac{\partial [\rho(\psi) \langle A_j | \psi \rangle f_\phi(\psi; x, t)]}{\partial V_j} - \frac{\partial [\rho(\psi) \langle C_k | \psi \rangle f_\phi(\psi; x, t)]}{\partial \Gamma_k} \\ - \frac{\partial [\rho(\psi) \langle C_h | \psi \rangle f_\phi(\psi; x, t)]}{\partial H} \quad (29) \end{aligned}$$

Essa equação indica que a PDF conjugada $f_\phi(\psi; x, t)$ evolui no espaço real x devido às flutuações da velocidade V , no espaço de fase da velocidade devido ao termo da aceleração condicionada $\langle A_j | \psi \rangle$, no espaço das frações mássicas devido ao termo da difusão/reacção condicionada $\langle C_k | \psi \rangle$, e no espaço de fase de entalpia total devido ao termo da difusão/fonte condicionado de $\langle C_h | \psi \rangle$.

Como no caso do PaSR o reator opera em regime permanente e a velocidade é considerada constante, é utilizada uma equação de transporte da PDF conjugada que envolve somente o campo escalar. Dessa forma sua equação é mais simples que a Eq. (29), porém a abordagem de transporte de PDF somente no campo escalar exige que o modelo de transporte da turbulência seja acoplado no método de resolução para fornecer o campo de velocidades.

Felizmente para o cálculo de escoamentos turbulentos e reativos a escolha do modelo de turbulência não influi de maneira drástica na determinação das estatísticas dos escalares. Dessa forma o estudo desses modelos não será abordado por esse trabalho.

A equação do transporte da PDF conjugada dos escalares, para um caso particular de densidade ρ constante, viscosidade dinâmica constante e coeficiente de difusividade Γ constante, para um escalar α , é da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_\phi(\psi; x, t)}{\partial t} + \frac{\partial [\langle U_j | \psi \rangle f_\phi(\psi; x, t)]}{\partial x_j} \\ = - \frac{\partial [\langle \Gamma_\alpha \nabla^2 \phi_\alpha | \psi \rangle f_\phi(\psi; x, t)]}{\partial \psi_\alpha} - \frac{\partial \left[\frac{1}{\rho} S_\alpha(\psi) f_\phi(\psi; x, t) \right]}{\partial \psi_\alpha} \end{aligned} \quad (30)$$

Analisando a equação (30) é possível perceber que a PDF dos escalares evolui sob influência do transporte convectivo devido á velocidade U_j condicionada a um valor de ψ contido no campo dos escalares, do transporte no espaço da composição devido à mistura molecular condicionada e do termo de produção química S_α .

Além de não possuir informações sobre as flutuações da velocidade, a equação de transporte da PDF dos escalares também não contém nenhuma informação sobre a taxa de dissipação do escalar e seu acoplamento com o campo turbulento. Dessa forma é necessário um modelo de mistura para obter o efeito da difusão molecular. Como dito anteriormente existem dois modelos para a mistura disponíveis no Chemkin, o IEM e o Curl's.

A equação (30) pode ser simplificada para aplicação no PaSR, considerando que os efeitos convectivos estão relacionados com a vazão através do reator e com o tempo de residência, descrito pela equação (18), e que as propriedades ao longo do reator são uniformes, apesar de diferentes a nível molecular. Podemos obter a seguinte expressão:

$$\frac{\partial f_\phi(\psi; t)}{\partial t} = \frac{1}{\tau_r} [f_\phi^e(\psi; t) - f_\phi^s(\psi; t)] - \frac{\partial [\langle \Gamma_\alpha \nabla^2 \phi_\alpha | \psi \rangle f_\phi(\psi; t)]}{\partial \psi_\alpha} - \frac{\partial \left[\frac{1}{\rho} S_\alpha(\psi) f_\phi(\psi; t) \right]}{\partial \psi_\alpha} \quad (31)$$

Na equação (31), o primeiro e o terceiro termos representam, respectivamente, os efeitos da convecção e da reação química. Já o segundo termo representa o efeito da mistura, a ser modelado por Curl's ou IEM.

A equação (31) é, por fim, a equação a ser resolvida pelo Chemkin utilizando o método de Monte Carlo e adotando um dos dois modelos de mistura expostos acima.

Segundo *Orbegoso, 2007* o modelo de mistura IEM é o mais adequado para esse estudo uma vez que ele é o único que apresenta um acoplamento direto entre a reação e a mistura e, por isso, esse será o modelo utilizado nas simulações realizadas.

A resolução da Eq.(31) por métodos analíticos é impossível uma vez que ela deve ser resolvida num espaço de mais de 17 dimensões, isso porque existem 17 espécies químicas envolvidas no mecanismo de reação, e, além da concentração de cada uma delas, também deve ser levada em conta outras variáveis, como a temperatura, pressão e o volume do reator.

Conforme explicado anteriormente, uma vez sendo impossível uma resolução analítica da equação do transporte da PDF para os escalares, a utilização de métodos numéricos se faz necessária. O método utilizado pelo Chemkin é o método de Monte Carlo.

O método de Monte Carlo consiste em resolver problemas matemáticos com a utilização de simulações de variáveis randômicas. Basicamente são geradas variáveis randômicas que são observadas de modo a gerar uma função densidade de probabilidade (PDF) a partir da qual a propriedade de interesse será analisada.

Quanto maior o número de variáveis randômicas geradas e observadas, maior será a acuracidade do resultado obtido. No caso das simulações do Chemkin, essas variáveis a serem observadas consistem no número de partículas estocásticas, quanto maior esse número, mais preciso será o resultado, porém será necessário mais tempo de máquina em cada simulação.

10. SIMULAÇÕES PRELIMINARES REALIZADAS EM CHEMKIN

A câmara de combustão da turbina a gás estudada opera utilizando como combustíveis etanol, GLP e gás natural. Como o GLP é constituído em sua maioria por propano (C_3H_8), uma das reações a serem simuladas no modelo PaSR do software Chemkin será de propano e ar. Já o gás natural é constituído na sua maioria por metano (CH_4), dessa forma também será simulada a reação de metano com o ar. A combustão do etanol não será estudada pelo presente trabalho.

Uma vez que o Chemkin não dispõe de um mecanismo de reação para o C_3H_8 já implementado em sua rotina, primeiramente foram realizadas algumas simulações utilizando metano (CH_4) e ar para a familiarização com o software.

Posteriormente foram encontrados mecanismos já prontos para o propano, juntamente com sua tabela de propriedades termodinâmicas, em um site de apoio a usuários do Chemkin chamado *Reaction Design*.

As primeiras simulações realizadas com o metano e propano ainda não utilizaram os parâmetros da câmara de combustão da turbina a gás a ser estudada, e foram apenas de caráter didático, com o objetivo de compreender o funcionamento da ferramenta. As entradas necessárias para uma simulação com o modelo PaSR são as seguintes:

- Tempo de simulação;
- Tempo de residência (t_r);
- Temperatura no interior do reator;
- Pressão no interior do reator;
- Tempo de mistura turbulenta (t_{mix});
- Fator de modelo de mistura (C_ϕ);
- Passo de tempo para o método Monte Carlo;
- Número de eventos estatísticos.

A entrada de ar e combustível possui os seguintes valores a serem *setados* como entradas:

- Fluxo mássico total dos gases;
- Temperatura;
- Fração molar dos elementos químicos a serem estudados.

Além dos dados de entrada é necessário fornecer ao Chemkin o mecanismo de reação a ser utilizado e um arquivo contendo as propriedades termodinâmicas das espécies químicas envolvidas no mecanismo escolhido.

Após o processamento desses dados, a simulação é realizada pelo Chemkin e então é produzido um arquivo de resultados, através dos quais são plotados gráficos que ilustram os valores dos escalares no interior do reator ao longo do tempo de simulação.

Abaixo é ilustrado um gráfico de temperatura em função do tempo para uma das simulações realizadas com o metano. Como é possível verificar, a temperatura decai de 1000 K, temperatura de entrada dos gases, e para 500 K, temperatura no interior do reator, caracterizando a não-ocorrência da reação.

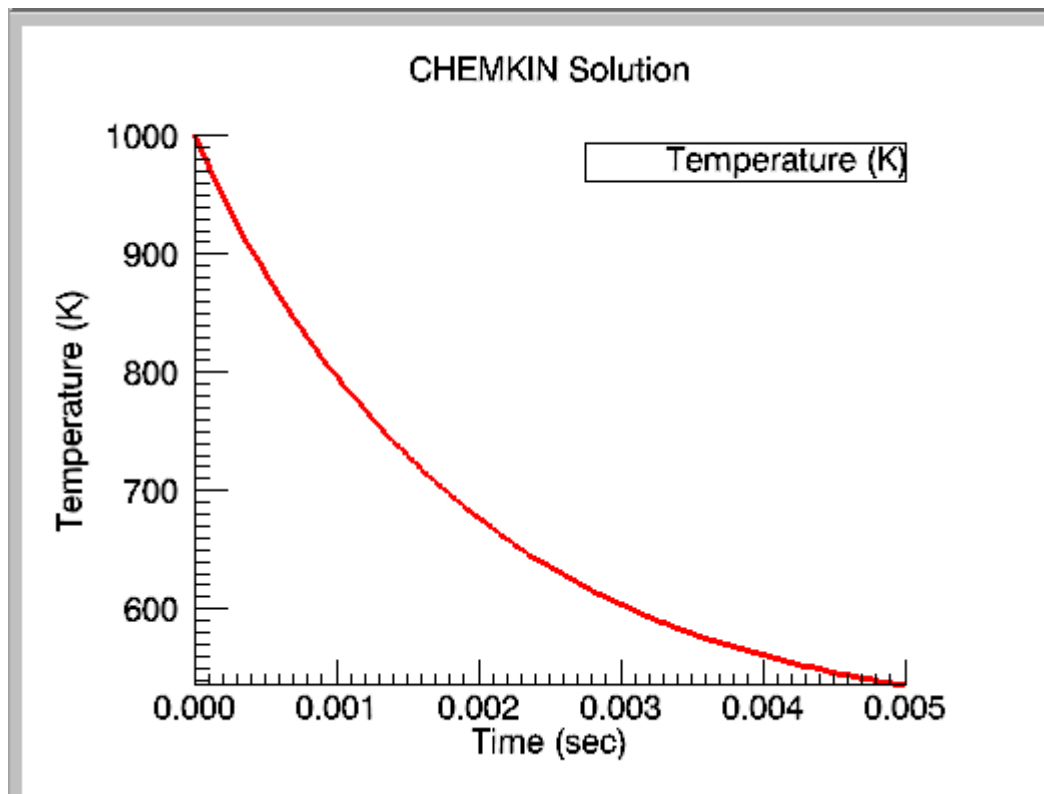


Figura 9. Gráfico indicando a não-reação de metano com ar.

A primeira simulação com o propano utilizou os seguintes dados de entrada:

Tempo de simulação	0,005 s
Tempo de residência	0,001 s
Temperatura	1000 K
Pressão	10 atm
Tempo de mistura	0,0001 s
Fator de modelo de mistura	2
Passo de tempo de Monte Carlo	0,0005 s
Número de eventos estatísticos	10
Fluxo mássico	100 g/s
Temperatura de entrada	1500 K
Fração molar de N₂	0,745
Fração molar de O₂	0,205
Fração molar de C₃H₈	0,049

Tabela 3. Dados de entrada para a 1ª simulação.

Essa simulação forneceu como saída o gráfico abaixo, que caracteriza a ocorrência da reação química, uma vez que apresenta aumento da temperatura interna e sua posterior estabilização.

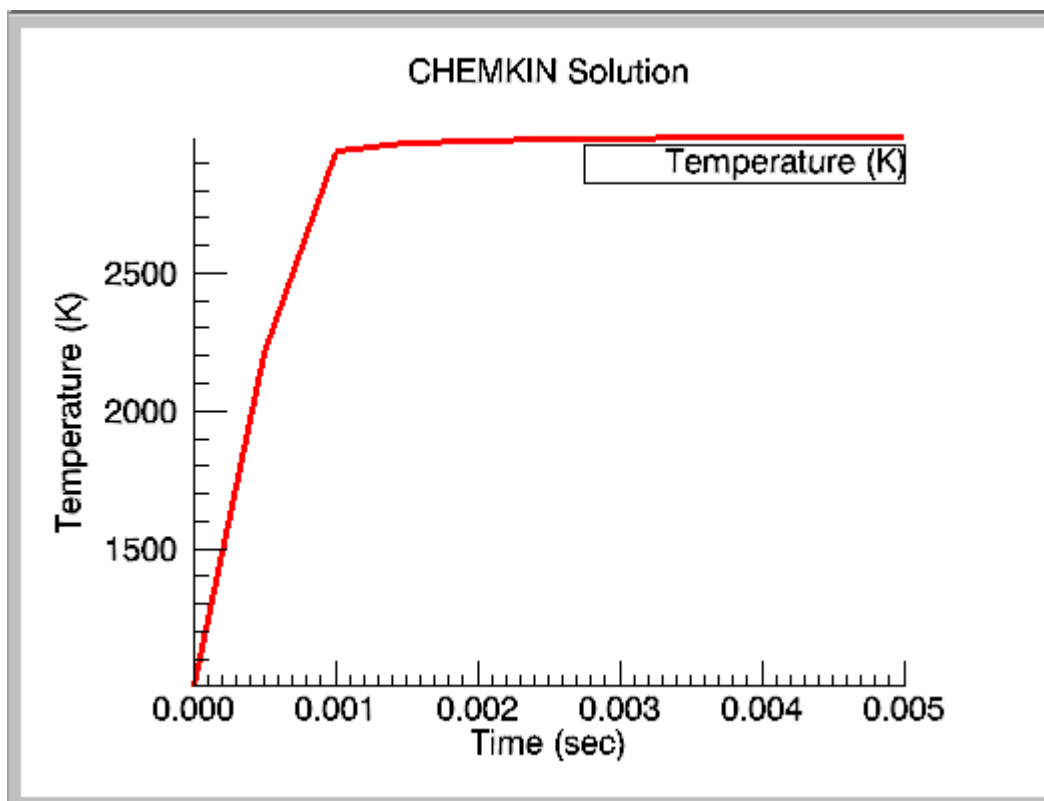


Figura 10. Gráfico que caracteriza a reação de combustão do propano.

Com o intuito de verificar a influência do tempo de mistura no comportamento da reação, seu valor foi alterado de 0,0001 s para 0,0002 s.

A simulação utilizando o maior tempo de mistura produziu os gráficos a seguir.

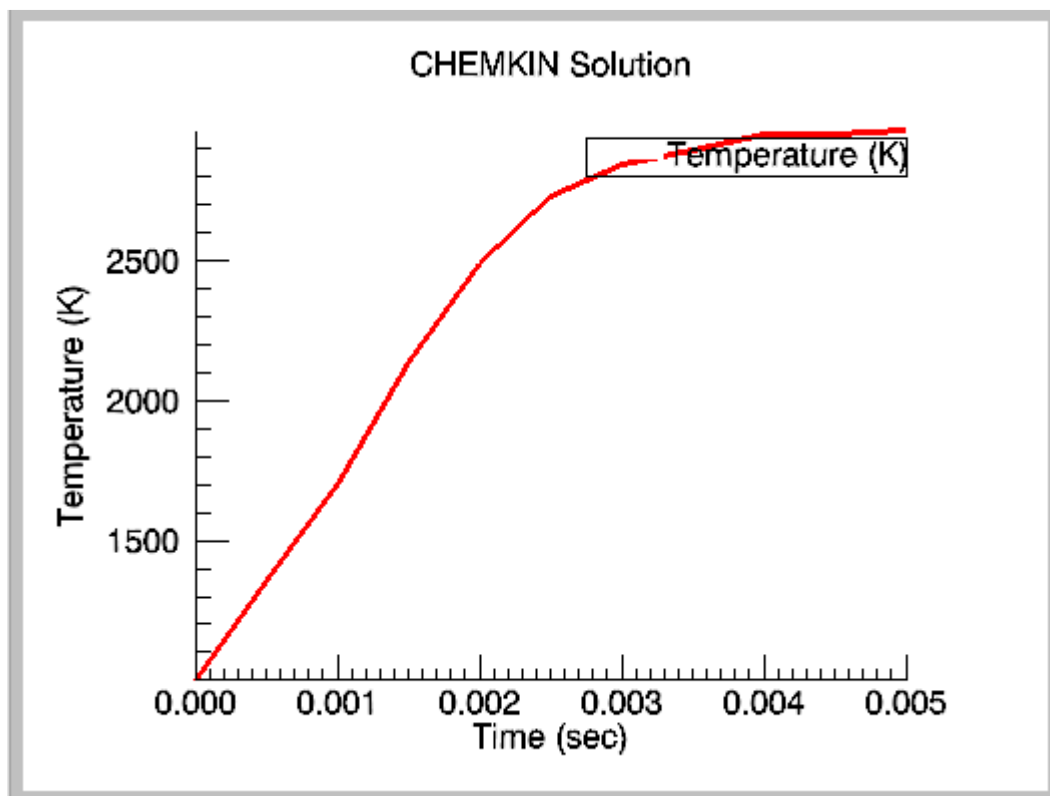


Figura 11. Gráfico da evolução de temperatura no interior do reator.

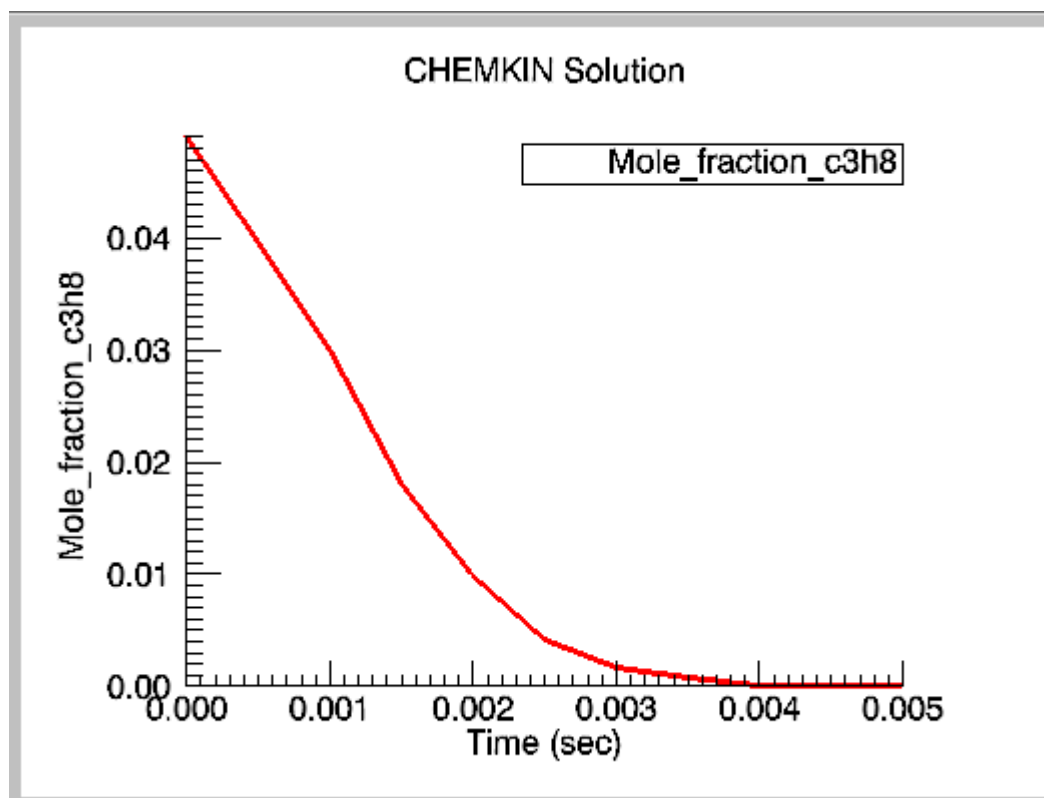


Figura 12. Gráfico que ilustra o consumo do combustível.

Comparando esses dois gráficos com os obtidos na simulação com o tempo de mistura menor é possível perceber que com o aumento do tempo de mistura, a reação demora mais para ocorrer e os valores demoram mais para estabilizarem-se.

Utilizando $t_{mix} = 0,0001 \text{ s}$ a reação acontece até o instante de $0,001 \text{ s}$ e a partir de então os valores dos escalares permanecem constantes, já com $t_{mix} = 0,0002 \text{ s}$ a reação ocorre até o instante de $0,003 \text{ s}$ e os valores encontram a estabilidade mais lentamente.

A conclusão obtida a partir das simulações realizadas indica que, com o aumento do tempo de mistura a reação demora mais para acontecer, culminando num ponto crítico onde o t_{mix} será maior que o tempo de cinética química e então não ocorrerá mais a combustão, confirmando o que foi descrito no item 4.4.4 desse relatório.

Foram realizadas muitas simulações utilizando o propano como combustível e tendo como dados de entrada valores não correspondentes aos reais apresentados na câmara de combustão. Para esses dados não realistas, apresentando temperaturas de entrada dos gases da ordem de 1500 K , foi constatada a ocorrência de reação de combustão em todos os casos.

Com o objetivo de verificar a influência do tempo de residência na ocorrência de reação, foram feitos progressivos aumentos em seu valor, como ilustrado pelas duas simulações mostradas anteriormente. Em todas as simulações realizadas foi possível comprovar o comportamento acima ilustrado, um maior t_{mix} ocasiona numa maior demora para a ocorrência de reação, porém não foi possível a visualização do ponto crítico, onde a reação se extingue.

Conforme o t_{mix} é incrementado também se faz necessário aumentar o tempo de residência, porque t_{res} precisa ser significativamente maior que o tempo de mistura para uma simulação correta. Além disso, também é necessário aumentar o tempo de simulação, para que os efeitos dos dois tempos característicos sejam corretamente verificados.

Por consequência, quanto maior o tempo de mistura, mais tempo de simulação computacional era necessário, dessa forma, infelizmente, não foi possível verificar o ponto de extinção da combustão.

11. PARÂMETROS DA CÂMARA DE COMBUSTÃO

Os parâmetros reais a serem utilizados nas simulações foram obtidos através dos dados construtivos e operacionais da câmara.

A câmara opera com um fluxo mássico de GLP da ordem de 0,0023 kg/s e um fluxo de ar da ordem de 0,1594 kg/s. Considerando que 30% do fluxo de ar entra através do swirler na região estudada e 70% entra no liner através dos furos de diluição, após a zona estudada, o fluxo mássico total na região a ser simulada pelo reator é da ordem de 0,07 kg/s.

A região a ser estudada é localizada após o swirler e é compreendida até dois diâmetros a frente da superfície de entrada dos gases. O volume da região é de aproximadamente $3,98.10^{-2} \text{ m}^3$.

É necessário fornecer ao Chemkin somente dois entre esses três parâmetros: volume, vazão de gases na entrada e tempo de residência. Inicialmente serão fornecidos o volume e a vazão na entrada, porque são valores possíveis de serem medidos. Porém como não se pode afirmar que o modelo de reator será capaz de representar todo o volume escolhido, esse parâmetro poderá ser posteriormente alterado para a garantia de tempos de residência adequados.

Os outros parâmetros que serão utilizados nas simulações são a temperatura e a pressão na entrada da câmara, que são respectivamente 350 K e 2 bar.

O tempo de mistura será o parâmetro a ser variado nas simulações e será calculado através dos coeficientes k e ε obtidos no FLUENT e utilizando um coeficiente $C_D = 1$.

As frações molares de cada componente na entrada da câmara de combustão foram admitidas como sendo as frações estequiométricas.

$$C_3H_8 = 0,10245$$

$$O_2 = 0,51223$$

$$N_2 = 0,38522$$

Já para a reação de metano com o ar, pode-se considerar que todos os outros parâmetros são aproximadamente os mesmos e as frações molares na entrada são as estequiométricas, conforme indicado abaixo.

$$CH_4 = 0,095$$

$$O_2 = 0,19$$

$$N_2 = 0,71$$

12. SIMULAÇÕES UTILIZANDO OS DADOS DA CÂMARA DE COMBUSTÃO

Foram realizadas muitas simulações utilizando o propano como combustível e os dados reais da câmara de combustão.

Com a utilização do PaSR não foi possível encontrar nenhuma configuração de entradas de dados próxima a realidade que acarretasse na ocorrência da reação. Após várias tentativas, alterando parâmetros como o tempo de mistura e o volume, partiu-se para simulações utilizando o PSR com o objetivo de investigar motivos para a não ocorrência da reação.

Após várias simulações utilizando o mecanismo para o propano no reator PSR foi possível concluir que só ocorre a reação de combustão com temperaturas de entrada dos gases e inicial do reator acima de 1400 K.

Vários outros parâmetros foram alterados nas simulações utilizando o PSR, e somente a temperatura se mostrou influente nos resultados. Dessa forma, devido às altas temperaturas necessárias para o acontecimento da reação, foi concluído que o mecanismo empregado para a reação do propano não era adequado para uma correta simulação da câmara de combustão da micro-turbina a gás.

Partiu-se então para a realização de simulações utilizando o metano, que emprega o mecanismo descrito no Anexo II desse relatório.

Como nas simulações utilizando o propano foi detectado um problema na temperatura necessária para ocorrência da reação, para o metano partiu-se diretamente para simulações com o PSR com o objetivo de detectar uma possível ocorrência do mesmo problema.

Foram realizadas muitas simulações com o PSR de modo a determinar uma faixa de temperaturas onde ocorre a reação, para assim partir para as simulações empregando o PaSR com mais segurança.

As simulações em PSR indicaram ser necessária uma temperatura inicial no interior do reator de, no mínimo, 1408 K para garantir a reação. Com essa temperatura inicial, a temperatura de entrada dos gases pode ser até inferior a ambiente, e mesmo assim será detectada a ocorrência da combustão.

Abaixo podem ser vistas as tabelas com os dados de entrada e saída para uma dessas simulações com o PSR utilizadas para nortear as simulações com o PaSR.

Entradas	
Tipo de Simulação	Equação de Energia dos Gases
Fluxo mássico	70 g/s
Pressão	2 bar
Temp. Inicial	1500 K
Temp. entrada	320 K
Volume	3980 cm³
CH₄	0,095
O₂	0,19
N₂	0,71
Tempo de simulação	1 s

Saídas	
Temperatura	2199,9 K
Fluxo mássico	70 g/s
CH₄	9,10E-06
O₂	0,074
N₂	0,708
CO₂	0,081
CO	0,012
H₂O	0,18
H₂	0,049
Consumo de CH₄	0,33 mols/s

Tabela 4. Tabelas da simulação com PSR

Sabendo dessas limitações do mecanismo em relação à temperatura inicial do reator, passou-se para as simulações utilizando o PaSR.

Primeiramente foram utilizados os mesmos dados de entrada do PSR, e foi *setado* somente um problema de equilíbrio no PaSR. Conforme esperado, para um problema somente de equilíbrio, o PaSR representou o PSR, caracterizando a ocorrência da combustão.

Desligando o problema de equilíbrio e empregando o problema de reação química, já não ocorreu a reação. Dessa forma, imaginou-se que o problema era o tempo de mistura que poderia estar muito alto.

Diminuindo o tempo de mistura, não foram observadas mudanças nos resultados, continuando sem reagir. Passou-se então a alterar os outros parâmetros, um de cada vez, com o objetivo de determinar qual o parâmetro mais influente para a ocorrência da reação.

Foram realizadas muitas simulações com o PaSR empregando o metano como combustível, os dados de entrada e os respectivos resultados dessas simulações estão documentados no Anexo IV.

Não foi detectada a ocorrência de reação para dados coerentes com a realidade de operação da câmara de combustão da micro-turbina a gás. As primeiras simulações que reagiram contavam com fluxos mássicos extremamente baixos, da ordem de 0,07 g/s, enquanto o fluxo real é da ordem de 70 g/s. Já os outros parâmetros dessas simulações estavam próximos aos encontrados na realidade.

Uma das simulações que caracteriza a reação com esse baixo fluxo mássico é a simulação #6. Alguns gráficos de pós-processamento para essa simulação são mostrados abaixo.

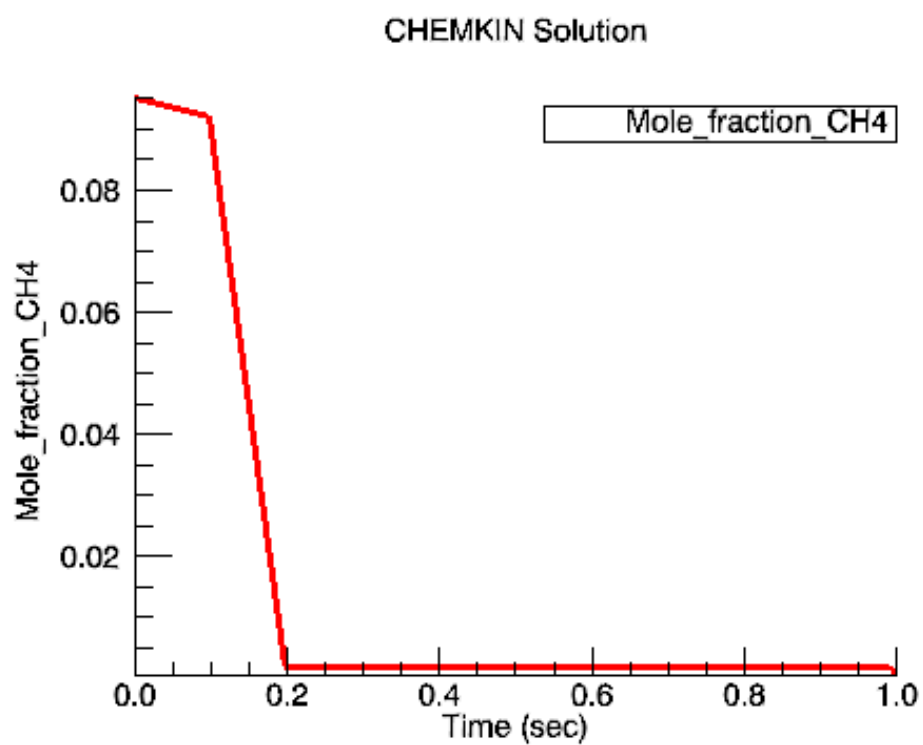


Figura 13. Fração molar do CH_4 na simulação #6.

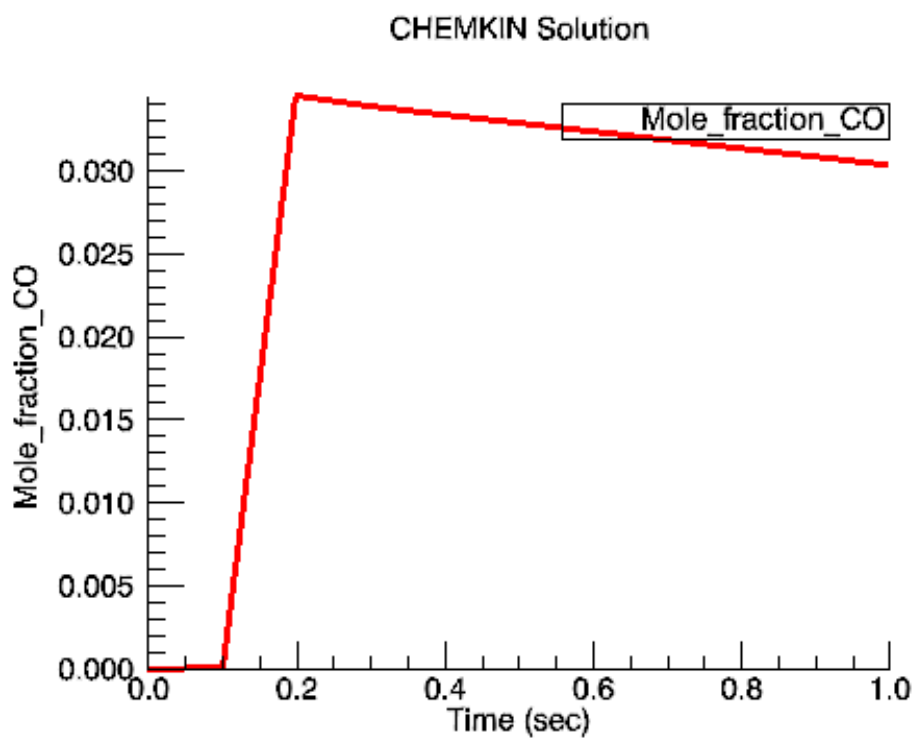


Figura 14. Fração molar do CO na simulação #6.

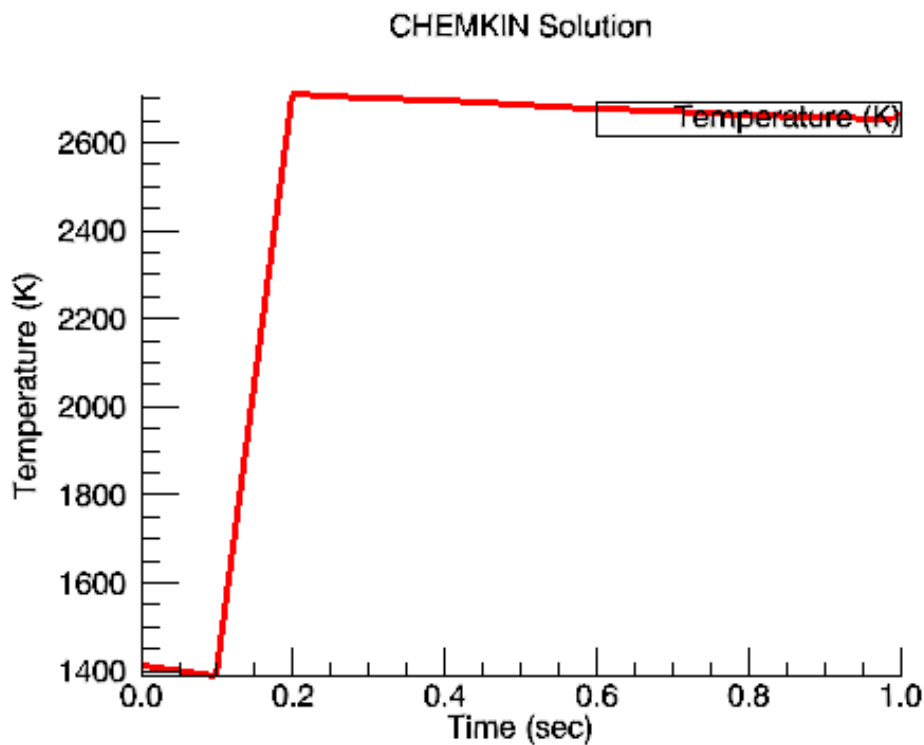


Figura 15. Temperatura na simulação #6.

Empregando valores reais para o fluxo mássico na entrada do reator e mantendo os outros valores também dentro de faixas condizentes com a realidade, não foi possível obter a reação de combustão.

O volume foi alterado uma vez que não era possível garantir qual porção da câmara de combustão seria adequadamente representada pelo modelo PaSR. Mesmo após várias alterações no volume também não foi observada a ocorrência da combustão.

Posteriormente foram modificadas as temperaturas, tanto de entrada como inicial do reator. Mantendo as temperaturas dentro de valores próximos à realidade não foi observada a combustão, somente quando os valores de entrada e iniciais atingiam 1400 K foi detectada a ocorrência de combustão.

Foi também observada uma falha no programa Chemkin que implicava na ocorrência de erros para temperaturas na faixa de 1412 K a 1460 K.

Além disso, não foi possível plotar os gráficos das PDFs dos escalares desejados, o que dificultou muito algumas análises sobre o comportamento do reator. Através desses gráficos seria possível verificar se a reação simplesmente não ocorreu, ou não pode ser mantida.

13. CONCLUSÕES

Através das muitas simulações realizadas com o software Chemkin foi possível concluir que o modelo de reator PaSR não é capaz de simular corretamente a câmara de combustão da micro-turbina a gás estudada.

As simulações feitas com valores próximos da realidade acusaram que não ocorre a combustão, contradizendo com o fato de a câmara estar operando adequadamente com esses dados.

O modelo PSR, no entanto, está mais próximo de uma correta modelagem da câmara de combustão, apesar de não apresentar correlações com a mistura turbulenta, uma vez que apresentou a reação de combustão para os dados de entrada nos quais a combustão ocorreu no aparato experimental.

Infelizmente não foi possível entender o porquê das simulações utilizando o PaSR não apresentarem reação de combustão para os dados reais da câmara. Dessa forma essa investigação é proposta para trabalhos futuros, uma vez que o modelo de reator PaSR ainda é considerado muito interessante para o estudo de mistura turbulenta.

Como contribuição geral desse trabalho, pode-se citar a grande quantidade de estudos realizadas sobre o funcionamento do PaSR, os modelos matemáticos envolvidos em suas simulações e, principalmente os métodos PDF para o estudos de escoamentos turbulentos e reativos. Esses estudos foram compilados nesse relatório e espera-se que possam ser úteis para futuras simulações e aplicações do PaSR por outros alunos.

Por fim, deve ser citado que apesar de não apresentar resultados satisfatórios para a simulação da câmara de combustão, o software Chemkin é uma poderosa ferramenta para análises de reações químicas. Seria interessante também propor estudos futuros para obter o gráfico da PDF dos escalares e assim analisar melhor as simulações, e tentar entender o motivo pelo qual o PaSR não se mostrou a ferramenta adequada para representar a câmara de combustão.

14. BIBLIOGRAFIA

Chemkin Theory Manual-Reaction Design-2004.

Fukumaso, N. K. e Krieger Filho, G. C.-Projeto Aero-termodinâmico de uma câmara de combustão para micro-turbina a gás derivada de um turbocompressor automotivo-Escola Politécnica da USP-2006.

Krieger Filho, G. C. –A Turbulent Combustion Model Based on Large Scale Motion Coupled to Perfectly Stirred Reactor Compared to a Partially Stirred Reactor-COBEM-2005.

Narayanaswami, L. e Richards, G. A.- Pressure Gain Combustion-Journal of Engineering for gas Turbines and Power-1996.

Orbegoso, E.M.M. e Figueira da Silva, L.F.- Estudo de Modelos de Mistura Estocásticos para Combustão em Escoamentos Turbulentos-PUCRJ-2007.

Pope, S. B. – PDF Methods for Turbulent Reactive Flows-Pergamon Press-Prog. Energy Combust. Sci.-1985, Vol 11, pp 119-192.

Pope, S. B. – Turbulent Flows-Cambridge University Press-2000.

Turns, R.S.-An Introduction to Combustion-McGraw-Hill-1999.

Van Wylen, G.J. , Borgnakke, C. e Sonntag E. R.-Fundamentos da Termodinâmica-Edgard Bluncher-2003.

Versteeg H.K., Malalasekera W. - Introduction to Computational Fluid Dynamics. The Finite Volume Method-Longman-1995.

www.fluentusers.com- consultado em 10/08/08 e 17/11/08.

www.reactiondesign.com- consultado em 9/06/08, 10/10/08, 12/11/08 e 17/11/08.

15. ANEXO I

Nesse capítulo será demonstrado como foi obtida a equação de transporte da PDF da velocidade ao longo de um escoamento.

No caso estudado, temos uma função descontínua representada pelos vários pontos de um campo de velocidades. Como já citado no capítulo 9, as PDFs de funções descontínuas podem ser descritas com a ajuda da função Delta de Dirac. Dessa forma, as propriedades dessa função serão de grande importância para o desenvolvimento da equação de transporte da PDF e, por isso, devem ser explicadas com mais detalhes.

15.1. A função Delta de Dirac

A função Delta de Dirac pode ser definida da seguinte forma:

$$\delta(x) = \begin{cases} 0 & \text{para } x \neq 0 \\ \infty & \text{para } x = 0 \end{cases} \quad (35)$$

Ou então:

$$\delta(x - a) = \begin{cases} 0 & \text{para } x \neq a \\ \infty & \text{para } x = a \end{cases} \quad (36)$$

Então é fácil notar que o gráfico de uma função $\delta(x)$ é da seguinte forma:

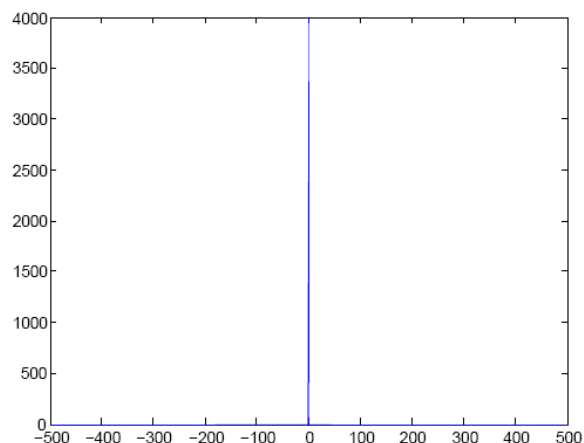


Figura 16. Exemplo de função Delta de Dirac

Pode-se também notar a seguinte propriedade do Delta de Dirac.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x) dx = 1 \quad (37)$$

Temos que a função descrita na Eq. (38) é uma gaussiana e, conforme se aumenta o valor de n , a gaussiana vai ficando cada vez mais estreita, como pode ser visualizado na Fig. (XX). No limite, quando $n \rightarrow \infty$, a gaussiana se torna um Delta de Dirac. Essa característica será utilizada para calcular a derivada da função Delta de Dirac, que será usada na equação do transporte da PDF.

$$D_n(x) = \frac{n}{\sqrt{2\pi}} \cdot e^{\frac{-n^2 x^2}{2}} \quad (38)$$

$$\lim_{n \rightarrow \infty} D_n(x) = \delta(x) \quad (39)$$

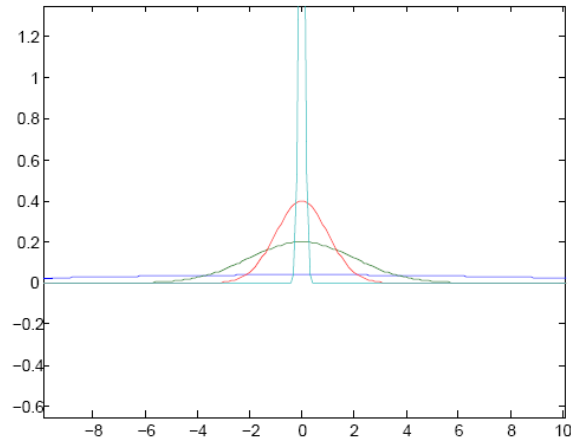


Figura 17. Exemplos de Curvas Gaussianas.

Além disso, outra propriedade que será muito utilizada para a derivação da equação do transporte da PDF é a chamada *sifting property*, descrita abaixo.

Partindo da integral da Eq. (40), tomando que o impulso $\delta(x - a)$ assume o valor de zero em todos os casos, exceto quando $x = a$, podemos reescrevê-la conforme a Eq.(41).

$$\int_{-\infty}^{+\infty} g(x) \cdot \delta(x - a) dx \quad (40)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} g(x) \cdot \delta(x - a) dx = \int_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon} g(x) \cdot \delta(x - a) dx \quad (41)$$

Agora, assumindo que $g(x)$ seja contínua ao redor de a , e fazendo o valor de ε diminuir progressivamente, podemos escrever a Eq. (42)

$$\int_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon} g(x) \cdot \delta(x - a) dx = \int_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon} g(a) \cdot \delta(x - a) dx \quad (42)$$

Uma vez que $g(a)$ não depende de x , podemos tirá-la para fora da integral.

$$\int_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon} g(a) \cdot \delta(x - a) dx = g(a) \cdot \int_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon} \delta(x - a) dx \quad (43)$$

Usando a propriedade descrita pela Eq. (37), temos finalmente a Eq. (44) que define a *sifting property*.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} g(a) \cdot \delta(x - a) dx = g(a) \cdot \int_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon} \delta(x - a) dx = g(a) \cdot 1 = g(a) \quad (44)$$

$$\text{Resumindo: } \int_{-\infty}^{+\infty} g(x) \cdot \delta(x - a) dx = g(a) \quad (45)$$

Também é importante citar algumas características de paridade da função de Delta de Dirac. O $\delta(x - a)$ é uma função par, ou seja:

$$\delta(x - a) = \delta(a - x) \quad (46)$$

Já a derivada da função Delta de Dirac é uma função ímpar, logo:

$$\delta'(x - a) = -\delta'(a - x) \quad (47)$$

15.2. A PDF granulada fina

A PDF a ser estudada é a densidade de probabilidade de um campo de velocidades discreto, ou seja, é uma PDF dita como granulada fina, que pode ser descrita com a ajuda do Delta da Dirac.

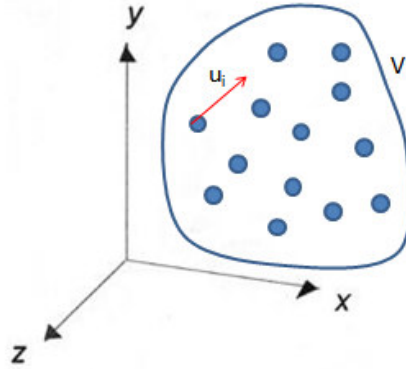


Figura 18. Campo de Velocidades.

Para esse campo de velocidades, cada ponto possui uma velocidade $\vec{u}_i$, que depende de sua posição $(\vec{x}, \vec{y}, \vec{z})$ e do instante de tempo t . É importante ressaltar que os valores de $\vec{u}_i$ só podem assumir os valores que estão contidos no espaço amostral da velocidade, o espaço V .

Dessa forma, a PDF desta distribuição de velocidades pode ser representada por uma função Delta de Dirac, e será chama de PDF granulada fina.

$$f'(\vec{u}; \vec{x}, \vec{y}, \vec{z}, t) = \delta(\vec{u}(\vec{x}, \vec{y}, \vec{z}, t) - \vec{v}) \quad (48)$$

Onde $\vec{v}$ assume somente os valores do campo de velocidades V .

Para simplificar a notação, vamos escrever a Eq. (48) da seguinte forma:

$$f'(\vec{u}; \vec{x}_i t) = \delta(\vec{u}(\vec{x}_i, t) - \vec{v}) \quad (49)$$

Onde o índice i varia de 1 até 3 e representa as 3 dimensões do espaço.

Para provar que uma PDF granulada fina pode corretamente representar a função densidade de probabilidade de todo o campo de velocidades, abaixo será feita uma analogia com um campo de massas pontuais. Vale ressaltar que essa analogia tem apenas caráter didático a fim de justificar a validade de uma função granulada fina.

Partindo de uma distribuição discreta de massas, como indicado na figura X, onde cada ponto possui massa m e dista da origem de um raio r_i , pode-se escrever a Eq. (50) para determinar a densidade de todo o conjunto.

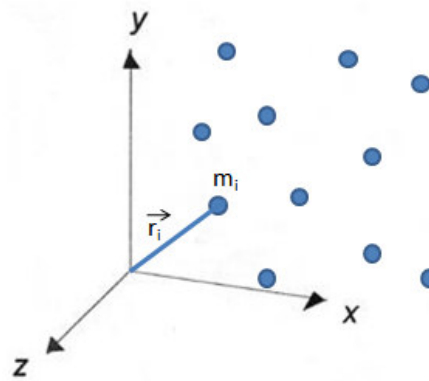


Figura 19. Distribuição discreta de massas.

$$\rho(\vec{r}) = \sum_i^n m_i \delta(\vec{r} - \vec{r}_i) \quad (50)$$

Analisando a Eq.(50) pode-se perceber que quando $(\vec{r} = \vec{r}_i)$, $\rho(\vec{r}) \rightarrow \infty$, o que condiz com a realidade. Além disso, esse fato é coerente também porque podemos aplicar um limite para verificar sua veracidade.

$$\rho = \lim_{\delta V \rightarrow 0} \frac{\delta m}{\delta V} = 0 \quad (51)$$

$$\iiint \sum_i^n m_i \cdot \delta(\vec{r} - \vec{r}_i) dV = m \quad (52)$$

Uma vez verificado que a PDF granulada fina é uma função coerente, existem duas propriedades muito interessantes dessa função que devem ser verificadas com mais

atenção, uma vez que serão utilizadas na derivação da equação de transporte. Essas propriedades são as seguintes:

$$\langle f'(\vec{u}; \vec{x}_i t) \rangle = f(\vec{u}; \vec{x}_i t) \quad (53)$$

$$\langle \phi(\vec{x}_i t) \cdot f'(\vec{u}; \vec{x}_i t) \rangle = \langle \phi(\vec{x}_i t) | \vec{u}(\vec{x}, t) = \vec{v} \rangle \cdot f(\vec{u}; \vec{x}_i t) \quad (54)$$

A propriedade descrita pela Eq. (53) é muito importante porque prova que a média da PDF granulada é igual à PDF contínua, dessa forma a PDF granulada representa corretamente um evento contínuo que pode ser discretizado, como o campo de velocidades.

A segunda propriedade, descrita pela Eq. (54) também é muito interessante porque representa a probabilidade condicionada, que relacionada a probabilidade de uma função qualquer, representada por $\phi(\vec{x}_i t)$, com a PDF da velocidade, somente quando $\vec{u}(\vec{x}, t)$ assume valores do campo de velocidade V .

Parte-se agora para uma prova matemática dessas propriedades.

$$1) \langle f'(\vec{u}; \vec{x}_i t) \rangle = f(\vec{u}; \vec{x}_i t)$$

Sabendo que a média de uma função genérica $Q(\vec{u}(\vec{x}, t))$ pode ser calculada da seguinte forma:

$$\langle Q(\vec{u}(\vec{x}, t)) \rangle = \iiint_v Q(\vec{u}(\vec{x}, t)) \cdot f(\vec{u}; \vec{x}, t) d^3\vec{u} \quad (55)$$

Supondo agora que essa função genérica $Q(\vec{u}(\vec{x}, t))$ seja discreta e possa ser corretamente representada por um Delta de Dirac.

$$Q(\vec{u}(\vec{x}, t)) = \delta(\vec{u}(\vec{x}, t) - \vec{v}) \quad (56)$$

Fazendo que os valores de $\vec{u}(\vec{x}, t)$ assumam os valores do campo $\vec{v}$, temos que:

$$\vec{u}(\vec{x}, t) = \vec{v} \quad (57)$$

$$f'(\vec{v}; \vec{x}, t) = \delta(\vec{v}' - \vec{v}) \quad (58)$$

Dessa forma pode-se escrever a Eq.(55) da seguinte forma:

$$\langle f'(\vec{v}; \vec{x}, t) \rangle = \iiint_v \delta(\vec{v}' - \vec{v}) \cdot f(\vec{v}; \vec{x}, t) d^3 \vec{v} \quad (59)$$

Pode-se agora utilizar a *sifting property* descrita pela Eq.(45) e obter a seguinte expressão:

$$\iiint_v \delta(\vec{v}' - \vec{v}) \cdot f(\vec{v}; \vec{x}, t) d^3 \vec{v} = f(\vec{v}; \vec{x}, t) \quad (60)$$

Logo, $\langle f'(\vec{v}; \vec{x}, t) \rangle = f(\vec{v}; \vec{x}, t)$ como pretendia-se demonstrar.

15.3. A Derivação da Equação de Transporte da PDF

Primeiramente deve ser descrito como a PDF da velocidade varia com o tempo. Dessa forma deve ser feita a sua derivada em relação ao tempo.

$$\frac{\partial f'(\vec{v}, t)}{\partial t} = \frac{\partial \delta(\vec{u}(\vec{x}, t) - \vec{v})}{\partial t} \quad (61)$$

Chamando $(\vec{v} - \vec{u}(\vec{x}, t))$ de φ , e aplicando a regra da cadeia para a derivação, temos:

$$\frac{\partial f'(\vec{v}, t)}{\partial t} = \frac{\partial \delta(\vec{u}(\vec{x}, t) - \vec{v})}{\partial t} = \frac{d\delta(-\varphi)}{d\varphi} \cdot \frac{d\varphi}{dt} \quad (62)$$

$$\frac{\partial f'(\vec{v}, t)}{\partial t} = -\delta'(\varphi) \cdot \frac{d\vec{u}(\vec{x}, t)}{dx} \quad (63)$$

Agora vamos derivar a PDF em relação à velocidade, para assim transportá-la ao longo do campo de velocidades.

$$\frac{\partial f'(\vec{v}, t)}{\partial v} = \frac{d\delta(-\varphi)}{d\varphi} \cdot \frac{d\varphi}{dv} \quad (64)$$

Temos que:

$$\frac{d\varphi}{dv} = \frac{d\delta(\vec{v} - \vec{u}(\vec{x}, t))}{dv} = 1 \quad (65)$$

Então, dessa forma, a Eq.(64) fica da seguinte forma:

$$\frac{\partial f'(\vec{v}, t)}{\partial v} = -\delta'(\varphi) \quad (66)$$

Agora, utilizando esse resultado, e voltando à Eq.(62), temos:

$$\frac{\partial f'(\vec{v}, t)}{\partial t} = -\delta'(\varphi) \cdot \frac{d\vec{u}(\vec{x}, t)}{dx} = \frac{\partial f'(\vec{v}, t)}{\partial v} \cdot \frac{d\vec{u}(\vec{x}, t)}{dx} \quad (67)$$

Partindo então para a derivada de $f'(\vec{v}, t)$ em relação a x , temos:

$$\frac{\partial f'(\vec{v}; x_j, t)}{\partial x_j} = \frac{\partial f'(\vec{v}; x_j, t)}{\partial \vec{v}_k} \cdot \frac{\partial v_k}{\partial x_j} \quad (68)$$

Onde $v_k = u_k(\vec{x}, t)$

Então, pode-se reescrever a Eq.(68) da seguinte forma:

$$\frac{\partial f'(\vec{v}; x_j, t)}{\partial x_j} = \frac{\partial f'(\vec{v}; x_j, t)}{\partial \vec{v}_k} \cdot \frac{\partial u_k(\vec{x}, t)}{\partial x_j} \quad (69)$$

Sabendo que, pela regra da cadeia, temos:

$$\frac{\partial(u_i f')}{\partial x_i} = u_i \cdot \frac{\partial f'}{\partial x_i} + f' \cdot \frac{\partial u_i}{\partial x_i} \quad (70)$$

Pela equação da continuidade, para a conservação da massa em um escoamento, temos que:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \rho \cdot \frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0 \quad (71)$$

Considerando um escoamento incompressível:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = 0 \rightarrow \frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0 \quad (72)$$

Substituindo essa igualdade na Eq.(70), obtem-se:

$$\frac{\partial(u_i f')}{\partial x_i} = u_i \cdot \frac{\partial f'}{\partial x_i} \quad (73)$$

Dessa forma, pode-se escrever que:

$$\begin{aligned} \frac{\partial f'(\vec{v}; x_j, t)}{\partial v_k} \cdot \frac{\partial u_k(\vec{x}, t)}{\partial x_j} &= \frac{\partial}{\partial x_i} [u_i(\vec{x}, t) \cdot f'(\vec{v}; x_j, t)] = \frac{\partial}{\partial x_i} [v_i \cdot f'(\vec{v}; x_j, t)] \\ &= v_i \cdot \frac{\partial f'(\vec{v}; x_j, t)}{\partial x_i} \quad (74) \end{aligned}$$

Com a utilização de todas as propriedades e derivadas vistas anteriormente, pode-se finalmente passar para a obtenção da equação do transporte da PDF de um campo de velocidades.

Para transportar uma propriedade ao longo de um escoamento, e ao longo do tempo, deve ser aplicada a derivada substancial dessa propriedade. Dessa forma deve ser aplicada a derivada substancial para a PDF da velocidade, conforme escrito na Eq.(75).

$$\frac{Df'}{Dt} = u_i \cdot \frac{\partial f'}{\partial x_i} + \frac{\partial f'}{\partial t} \quad (75)$$

Como visto anteriormente:

$$\frac{\partial f'(\vec{v}, t)}{\partial t} = - \frac{\partial f'(\vec{v}, t)}{\partial v} \cdot \frac{d\vec{u}(\vec{x}, t)}{dt} \quad (76)$$

$$u_i(\vec{x}, t) \cdot \frac{\partial f'(\vec{v}, t)}{\partial x} = v_i \cdot \frac{\partial f'}{\partial x_i} = - \frac{\partial f'}{\partial v_k} \cdot \frac{\partial v_k}{\partial x_i} \quad (77)$$

Substituindo as equações 77 e 76 na equação 75, temos que:

$$\frac{Df'}{Dt} = - \frac{\partial f'(\vec{v}, t)}{\partial v_k} \cdot \frac{d\vec{u}(\vec{x}, t)}{dt} - \frac{\partial f'}{\partial v_k} \left(u_i \cdot \frac{\partial u_i}{\partial x_i} \right) \quad (78)$$

Colocando $\frac{\partial f'}{\partial v_k}$ em evidência, temos:

$$\frac{Df'}{Dt} = -\frac{\partial f'}{\partial v_k} \left(\frac{d\vec{u}(\vec{x}, t)}{dt} + u_i \cdot \frac{\partial u_i}{\partial x_i} \right) \quad (79)$$

Na Eq.(79) é possível notar que:

$$\frac{d\vec{u}(\vec{x}, t)}{dt} + u_i \cdot \frac{\partial u_i}{\partial x_i} = \frac{Du_i}{Dt} \quad (80)$$

Dessa forma, a Eq.(79) assume a seguinte forma:

$$\frac{Df'}{Dt} = -\frac{\partial f'}{\partial v_k} \cdot \frac{Du_i}{Dt} \quad (81)$$

Temos que:

$$-\frac{\partial}{\partial v_i} \left(f' \cdot \frac{Du_i}{Dt} \right) = -\frac{\partial f'}{\partial v_i} \cdot \frac{Du_i}{Dt} - f' \cdot \frac{D}{Dt} \left(\frac{\partial u_i}{\partial v_i} \right) \quad (82)$$

Onde $\frac{\partial u_i}{\partial v_i} = 0$ porque u_i não depende de v_i , depende somente do espaço e do tempo. Dessa forma temos a igualdade da Eq.(83).

$$-\frac{\partial}{\partial v_i} \left(f' \cdot \frac{Du_i}{Dt} \right) = -\frac{\partial f'}{\partial v_i} \cdot \frac{Du_i}{Dt} \quad (83)$$

Então, a Eq.(81) pode ser reescrita da seguinte forma:

$$\frac{Df'}{Dt} = u_i \cdot \frac{\partial f'}{\partial x_i} + \frac{\partial f'}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial v_i} \left(f' \cdot \frac{Du_i}{Dt} \right) \quad (84)$$

Tirando uma média estatística da Eq.(84) temos:

$$\left\langle \frac{Df'}{Dt} \right\rangle = \left\langle u_i \cdot \frac{\partial f'}{\partial x_i} \right\rangle + \left\langle \frac{\partial f'}{\partial t} \right\rangle = \left\langle -\frac{\partial}{\partial v_i} \left(f' \cdot \frac{Du_i}{Dt} \right) \right\rangle \quad (85)$$

Pela estatística, sabe-se que a derivada da média é a média da derivada. Usando também a propriedade descrita pela Eq.(53), temos:

$$\left\langle \frac{\partial f'}{\partial t} \right\rangle = \frac{\partial}{\partial t} \langle f' \rangle = \frac{\partial f}{\partial t} \quad (86)$$

Utilizando as mesmas propriedades, também podemos obter a Eq.(87).

$$\left\langle u_i \cdot \frac{\partial f'}{\partial x_i} \right\rangle = u_i \cdot \frac{\partial}{\partial x_i} \langle f' \rangle = u_i \cdot \frac{\partial f}{\partial x_i} \quad (87)$$

Substituindo as equações (86) e (87) na Eq. (85) é possível obter:

$$\left\langle \frac{Df'}{Dt} \right\rangle = \frac{\partial f}{\partial t} + u_i \cdot \frac{\partial f}{\partial x_i} = \left\langle -\frac{\partial}{\partial v_i} \left(f' \cdot \frac{Du_i}{Dt} \right) | \vec{v} \right\rangle \quad (88)$$

Onde $\left\langle -\frac{\partial}{\partial v_i} \left(f' \cdot \frac{Du_i}{Dt} \right) | \vec{v} \right\rangle$ é uma média condicionada para u_i assumindo os valores de $\vec{v}$ do campo de velocidades.

Através da Eq.(88), fazendo $\frac{Du_i}{Dt} = \phi$, e utilizando a propriedade descrita pela Eq.(54), obtem-se:

$$\left\langle \frac{Df'}{Dt} \right\rangle = \frac{\partial f}{\partial t} + u_i \cdot \frac{\partial f}{\partial x_i} = -\frac{\partial}{\partial v_i} \left(\left\langle \frac{Du_i}{Dt} | \vec{v} \right\rangle \cdot f \right) \quad (89)$$

Até o momento, essa dedução tem sido apenas matemática, exceto pela hipótese de escoamento incompressível, feita na Eq.(73). Para inserir a física do fenômeno do escoamento nessa dedução, deve ser introduzida a Equação de Navier-Stokes (90).

$$\frac{Du_i}{Dt} = \frac{1}{\rho} \cdot \frac{\partial P}{\partial x_i} + \nu \cdot \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_i \partial x_i} \quad (90)$$

Substituindo a Eq.(90) na Eq.(89) é possível finalmente obter a Equação do Transporte da PDF da Velocidade.

$$\frac{\partial f}{\partial t} + u_i \cdot \frac{\partial f}{\partial x_i} = -\frac{\partial}{\partial v_i} \left(f \cdot \left\langle \frac{1}{\rho} \cdot \frac{\partial P}{\partial x_i} + \nu \cdot \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_i \partial x_i} \right\rangle | \vec{v} \right) \quad (91)$$

16. ANEXO II

Nesse anexo é apresentado o mecanismo de reação para o metano. Esse mecanismo conta com 17 espécies e 58 reações.

17. 17
18. species=CH₄ mw=16.043030
19. species=CH₃ mw=15.035060
20. species=CH₂ mw=14.027090
21. species=CH mw=13.019120
22. species=CH₂O mw=30.026490
23. species=HCO mw=29.018520
24. species=CO₂ mw=44.009951
25. species=CO mw=28.010550
26. species=H₂ mw=2.015940
27. species=H mw=1.007970
28. species=O₂ mw=31.998800
29. species=O mw=15.999400
30. species=OH mw=17.007370
31. species=HO₂ mw=33.006770
32. species=H₂O₂ mw=34.014740
33. species=H₂O mw=18.015340
34. species=N₂ mw=28.013399
35. 58
36. reaction=CH₃+H+M<=>CH₄+M
37. reaction=CH₄+O₂<=>CH₃+HO₂
38. reaction=CH₄+H<=>CH₃+H₂
39. reaction=CH₄+O<=>CH₃+OH
40. reaction=CH₄+OH<=>CH₃+H₂O
41. reaction=CH₃+O<=>CH₂O+H
42. reaction=CH₃+OH<=>CH₂O+H₂
43. reaction=CH₃+OH<=>CH₂+H₂O
44. reaction=CH₃+H<=>CH₂+H₂

45. reaction= $\text{CH}_2 + \text{H} \rightleftharpoons \text{CH} + \text{H}_2$
46. reaction= $\text{CH}_2 + \text{OH} \rightleftharpoons \text{CH}_2\text{O} + \text{H}$
47. reaction= $\text{CH}_2 + \text{OH} \rightleftharpoons \text{CH} + \text{H}_2\text{O}$
48. reaction= $\text{CH} + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{HCO} + \text{O}$
49. reaction= $\text{CH} + \text{O} \rightleftharpoons \text{CO} + \text{H}$
50. reaction= $\text{CH} + \text{OH} \rightleftharpoons \text{HCO} + \text{H}$
51. reaction= $\text{CH} + \text{CO}_2 \rightleftharpoons \text{HCO} + \text{CO}$
52. reaction= $\text{CH}_2 + \text{CO}_2 \rightleftharpoons \text{CH}_2\text{O} + \text{CO}$
53. reaction= $\text{CH}_2 + \text{O} \rightleftharpoons \text{CO} + 2\text{H}$
54. reaction= $\text{CH}_2 + \text{O} \rightleftharpoons \text{CO} + \text{H}_2$
55. reaction= $\text{CH}_2 + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{CO}_2 + 2\text{H}$
56. reaction= $\text{CH}_2 + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{CH}_2\text{O} + \text{O}$
57. reaction= $\text{CH}_2 + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{CO}_2 + \text{H}_2$
58. reaction= $\text{CH}_2 + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{CO} + \text{H}_2\text{O}$
59. reaction= $\text{CH}_2 + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{CO} + \text{OH} + \text{H}$
60. reaction= $\text{CH}_2 + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{HCO} + \text{OH}$
61. reaction= $\text{CH}_2\text{O} + \text{OH} \rightleftharpoons \text{HCO} + \text{H}_2\text{O}$
62. reaction= $\text{CH}_2\text{O} + \text{H} \rightleftharpoons \text{HCO} + \text{H}_2$
63. reaction= $\text{CH}_2\text{O} + \text{M} \rightleftharpoons \text{HCO} + \text{H} + \text{M}$
64. reaction= $\text{CH}_2\text{O} + \text{O} \rightleftharpoons \text{HCO} + \text{OH}$
65. reaction= $\text{HCO} + \text{OH} \rightleftharpoons \text{CO} + \text{H}_2\text{O}$
66. reaction= $\text{HCO} + \text{M} \rightleftharpoons \text{H} + \text{CO} + \text{M}$
67. reaction= $\text{HCO} + \text{H} \rightleftharpoons \text{CO} + \text{H}_2$
68. reaction= $\text{HCO} + \text{O} \rightleftharpoons \text{CO}_2 + \text{H}$
69. reaction= $\text{HCO} + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{HO}_2 + \text{CO}$
70. reaction= $\text{CO} + \text{O} + \text{M} \rightleftharpoons \text{CO}_2 + \text{M}$
71. reaction= $\text{CO} + \text{OH} \rightleftharpoons \text{CO}_2 + \text{H}$
72. reaction= $\text{CO} + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{CO}_2 + \text{O}$
73. reaction= $\text{HO}_2 + \text{CO} \rightleftharpoons \text{CO}_2 + \text{OH}$
74. reaction= $\text{H}_2 + \text{O}_2 \rightleftharpoons 2\text{OH}$
75. reaction= $\text{OH} + \text{H}_2 \rightleftharpoons \text{H}_2\text{O} + \text{H}$
76. reaction= $\text{H} + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{OH} + \text{O}$
77. reaction= $\text{O} + \text{H}_2 \rightleftharpoons \text{OH} + \text{H}$

- 78. reaction= $\text{H} + \text{O}_2 + \text{M} \rightleftharpoons \text{HO}_2 + \text{M}$
- 79. reaction= $\text{OH} + \text{HO}_2 \rightleftharpoons \text{H}_2\text{O} + \text{O}_2$
- 80. reaction= $\text{H} + \text{HO}_2 \rightleftharpoons 2\text{OH}$
- 81. reaction= $\text{O} + \text{HO}_2 \rightleftharpoons \text{O}_2 + \text{OH}$
- 82. reaction= $2\text{OH} \rightleftharpoons \text{O} + \text{H}_2\text{O}$
- 83. reaction= $2\text{H} + \text{M} \rightleftharpoons \text{H}_2 + \text{M}$
- 84. reaction= $2\text{H} + \text{H}_2 \rightleftharpoons 2\text{H}_2$
- 85. reaction= $2\text{H} + \text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{H}_2 + \text{H}_2\text{O}$
- 86. reaction= $2\text{H} + \text{CO}_2 \rightleftharpoons \text{H}_2 + \text{CO}_2$
- 87. reaction= $\text{H} + \text{OH} + \text{M} \rightleftharpoons \text{H}_2\text{O} + \text{M}$
- 88. reaction= $\text{H} + \text{O} + \text{M} \rightleftharpoons \text{OH} + \text{M}$
- 89. reaction= $\text{H} + \text{HO}_2 \rightleftharpoons \text{H}_2 + \text{O}_2$
- 90. reaction= $2\text{HO}_2 \rightleftharpoons \text{H}_2\text{O}_2 + \text{O}_2$
- 91. reaction= $\text{H}_2\text{O}_2 + \text{M} \rightleftharpoons 2\text{OH} + \text{M}$
- 92. reaction= $\text{H}_2\text{O}_2 + \text{H} \rightleftharpoons \text{HO}_2 + \text{H}_2$
- 93. reaction= $\text{H}_2\text{O}_2 + \text{OH} \rightleftharpoons \text{H}_2\text{O} + \text{HO}_2$

17. ANEXO III

ESTUDOS UTILIZANDO O SOFTWARE FLUENT

Apesar da utilização do software comercial FLUENT para uma simulação acústica da câmara de combustão ter sido descartada, o entendimento de seu funcionamento e seus métodos de simulação de combustão e escoamento é muito útil, uma vez que serão utilizados provenientes das simulações como entradas para o modelo utilizado no Chemkin.

Com o intuito de familiarização com o FLUENT foi realizada uma simulação de uma injeção de ar e metano em um tubo, conforme a figura abaixo.

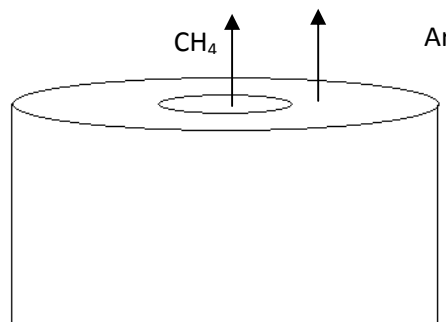


Figura 20. Esquema do exemplo simulado.

A entrada de metano possui um raio de 2 mm e a entrada de ar possui um raio de 25 mm. Tanto o combustível como o ar entram no domínio com uma velocidade de 0,2m/s. Foi feito um domínio com 600 mm de comprimento, 100 mm de diâmetro e axissimétrico.

A malha gerada para esse domínio foi estruturada, com 58.702 elementos, mostrada na figura abaixo.

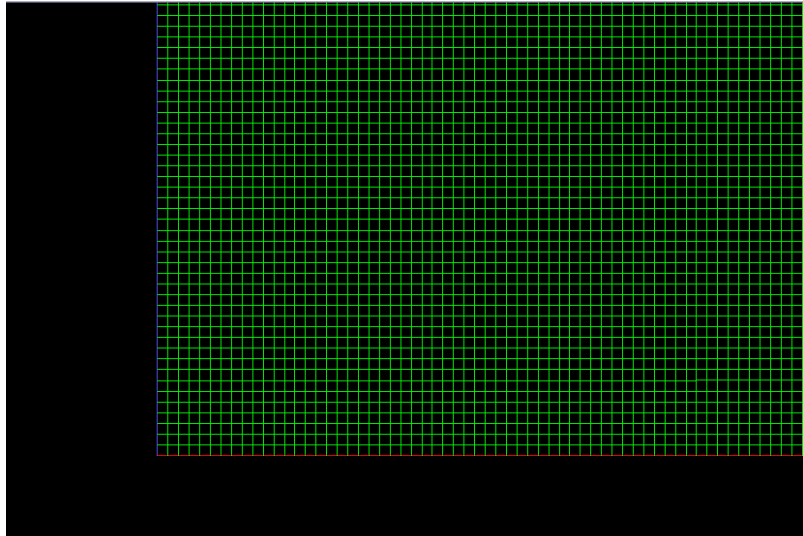


Figura 21. Detalhe da malha gerada.

Inicialmente foi simulado somente o escoamento do combustível e do ar, utilizando o modelo laminar, foram feitas 1000 iterações e foram obtidos resíduos da ordem de 10^{-5} , o que é bastante satisfatório. Através dessa simulação foi obtido o campo de velocidades, mostrado na figura a seguir, onde é possível perceber o formato do jato e como ele se abre ao longo do domínio.

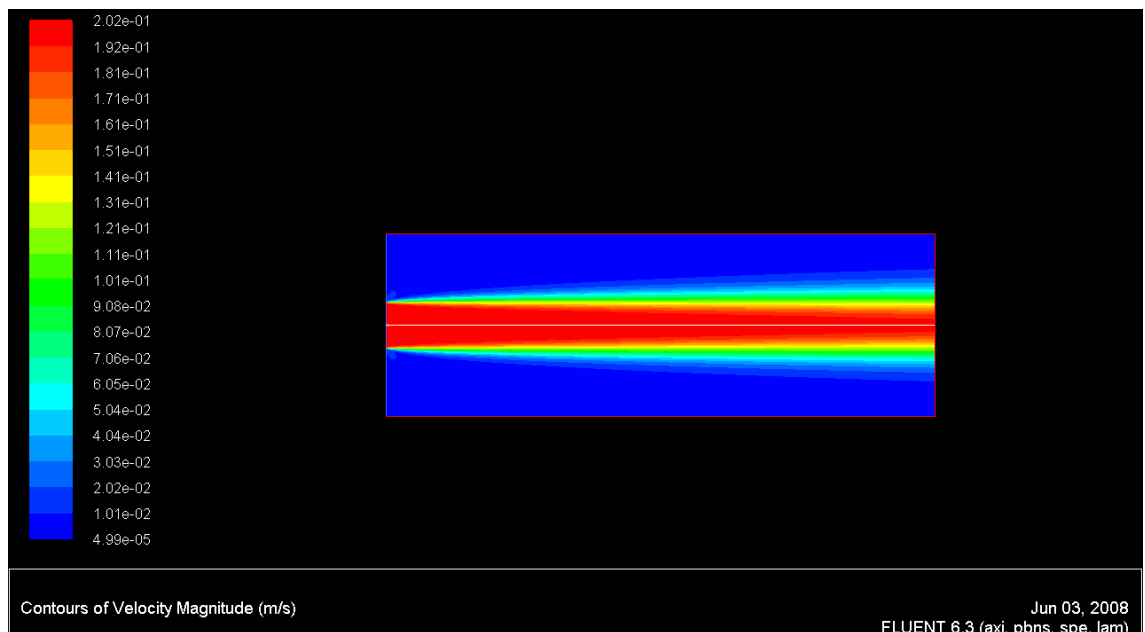


Figura 22. Campo de velocidades.

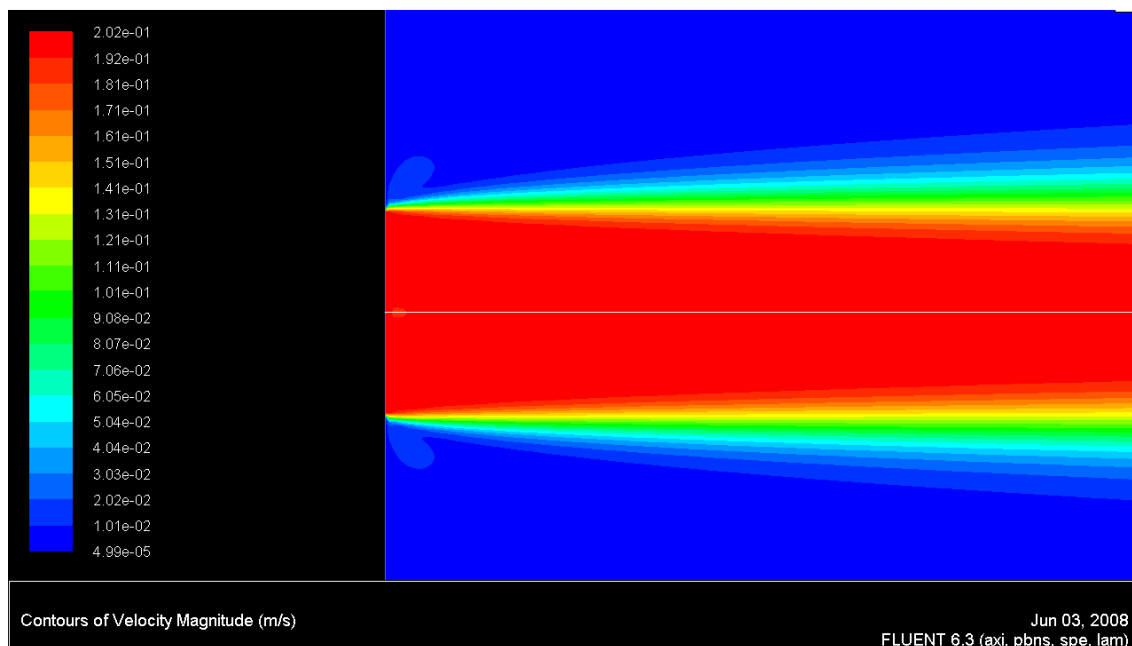


Figura 23. Detalhe do campo de velocidades, na entrada de ar e combustível.

Após a convergência da simulação do escoamento, partiu-se para a simulação da mistura entre combustível e ar. Com essa simulação pretende-se obter a fração de mistura de CH_4 ao longo do domínio para posteriormente aplicar relações que serão capazes de fornecer a entalpia e a temperatura ao longo do domínio, considerando a existência da combustão.

Para essa simulação, foram definidas as espécies nas entradas, e suas frações mássicas. Sendo 1 a fração mássica de CH_4 na entrada de combustível e 0,21 a fração mássica de O_2 na entrada de ar. O modelo de combustão a ser realizado é o *methane-air one step*, porém, a reação é desligada, simulando dessa forma somente a mistura entre o ar e o combustível.

Os resultados dessa simulação mostram a fração de mistura(ξ) de CH_4 ao longo do domínio, conforme a figura abaixo.

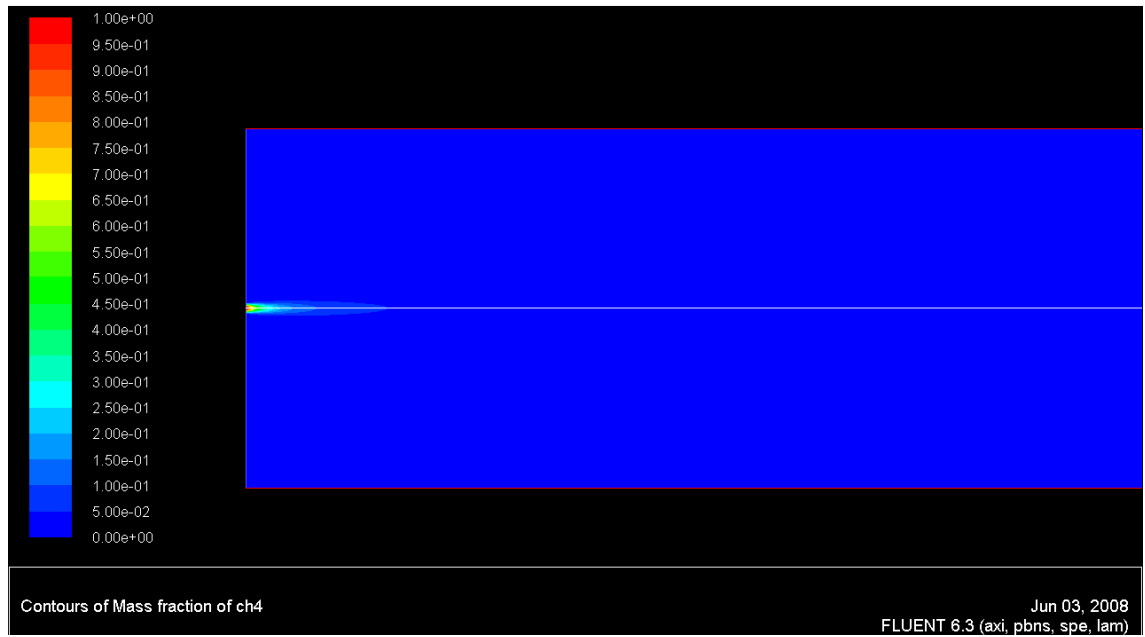


Figura 24. Fração de mistura de CH_4 .

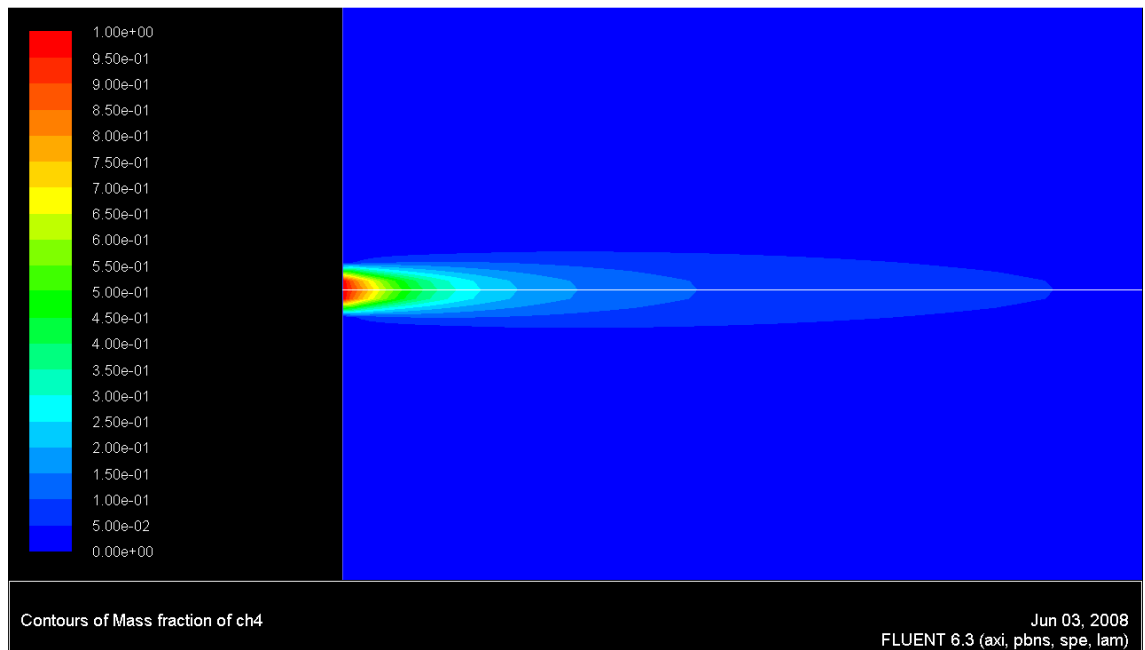


Figura 25. Detalhe da fração de mistura de CH_4 .

Com os dados da fração de mistura é possível calcular a entalpia e a temperatura ao longo do domínio, como mostram as relações abaixo.

$$T = \frac{\Delta h}{c_p} (\xi - Y_{fuel}) + T_0 \quad (32)$$

$$Y_{fuel} = \begin{cases} \frac{(\xi - \xi_{est})}{1 - \xi_{est}} & \text{se } \xi < \xi_{est} \\ 0 & \text{se } \xi > \xi_{est} \end{cases} \quad (33)$$

$$h = \xi(h_{ch4in} - h_{arin}) + h_{arin} \quad (34)$$

Utilizando essas equações obtém-se o gráfico abaixo, que ilustra a temperatura e a fração de mistura ao longo do comprimento do domínio. Como esperado, o gráfico indica que a máxima temperatura ocorre quando a fração de mistura é igual a 0,055, o valor estequiométrico, indicando a ocorrência da reação de combustão.

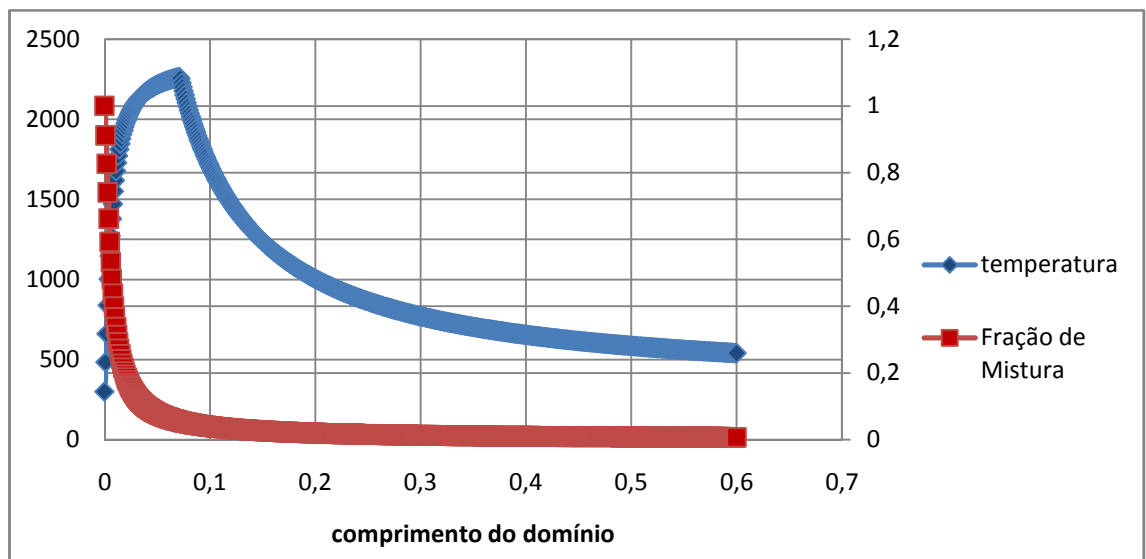


Figura 26. Gráfico da fração de mistura e temperatura ao longo do comprimento do domínio.

18. ANEXO IV

Documentação dos dados e resultados de algumas das simulações feitas em Chemkin.

Número da Simulação		1	2	3
Modelo	Mod.	IEM	IEM	IEM
Constante para modelo de mistura	C.Mix.	1	1	1
Passo de tempo de Monte Carlo	DT	1,00E-02	1,00E-02	1,00E-02
Fluxo mássico[kg/s]	FLRT	0,0708	0,0708	0,0708
Tempo de mistura	Mix.t	1,00E-03	1,00E-03	1,00E-03
Número de partículas estocásticas	Npar	20	20	20
Pressão [atm]	P	2	2	2
Temperatura Inicial do reator [K]	Temp.	1450	1500	1600
Temperatura de entrada dos gases [K]	TinL	350	350	350
Volume do reator [cm3]	Vol.	-	-	-
Tempo de residência	Tau	0,034	0,034	0,034
Fração molar de CH4 na entrada	CH4	0,095	0,095	0,095
Fração molar de N2 na entrada	N2	0,7148	0,7148	0,7148
Fração molar de O2 na entrada	O2	0,1903	0,1903	0,1903
Tempo de simulação	t	0,1	0,1	0,1
Resultado		Não Reage	Não Reage	Erro de iteração

Número da Simulação		4	5	6
Modelo	Mod.	IEM	IEM	IEM
Constante para modelo de mistura	C.Mix.	1	1	2
Passo de tempo de Monte Carlo	DT	1,00E-02	1,00E-02	9,90E-02
Fluxo mássico[kg/s]	FLRT	0,0708	0,0708	0,0708[g/s]
Tempo de mistura	Mix.t	1,00E-03	1,00E-03	1,00E-03
Número de partículas estocásticas	Npar	20	20	145
Pressão [atm]	P	2	2	1,9738
Temperatura Inicial do reator [K]	Temp.	1500	1500	1450
Temperatura de entrada dos gases [K]	TinL	350	350	350
Volume do reator [cm3]	Vol.	-	1077,56	1077,56
Tempo de residência	Tau	0,034	-	-
Fração molar de CH4 na entrada	CH4	0,095	0,095	0,095
Fração molar de N2 na entrada	N2	0,7148	0,7148	0,7148
Fração molar de O2 na entrada	O2	0,1903	0,1903	0,1903
Tempo de simulação	t	0,5	0,5	1
Resultado		Erro de iteração	Erro de iteração	Reagiu
			↓	
		Após essa simulação foi percebido o erro no número de CFL, aumentando o número de partículas foi possível manter um passo de tempo pequeno e mesmo assim ter a condição de reator aberto.		

Número da Simulação		7	8	9
Modelo	Mod.	IEM	IEM	IEM
Constante para modelo de mistura	C.Mix.	2	2	2
Passo de tempo de Monte Carlo	DT	9,90E-02	1,00E-04	1,00E-04
Fluxo mássico[kg/s]	FLRT	0,0708[kg/s]	0,0708[kg/s]	0,0708[kg/s]
Tempo de mistura	Mix.t	1,00E-03	1,00E-03	1,00E-04
Número de partículas estocásticas	Npar	145	145	145
Pressão [atm]	P	1,9738	1,9738	1,9738
Temperatura inicial do reator [K]	Temp.	1450	1450	1450
Temperatura de entrada dos gases [K]	Tinl.	350	350	350
Volume do reator [cm ³]	Vol.	1077,56	1077,56	1077,56
Tempo de residência	Tau	-	-	-
Fração molar de CH ₄ na entrada	CH ₄	0,095	0,095	0,095
Fração molar de N ₂ na entrada	N ₂	0,7148	0,7148	0,7148
Fração molar de O ₂ na entrada	O ₂	0,1903	0,1903	0,1903
Tempo de simulação	t	1	1	1
Resultado		Erro	Não Reage	Não Reage
		↓		
		Ao aumentar o fluxo de massa, o DT ficou maior que o Tau, o que não pode.		

Número da Simulação		13	14	15
Modelo	Mod.	IEM	IEM	IEM
Constante para modelo de mistura	C.Mix.	2	2	2
Passo de tempo de Monte Carlo	DT	1,00E-03	1,00E-03	1,00E-03
Fluxo mássico[kg/s]	FLRT	0,0708[kg/s]	0,0708[kg/s]	0,0708[kg/s]
Tempo de mistura	Mix.t	1,00E-06	1,00E-06	1,00E-06
Número de partículas estocásticas	Npar	400	400	400
Pressão [atm]	P	1,9738	1,9738	1,9738
Temperatura inicial do reator [K]	Temp.	1450	1450	1500
Temperatura de entrada dos gases [K]	Tinl.	350	350	350
Volume do reator [cm3]	Vol.	20	-	-
Tempo de residência	Tau	-	0,0034	0,0034
Fração molar de CH4 na entrada	CH4	0,095	0,095	0,095
Fração molar de N2 na entrada	N2	0,7148	0,7148	0,7148
Fração molar de O2 na entrada	O2	0,1903	0,1903	0,1903
Tempo de simulação	t	1	1	1
Resultado		Não Reage	Não Reage	Não Reage

Número da Simulação		17	18	19
Modelo	Mod.	IEM	IEM	IEM
Constante para modelo de mistura	C.Mix.	2	2	2
Passo de tempo de Monte Carlo	DT	9,90E-02	9,90E-02	9,90E-02
Fluxo mássico[kg/s]	FLRT	0,091[g/s]	0,091[g/s]	0,1[g/s]
Tempo de mistura	Mix.t	1,00E-03	1,00E-03	1,00E-03
Número de partículas estocásticas	Npar	400	400	400
Pressão [atm]	P	1,9738	1,9738	1,9738
Temperatura inicial do reator [K]	Temp.	1500	1500	1500
Temperatura de entrada dos gases [K]	Tinl.	350	350	350
Volume do reator [cm3]	Vol.	1077,56	1077,56	1077,56
Tempo de residência	Tau	-	-	-
Fração molar de CH4 na entrada	CH4	0,095	0,095	0,095
Fração molar de N2 na entrada	N2	0,7148	0,7148	0,7148
Fração molar de O2 na entrada	O2	0,1903	0,1903	0,1903
Tempo de simulação	t	1	1	1
Resultado		Não Reage	Reage	Reage

Número da Simulação		20	21	22
Modelo	Mod.	IEM	IEM	IEM
Constante para modelo de mistura	C.Mix.	2	2	2
Passo de tempo de Monte Carlo	DT	9,90E-02	8,00E-02	7,00E-02
Fluxo mássico[kg/s]	FLRT	0,4[g/s]	0,07[g/s]	0,07[g/s]
Tempo de mistura	Mix.t	1,00E-03	1,00E-03	1,00E-03
Número de partículas estocásticas	Npar	400	400	400
Pressão [atm]	P	1,9738	1,9738	1,9738
Temperatura inicial do reator [K]	Temp.	1500	1500	1500
Temperatura de entrada dos gases [K]	Tinl.	350	350	350
Volume do reator [cm3]	Vol.	1077,56	1077,56	1077,56
Tempo de residência	Tau	-	-	-
Fração molar de CH4 na entrada	CH4	0,095	0,095	0,095
Fração molar de N2 na entrada	N2	0,7148	0,7148	0,7148
Fração molar de O2 na entrada	O2	0,1903	0,1903	0,1903
Tempo de simulação	t	1	1	1
Resultado		Não Reage	Reage	Reage

Número da Simulação		23	24	25
Modelo	Mod.	IEM	IEM	IEM
Constante para modelo de mistura	C.Mix.	2	2	2
Passo de tempo de Monte Carlo	DT	6,00E-02	5,00E-02	4,00E-02
Fluxo mássico[kg/s]	FLRT	0,07[g/s]	0,07[g/s]	0,07[g/s]
Tempo de mistura	Mix.t	1,00E-03	1,00E-03	1,00E-03
Número de partículas estocásticas	Npar	400	400	400
Pressão [atm]	P	1,9738	1,9738	1,9738
Temperatura inicial do reator [K]	Temp.	1500	1500	1500
Temperatura de entrada dos gases [K]	Tinl.	350	350	350
Volume do reator [cm3]	Vol.	1077,56	1077,56	1077,56
Tempo de residência	Tau	-	-	-
Fração molar de CH4 na entrada	CH4	0,095	0,095	0,095
Fração molar de N2 na entrada	N2	0,7148	0,7148	0,7148
Fração molar de O2 na entrada	O2	0,1903	0,1903	0,1903
Tempo de simulação	t	1	1	1
Resultado		Reage	Reage	Reage

Número da Simulação		26	27	28	29
Modelo	Mod.	IEM	IEM	IEM	IEM
Constante para modelo de mistura	C.Mix.	2	2	2	2
Passo de tempo de Monte Carlo	DT	3,00E-02	4,00E-02	4,00E-02	4,00E-02
Fluxo mássico[kg/s]	FLRT	0,07[g/s]	0,09[g/s]	0,1[g/s]	0,4[g/s]
Tempo de mistura	Mix.t	1,00E-03	1,00E-03	1,00E-03	1,00E-03
Número de partículas estocásticas	Npar	400	400	400	400
Pressão [atm]	P	1,9738	1,9738	1,9738	1,9738
Temperatura inicial do reator [K]	Temp.	1500	1500	1500	1500
Temperatura de entrada dos gases [K]	Tinl.	350	350	350	350
Volume do reator [cm3]	Vol.	1077,56	1077,56	1077,56	1077,56
Tempo de residência	Tau	-	-	-	-
Fração molar de CH4 na entrada	CH4	0,095	0,095	0,095	0,095
Fração molar de N2 na entrada	N2	0,7148	0,7148	0,7148	0,7148
Fração molar de O2 na entrada	O2	0,1903	0,1903	0,1903	0,1903
Tempo de simulação	t	1	1	1	1
Resultado		Erro	Reage	Reage	Não Reage
		↓			
		Problemas com poucas partículas ou DT muito baixo.			

Número da Simulação		30	31	32	33
Modelo	Mod.	IEM	IEM	IEM	IEM
Constante para modelo de mistura	C.Mix.	2	2	2	2
Passo de tempo de Monte Carlo	DT	4,00E-02	5,00E-02	7,00E-02	7,00E-02
Fluxo mássico[kg/s]	FLRT	0,2[g/s]	0,3[g/s]	0,2[g/s]	0,3[g/s]
Tempo de mistura	Mix.t	1,00E-03	1,00E-03	1,00E-03	1,00E-03
Número de partículas estocásticas	Npar	400	400	400	400
Pressão [atm]	P	1,9738	1,9738	1,9738	1,9738
Temperatura inicial do reator [K]	Temp.	1500	1500	1500	1500
Temperatura de entrada dos gases [K]	Tinl.	350	350	350	350
Volume do reator [cm3]	Vol.	1077,56	1077,56	1077,56	1077,56
Tempo de residência	Tau	-	-	-	-
Fração molar de CH4 na entrada	CH4	0,095	0,095	0,095	0,095
Fração molar de N2 na entrada	N2	0,7148	0,7148	0,7148	0,7148
Fração molar de O2 na entrada	O2	0,1903	0,1903	0,1903	0,1903
Tempo de simulação	t	1	1	1	1
Resultado		Reage	Reage	Reage	Reage

Número da Simulação		34	35	45	46
Modelo	Mod.	IEM	IEM	IEM	IEM
Constante para modelo de mistura	C.Mix.	2	2	2	2
Passo de tempo de Monte Carlo	DT	7,00E-02	8,00E-02	1,00E-03	1,00E-03
Fluxo mássico[kg/s]	FLRT	0,4[g/s]	0,4[g/s]	60 [g/s]	60 [g/s]
Tempo de mistura	Mix.t	1,00E-03	1,00E-03	1,00E-03	1,00E-03
Número de partículas estocásticas	Npar	400	400	150	626
Pressão [atm]	P	1,9738	1,9738	1,9738	1,9738
Temperatura inicial do reator [K]	Temp.	1500	1500	1500	1500
Temperatura de entrada dos gases [K]	Tinl.	350	350	350	350
Volume do reator [cm3]	Vol.	1077,56	1077,56	3980	3980
Tempo de residência	Tau	-	-	-	-
Fração molar de CH4 na entrada	CH4	0,095	0,095	0,095	0,095
Fração molar de N2 na entrada	N2	0,7148	0,7148	0,7148	0,7148
Fração molar de O2 na entrada	O2	0,1903	0,1903	0,1903	0,1903
Tempo de simulação	t	1	1	1	1
Resultado		Não Reage	Não Reage	Erro	Não Reage
				↓	
				Problemas com poucas partículas ou DT muito baixo.	

Número da Simulação		47	48	49	50
Modelo	Mod.	IEM	IEM	IEM	IEM
Constante para modelo de mistura	C.Mix.	2	2	2	2
Passo de tempo de Monte Carlo	DT	1,00E-03	1,00E-03	1,00E-03	1,00E-03
Fluxo mássico[kg/s]	FLRT	60 [g/s]	60 [g/s]	60 [g/s]	60 [g/s]
Tempo de mistura	Mix.t	1,00E-04	1,00E-05	1,00E-06	1,00E-07
Número de partículas estocásticas	Npar	626	626	626	626
Pressão [atm]	P	1,9738	1,9738	1,9738	1,9738
Temperatura inicial do reator [K]	Temp.	1500	1500	1500	1500
Temperatura de entrada dos gases [K]	Tinl.	350	350	350	350
Volume do reator [cm3]	Vol.	3980	3980	3980	3980
Tempo de residência	Tau	-	-	-	-
Fração molar de CH4 na entrada	CH4	0,095	0,095	0,095	0,095
Fração molar de N2 na entrada	N2	0,7148	0,7148	0,7148	0,7148
Fração molar de O2 na entrada	O2	0,1903	0,1903	0,1903	0,1903
Tempo de simulação	t	1	1	1	1
Resultado		Não Reage	Não Reage	Não Reage	Não Reage