

## **SIMULATIONS OF NON-PREMIXED LAMINAR COMBUSTION CONSIDERING DIFFERENT CHEMICAL MECHANISMS**

**Pedro F. P. Ferreira**

**Fábio A. da Cunha**

*pedro.ferracuti@hotmail.com.br*

*fabioalfaia@unb.br*

*Faculdade do Gama, Universidade de Brasília*

*St. Leste Projeção A - Gama Leste, 72444-240, Brasília - DF, Brasil*

**Lucas G. Vivacqua**

*lucasgvivacqua@hotmail.com*

*Faculdade do Gama, Universidade de Brasília*

*St. Leste Projeção A - Gama Leste, 72444-240, Brasília - DF, Brasil*

**Abstract.** Our understanding of combustion has developed greatly over the past century and the most recent improvement is associated to modeling and simulation of combustion. To contribute to such advancement this work presents a mathematical modeling of non-premixed gaseous combustion and verifies the effects of chemical kinetic mechanisms over the velocity, temperature and chemical species concentration fields. This paper presents simulations with two different reaction mechanisms: global mechanism and skeletal mechanism. On the utilized mathematical model, the flow field is obtained by the solution of the Navier-Stokes equations, the temperature field is obtained by the solution of the energy conservation equations and the species concentration fields are obtained by the solution of the conservation equations for individual chemical species. A computational code was written on MATLAB for the simulations, considering bidimensional domain and axial symmetry. The simulation model is validated by comparing with experimental data.

**Keywords:** Chemical Mechanism, Numerical Simulation, Methane Combustion.

## 1 Introdução

A combustão é um problema recorrente na engenharia. A crescente preocupação com as emissões de gases provenientes da queima de hidrocarbonetos fósseis tem impulsionado estudos sobre a combustão. Segundo Smooke, Mitchell e Keyes [1] as conclusões derivadas de estudos de chamas laminares são importantes na caracterização dos processos de combustão que ocorrem em chamas turbulentas, na melhoria da eficiência de motores e na compreensão da formação de poluentes baseados na combustão. Mitchell, Sarofim e Clomburg [2] afirmam que estudo de chamas de difusão laminar auxiliam na compreensão de estruturas de chamas de difusão turbulentas, cujos formatos podem ser aproximados como chamas laminares enrugadas. Os fatos citados e a importância de otimização das máquinas a combustão motivaram a proposta do presente trabalho, que consiste em modelar e simular a combustão em escoamento laminar sem pré-mistura de metano considerando diferentes mecanismos de reação química. Com o tipo de aproximação proposta será possível o cálculo de campos de velocidades, campos de temperaturas e campos concentração de espécies químicas próximos dos observados em um equipamento real.

## 2 Metodologia

A modelagem matemática da combustão em escoamento laminar foi baseada na solução de equações de conservação para diversas quantidades específicas. O escoamento laminar, incompressível, fluido Newtoniano, foi obtido pela solução das equações de Navier-Stokes, Eqs. (1)-(2). O campo de fração molar foi obtido pela solução de equações de conservação de espécies químicas, Eq (3), e a obtenção do campo de temperaturas foi realizada por meio da solução da equação de conservação da energia, Eq. (4).

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0. \quad (1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \mathbf{u}) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) = -\nabla \cdot p + \nabla \cdot (\mu \nabla \mathbf{u}) + (\rho - \rho_\infty) g. \quad (2)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_k) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} Y_k) = \nabla \cdot (\rho D \nabla Y_k) + \dot{\omega}_k, \quad k = 1, 2, \dots, N_{sp}. \quad (3)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho c_p T) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} c_p T) = \nabla \cdot (k \nabla T) + \sum_{k=1}^{N_{sp}} h_{f,k} \dot{\omega}_k. \quad (4)$$

Em que  $\mathbf{u}$  é o vetor velocidade,  $p$  é a pressão,  $\rho$  é a massa específica e  $\mu$  é a viscosidade da mistura de gases. O empuxo dos gases é dado pelo termo  $(\rho - \rho_\infty) g$ , com a aceleração da gravidade de  $g$ . Os termos  $k$  e  $c_p$  representam a condutividade térmica e o calor específico, respectivamente. O coeficiente de difusão de massa foi calculado como:  $\rho D = k / c_p$ , devido hipótese de número de Lewis unitário. A taxa de produção  $\dot{\omega}_k$ , presente nas Eqs (3) e (4), foi calculada com base nos mecanismos de reação.

O mecanismo de reação global de quatro passos de Westbrook e Dryer [3] foi utilizado nas simulações do presente estudo, conforme apresentado na Tabela 1. O mecanismo de reação esquelético desenvolvido por Smooke, Mitchell e Keyes [1] também foi utilizado no presente estudo, conforme apresentado na tabela 2, com 15 espécies e 42 reações:

Tabela 1. Mecanismo de reação global para o metano

Nº	Reação
1	$\text{CH}_4 + 0.5\text{O}_2 \rightarrow \text{CO} + 2\text{H}_2$
2	$\text{CO} + 0.5\text{O}_2 \rightarrow \text{CO}_2$
3	$\text{CO}_2 \rightarrow \text{CO} + 0.5\text{O}_2$
4	$\text{H}_2 + 0.5\text{O}_2 \rightarrow \text{H}_2\text{O}$

Tabela 2. Mecanismo de reação esquelético para o metano

Nº	Reação	Nº	Reação	Nº	Reação
1	$\text{CH}_4 + \text{M} \leftrightarrow \text{CH}_3 + \text{H} + \text{M}$	15	$\text{CO} + \text{O} + \text{M} \leftrightarrow \text{M} + \text{CO}_2$	29	$\text{OH} + \text{H}_2 \leftrightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{H}$
2	$\text{CH}_4 + \text{O}_2 \leftrightarrow \text{CH}_3 + \text{HO}_2$	16	$\text{CO} + \text{OH} \leftrightarrow \text{H} + \text{CO}_2$	30	$\text{H} + \text{O}_2 \leftrightarrow \text{OH} + \text{O}$
3	$\text{CH}_4 + \text{H} \leftrightarrow \text{CH}_3 + \text{H}_2$	17	$\text{CO} + \text{O}_2 \leftrightarrow \text{O} + \text{CO}_2$	31	$\text{O} + \text{H}_2 \leftrightarrow \text{OH} + \text{H}$
4	$\text{CH}_4 + \text{O} \leftrightarrow \text{CH}_3 + \text{OH}$	18	$\text{CH}_3 + \text{O}_2 \leftrightarrow \text{CH}_3\text{O} + \text{O}$	32	$\text{H} + \text{O}_2 + \text{M} \leftrightarrow \text{HO}_2 + \text{M}^a$
5	$\text{CH}_4 + \text{OH} \leftrightarrow \text{CH}_3 + \text{H}_2\text{O}$	19	$\text{CH}_3\text{O} + \text{M} \leftrightarrow \text{CH}_2\text{O} + \text{H} + \text{M}$	33	$\text{H} + \text{O}_2 + \text{O}_2 \leftrightarrow \text{HO}_2 + \text{O}_2$
6	$\text{CH}_2\text{O} + \text{OH} \leftrightarrow \text{HCO} + \text{H}_2\text{O}$	20	$\text{CH}_3\text{O} + \text{H} \leftrightarrow \text{CH}_2\text{O} + \text{H}_2$	34	$\text{H} + \text{O}_2 + \text{N}_2 \leftrightarrow \text{HO}_2 + \text{N}_2$
7	$\text{CH}_2\text{O} + \text{H} \leftrightarrow \text{HCO} + \text{H}_2$	21	$\text{CH}_3\text{O} + \text{OH} \leftrightarrow \text{CH}_2\text{O} + \text{H}_2\text{O}$	35	$\text{OH} + \text{HO}_2 \leftrightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{O}_2$
8	$\text{CH}_2\text{O} + \text{M} \leftrightarrow \text{HCO} + \text{H} + \text{M}$	22	$\text{CH}_3\text{O} + \text{O} \leftrightarrow \text{CH}_2\text{O} + \text{OH}$	36	$\text{H} + \text{HO}_2 \leftrightarrow 2\text{OH}$
9	$\text{CH}_2\text{O} + \text{O} \leftrightarrow \text{HCO} + \text{OH}$	23	$\text{CH}_3\text{O} + \text{O}_2 \leftrightarrow \text{CH}_2\text{O} + \text{HO}_2$	37	$\text{O} + \text{HO}_2 \leftrightarrow \text{OH} + \text{O}_2$
10	$\text{HCO} + \text{OH} \leftrightarrow \text{CO} + \text{H}_2\text{O}$	24	$\text{CH}_3 + \text{O}_2 \leftrightarrow \text{CH}_2\text{O} + \text{OH}$	38	$2\text{OH} \leftrightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{O}$
11	$\text{HCO} + \text{M} \leftrightarrow \text{H} + \text{CO} + \text{M}$	25	$\text{CH}_3 + \text{O} \leftrightarrow \text{CH}_2\text{O} + \text{H}$	39	$\text{H}_2 + \text{M} \leftrightarrow \text{H} + \text{H} + \text{M}^b$
12	$\text{HCO} + \text{H} \leftrightarrow \text{H}_2 + \text{CO}$	26	$\text{CH}_3 + \text{OH} \leftrightarrow \text{CH}_2\text{O} + \text{H}_2$	40	$\text{O}_2 + \text{M} \leftrightarrow \text{O} + \text{O} + \text{M}$
13	$\text{HCO} + \text{O} \leftrightarrow \text{OH} + \text{CO}$	27	$\text{HO}_2 + \text{CO} \leftrightarrow \text{CO}_2 + \text{OH}$	41	$\text{H} + \text{OH} + \text{M} \leftrightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{M}^c$
14	$\text{HCO} + \text{O}_2 \leftrightarrow \text{HO}_2 + \text{CO}$	28	$\text{H}_2 + \text{O}_2 \leftrightarrow 2\text{OH}$	42	$\text{H} + \text{HO}_2 \leftrightarrow \text{H}_2 + \text{O}_2$

### 3 Metodologia de solução numérica

O código computacional na linguagem MATLAB utilizado neste trabalho foi desenvolvido em Cunha [4]. As equações diferenciais de conservação da massa, quantidade de movimento e energia (geometria axissimétrica 2D) foram discretizadas utilizando o método volumes de controle baseado em elementos. As simulações foram executadas em um computador com as seguintes especificações: Processador Intel® Core™ i7-4510U, 8GB DDR3, 1 TB HD e Windows 10 64-bit OS.

O estudo experimental de chama laminar feito por Mitchell et al. [5] foi a referência para o presente trabalho. A chama laminar foi confinada em uma câmara cilíndrica axissimétrica vertical, com dois tubos concêntricos de raios  $R_i$  e  $R_o$ , nos quais passam combustível e ar, respectivamente, como mostrado na Fig. 1. O raio interno  $R_i$  tem 0.635 cm e o raio externo  $R_o$  tem 2.54 cm. O combustor tem 30 cm de comprimento. Uma das malhas utilizadas é exibida na Fig. 2. As condições de contorno e condições iniciais utilizadas na simulação estão na Tabela 3 e na Fig. 1.



#### Entrada de combustível

Velocidade axial na entrada:  $u_F=4.5\text{cm/s}$

Velocidade radial na entrada:  $v_F=0\text{cm/s}$

Temperatura:  $T_F=298\text{K}$

Fração de massa:  $Y_{\text{CH}_4}=1$

Razão de mistura:  $f=1$ .

#### Entrada de ar:

Velocidade axial de entrada:  $u_A=9.88\text{cm/s}$

Velocidade radial de entrada:  $v_A=0\text{cm/s}$

Temperatura:  $T_A=298\text{K}$

Fração de massa:  $Y_{\text{O}_2}=0.233$  e  $Y_{\text{N}_2}=0.767$

Razão de mistura:  $f=0$

#### Condições de operação:

Pressão na saída do queimador:  $p=101325\text{Pa}$

Temperatura de referência:  $T_{\text{ref}}=T_{\text{wall}}=298\text{K}$

Figura 1. Queimador cilíndrico vertical

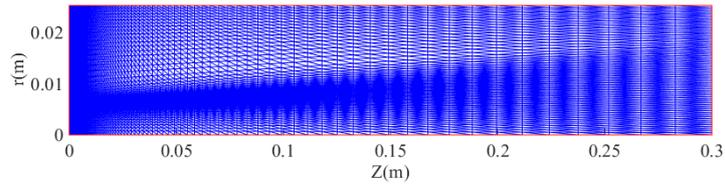


Figura 2. Malha de elementos finitos.

Tabela 3. Condições de contorno, CC, e condições iniciais, CI

			Vel. Axial	Vel. Radial	Fração mássica	Temperatura
CI	$t = 0$	$\forall z \forall r$	$u = 0$	$v = 0$	$Y_{O_2}=0,233$ e $Y_{N_2}=0,767$	$T=T_{ref}$
CC1	Eixo	$\forall z \forall r$	$\partial u / \partial r = 0$	$v = 0$	$\partial Y_k / \partial r = 0$	$\partial T / \partial r = 0$
CC2	Parede	$\forall z \forall r$	$u = 0$	$v = 0$	$Y_k = Y_{wall}$	$T = T_{ref}$
CC3	Entrada	$\forall z \forall r$	$u = u_e$	$v = 0$	$Y_k = Y_{in}$	$T = T_{ref}$
CC4	Saída	$\forall z \forall r$	$\partial u / \partial Z = 0$	$\partial v / \partial Z = 0$	$\partial Y_k / \partial Z = 0$	$\partial T / \partial Z = 0$

#### 4 Resultados e discussão

Os resultados obtidos através de simulação serão apresentados e comparados aos dados experimentais de Mitchell et al. [5]. O tempo de CPU gasto para simulação do mecanismo de reação esquelética e global foi de 25859s e 4130s, respectivamente. A diferença dos tempos para finalizar as simulações ocorre devido ao incremento de espécies e equações químicas presentes em cada mecanismo de reação.

Os perfis radiais das frações molares para  $z=1.2$  cm de  $CH_4$ ,  $O_2$ ,  $CO_2$ ,  $H_2O$  são mostrados neste trabalho, Fig. 3, juntamente com os dados experimentais de Mitchell et al. [5]. Os perfis radiais de temperatura ( $z=1.2$  e  $5.0$  cm), Fig. 4, também são apresentados e comparados com os dados experimentais.

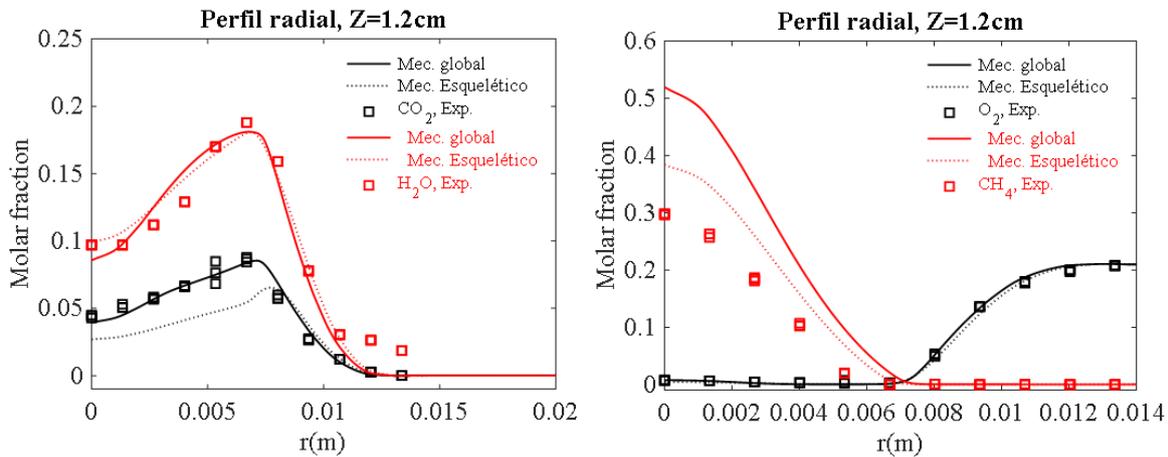


Figura 3. Comparação de perfis em  $z=1,2$  cm. (a) Fração molar  $H_2O$  e  $CO_2$  (b) Fração molar  $CH_4$  e  $O_2$ .

Os resultados apresentados nas Fig. 3 e Fig. 4 mostram que o modelo utilizado no presente trabalho captura a tendência dos resultados experimentais. A partir da Fig. 3, pode-se encontrar o limite da chama, que ocorre quando as frações molares de  $CH_4$  e  $O_2$  se igualam a zero. A concentração máxima de  $H_2O$  e  $CO_2$  ocorre quando o perfil de temperatura radial também é máximo, o que está de acordo com os dados experimentais de Mitchell, Sarofim e Clomburg [2]. Conforme Fig. 4, os perfis de temperatura apresentam comportamento bastante similar ao das curvas experimentais.

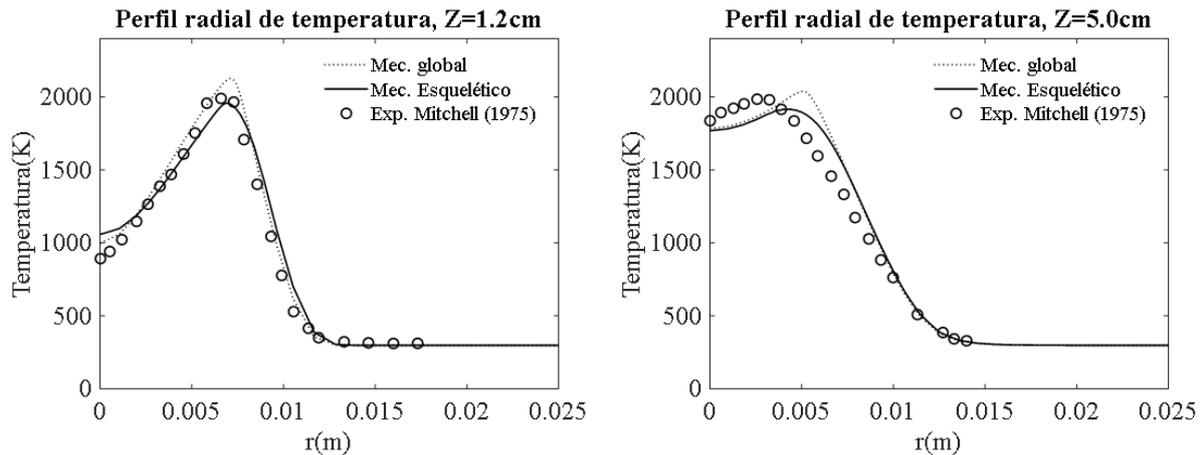


Figura 4. Perfil radial de temperatura. (a)  $z=1,2$  cm (b)  $z=5,0$  cm.

## 5 Conclusão

A modelagem e resultados de simulação da combustão laminar sem pré-mistura foram apresentadas neste trabalho. Os resultados obtidos foram condizentes com os dados experimentais, encontrando poucas divergências. Tais divergências podem ser contornadas utilizando uma modelagem mais detalhada e uma malha mais refinada. O tempo necessário para simulação com o mecanismo esquelético foi 6,26 vezes maior que o mecanismo global, portanto, conclui-se que, para uma análise preliminar, a utilização de um mecanismo simples, como o mecanismo global utilizado no presente trabalho, é uma ótima simplificação para aplicações dentro da engenharia.

## References

- [1] M. D. Smooke. R. E. Mitchell e D. E. Keyes. Numerical solution of two-dimensional axisymmetric laminar diffusion flames. *Combust. Sci. And Tech*, vol. 67, pp. 85–122, 1989.
- [2] R. E. Mitchell. A. F. Sarofim and L. A. Clomburg. Experimental and numerical investigation of confined laminar diffusion flames. *Combust. Flame*, vol. 37, pp. 227-244, 1980.
- [3] C. K. Westbrook. F. L. Dryer. Simplified Reaction Mechanisms for the oxidation of hydrocarbon fuels in Flames. *Combust. Sci. And Tech*, vol. 27, pp. 31–43, 1981.
- [4] F. A. Cunha. Modelo matemático para estudo de processos reativos de partículas de carvão e biomassa. Faculdade de Tecnologia, Departamento de Engenharia Mecânica, UnB, Mecânica dos fluidos, Brasília, Brasil, 2010.
- [5] R. E. Mitchell. Nitrogen Oxide Formation in Laminar Methane-Air Diffusion Flames, Massachusetts Institute of Technology, 1975.