

# GERAÇÃO DE MALHAS HÍBRIDAS PARA PROBLEMAS DE VAPORIZAÇÃO E COMBUSTÃO DE UMA COLUNA DE GOTAS

**Aldélio Bueno Caldeira**

Instituto Militar de Engenharia, Departamento de Engenharia Mecânica e de Materiais  
22290-270 - Rio de Janeiro - RJ - Brasil

**Albino José Kalab Leiroz**

**Helcio Rangel Barreto Orlande**

Universidade Federal do Rio de Janeiro, Departamento de Engenharia Mecânica – POLI/COPPE  
21945-970 - Rio de Janeiro - RJ - Brasil

**Resumo.** O presente trabalho se dedica ao desenvolvimento de uma malha híbrida analítico-numérica, visando o estudo numérico dos processos de vaporização e combustão de uma coluna infinita de gotas. A malha estruturada desenvolvida no sistema de coordenadas generalizadas possui duas regiões geradas a partir de transformações algébricas e uma gerada numericamente. As regiões da malha geradas analiticamente exploram características esféricas, nas proximidades de uma gota, e cilíndricas, nas regiões distantes da coluna de gotas, dos fenômenos físicos analisados. Em uma região intermediária, não é possível identificar, a princípio, qual destas características predomina. A malha na região intermediária é gerada numericamente, compatibilizando as regiões geradas analiticamente. Na região intermediária, o comportamento da malha se assemelha ao comportamento das linhas de corrente encontradas em problemas de combustão de uma coluna infinita de gotas. Apresenta-se como resultados a solução de um problema de combustão de uma coluna de gotas.

**Palavras-chave:** geração de malha, combustão, gota.

## 1. INTRODUÇÃO

O desenvolvimento de uma malha híbrida analítico-numérica, visando o estudo numérico dos processos de vaporização e combustão de uma coluna infinita de gotas, é apresentado neste trabalho. Os estudos numéricos dos referidos problemas de combustão são motivados pela necessidade de melhorar a eficiência de motores Diesel, turbinas à gás e foguetes, bem como, reduzir a emissão de poluentes. Ademais, as dificuldades experimentais associadas aos problemas de combustão de colunas de gotas, especialmente em condições termodinâmicas supercríticas (Aggarwal et al, 2002), tornam relevantes os estudos numéricos de tais problemas.

A interação entre gotas submetidas a processos de vaporização e combustão pode promover a deformação das chamas e das gotas, dependendo do espaçamento entre gotas, das propriedades termofísicas dos fluidos e das condições ambientais do sistema. Além disso, os efeitos interativos entre gotas, quando relevantes, aumentam o tempo de vida das gotas e o tempo de combustão.

Estudos numéricos da combustão de colunas de gotas foram realizados por Leiroz (1996) em condições termodinâmicas subcríticas e por Caldeira (2004) em condições termodinâmicas supercríticas, revelando o coalescência das chamas, inicialmente presentes em torno de cada gota, ao redor da coluna de gotas. É importante notar que em condições supercríticas as gotas são definidas por critérios arbitrários de massa específica, temperatura ou concentração de espécie (Bellan, 2000 e Daou et al, 1998).

## 2. MODELO FÍSICO-MATEMÁTICO

O modelo físico considera uma coluna infinita de gotas em condições supercríticas. Neste modelo as propriedades termofísicas são constantes a menos da massa específica e o sistema é

considerado isobárico. A reação de combustão é uma reação química simples (Kuo, 1986). Inicialmente, as gotas de combustível são esféricas, com mesmo diâmetro, e estão igualmente espaçadas, a temperatura da gota é menor que a do ambiente oxidante.

O modelo matemático é representado pelas equações de conservação de massa, de quantidade de movimento e do potencial de Shvab-Zel'dovich (Kuo, 1986 e Daou et al, 1998) e pela equação de estado do gás ideal. Estas equações, na forma adimensional, são apresentadas nas Eq.(1) a Eq.(9), sendo escritas no sistema de coordenadas esféricas ( $R, \theta$ ), cuja origem é o centro da gota conforme mostrado na Figura 1. Nas equações de conservação de quantidade de movimento  $p$  é a pressão modificada (Daou et al, 1998) onde são agrupados os termos de pressão termodinâmica e expansão volumétrica, nestas equações,  $Re$  é o número de Reynolds. Na equação de conservação do potencial de Shvab-Zel'dovich,  $Pe$  é o número de Peclet. Na equação de estado  $f_{st}$  é o potencial de Shvab-Zel'dovich estequiométrico, e é a razão inicial entre as temperaturas da gota e do ambiente circundante e  $q$  é o calor liberado pela reação de combustão. As variáveis dependentes do sistema de equações são: massa específica ( $\rho$ ), velocidade radial ( $u$ ), velocidade azimutal ( $v$ ) e o potencial de Shvab-Zel'dovich ( $f$ ).

$$\frac{\partial(R^2 \sin \theta \rho)}{\partial t} + \frac{\partial(R^2 \sin \theta \rho u)}{\partial R} + \frac{\partial(R \sin \theta \rho v)}{\partial \theta} = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial(R^2 \sin \theta \rho u)}{\partial t} + \frac{\partial(R^2 \sin \theta \rho u u)}{\partial R} + \frac{\partial(R \sin \theta \rho v u)}{\partial \theta} - \rho v^2 R \sin \theta = \quad (2)$$

$$-R^2 \sin \theta \frac{\partial p}{\partial R} + \frac{\partial}{\partial R}(R^2 \sin \theta \tau_{RR}) + \frac{\partial}{\partial \theta}(R \sin \theta \tau_{R\theta}) - R \sin \theta (\tau_{\theta\theta} + \tau_{\phi\phi}) \quad (3)$$

$$\frac{\partial(R^2 \sin \theta \rho v)}{\partial t} + \frac{\partial(R^2 \sin \theta \rho u v)}{\partial R} + \frac{\partial(R \sin \theta \rho v v)}{\partial \theta} + \rho u v R \sin \theta = \quad (4)$$

$$-R \sin \theta \frac{\partial p}{\partial \theta} + \frac{\partial}{\partial R}(R^2 \sin \theta \tau_{R\theta}) + \frac{\partial}{\partial \theta}(R \sin \theta \tau_{\theta\theta}) + R \sin \theta (\tau_{R\theta} - \cot \theta \tau_{\phi\phi}) \quad (5)$$

$$\tau_{RR} = \frac{2}{Re} \frac{\partial u}{\partial R} \quad (6)$$

$$\tau_{\theta\theta} = \frac{2}{R Re} \left( \frac{\partial v}{\partial \theta} + u \right) \quad (7)$$

$$\tau_{\phi\phi} = \frac{2}{R Re} (u + v \cot \theta) \quad (8)$$

$$\tau_{R\theta} = \frac{1}{Re} \left( \frac{\partial v}{\partial R} - \frac{v}{R} + \frac{1}{R} \frac{\partial u}{\partial \theta} \right) \quad (9)$$

$$\frac{\partial(R^2 \sin \theta \rho f)}{\partial t} + \frac{\partial(R^2 \sin \theta \rho u f)}{\partial R} + \frac{\partial(R \sin \theta \rho v f)}{\partial \theta} = \quad (10)$$

$$\frac{\partial}{\partial R} \left( \frac{R^2 \sin \theta}{Pe} \frac{\partial f}{\partial R} \right) + \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \frac{\sin \theta}{Pe} \frac{\partial f}{\partial \theta} \right) \quad (11)$$

$$\rho = [1 - (1 - e) f + q f]^{-1}, \text{ onde } f \leq f_{st}$$

$$\rho = \left[ 1 - (1 - e) f + q f_{st} \frac{(1 - f)}{(1 - f_{st})} \right]^{-1}, \text{ onde } f \geq f_{st} \quad (12)$$

A adimensionalização empregada segue o exposto na Eq. (10), onde o subscrito “+” refere-se às grandezas dimensionais e o subscrito “∞” está relacionado às grandezas avaliadas em uma região muito afastada da coluna de gotas. Na Eq. (10)  $u_c^+$  é a velocidade característica do problema,  $r$  e  $z$

são as coordenadas cilíndricas conforme mostrado na Figura 1,  $\mu$  é a viscosidade do fluido e  $R_0^+$  é o raio inicial das gotas.

$$\begin{aligned}
 u_c^+ &= \frac{\mu_\infty^+}{\rho_\infty^+ R_0^+} & r &= \frac{r^+}{R_0^+} & z &= \frac{z^+}{R_0^+} & R &= \frac{R^+}{R_0^+} \\
 t &= \frac{u_c^+ t^+}{R_0^+} & u &= \frac{u^+}{u_c^+} & v &= \frac{v^+}{u_c^+} & \rho &= \frac{\rho^+}{\rho_\infty^+} \\
 Re &= \frac{\rho_\infty^+ u_c^+ R_0^+}{\mu_\infty^+} & Pe &= \frac{\rho_\infty^+ c_{p,\infty}^+ u_c^+ R_0^+}{k_\infty^+} & P &= \frac{P^+}{\rho_\infty^+ u_c^+ u_c^+}
 \end{aligned} \tag{10}$$

As simetrias existentes na coluna infinita de gotas conduzem a simplificações no domínio a ser estudado como mostrado na Figura 1. Nesta figura,  $b^+$  corresponde a metade da distância entre gotas e  $c^+$  é a posição de truncamento do domínio.

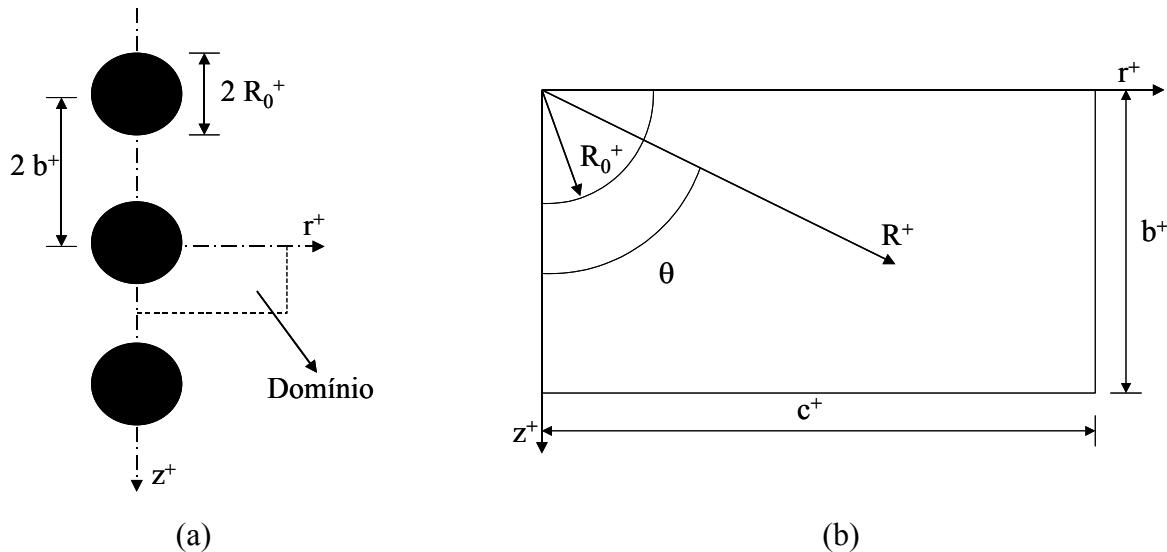


Figura 1. Modelo esquemático do problema físico: (a) geometria e (b) domínio.

A condição inicial do problema é dada pela condição de estagnação do fluido e por:

$$\begin{aligned}
 f &= 1, \text{ onde } R \leq 1 \\
 f &= 0, \text{ onde } R > 1
 \end{aligned} \tag{11}$$

As condições de contorno são de fluxo nulo, para todas as variáveis dependentes, na direção normal aos contornos do domínio, conforme mostrado na Figura 1b.

### 3. SOLUÇÃO NUMÉRICA

O sistema de equações apresentado é escrito no sistema de coordenadas generalizadas  $(\xi, \eta)$  seguindo o descrito por Thompson et al (1985). O método dos volumes finitos é empregado utilizando variáveis colocalizadas (Maliska, 1995) e o acoplamento pressão modificada-velocidade é resolvido utilizando o SIMPLEC (Van Dormal et al, 1984). As equações foram discretizadas utilizando o esquema WUDS (Raithby et al, 1974) na forma totalmente implícita. Os sistemas de equações algébricas foram resolvidos empregando-se o algoritmo GMRES (Press et al, 1992).

A Figura 2 apresenta o comportamento qualitativo e as regiões da malha empregada na solução numérica. Primeiramente, a região 2 é gerada numericamente segundo o descrito por Thompson et al. (1985), resolvendo-se numericamente um sistema de equações diferenciais parciais com condições de contorno de fluxo nulo nos contornos da região 2, em seguida a região 3 e a região 1 são geradas analiticamente. As equações de geração numérica de malha na região 2 são escritas nas Eq.(12) a Eq. (19) e as condições de contorno são escritas na Eq.(20).

$$\alpha_m \frac{\partial^2 z}{\partial \xi^2} - 2 \beta_m \frac{\partial^2 z}{\partial \xi \partial \eta} + \gamma_m \frac{\partial^2 z}{\partial \eta^2} + J_m^2 \left( P \frac{\partial z}{\partial \xi} + Q \frac{\partial z}{\partial \eta} \right) = 0 \quad (12)$$

$$\alpha_m \frac{\partial^2 r}{\partial \xi^2} - 2 \beta_m \frac{\partial^2 r}{\partial \xi \partial \eta} + \gamma_m \frac{\partial^2 r}{\partial \eta^2} + J_m^2 \left( P \frac{\partial r}{\partial \xi} + Q \frac{\partial r}{\partial \eta} \right) = 0 \quad (13)$$

onde

$$\alpha_m \equiv \left( \frac{\partial z}{\partial \eta} \right)^2 + \left( \frac{\partial r}{\partial \eta} \right)^2 \quad (14)$$

$$\gamma_m \equiv \left( \frac{\partial z}{\partial \xi} \right)^2 + \left( \frac{\partial r}{\partial \xi} \right)^2 \quad (15)$$

$$\beta_m \equiv \frac{\partial z}{\partial \xi} \frac{\partial z}{\partial \eta} + \frac{\partial r}{\partial \xi} \frac{\partial r}{\partial \eta} \quad (16)$$

$$J_m \equiv \frac{\partial z}{\partial \xi} \frac{\partial r}{\partial \eta} + \frac{\partial r}{\partial \xi} \frac{\partial z}{\partial \eta} \quad (17)$$

$$P(\xi, \eta) \equiv - \sum_{k=1}^n a_k \text{Sign}(\xi - \xi_k) \text{Exp}(-c_k |\xi - \xi_k|) \\ - \sum_{k=1}^m b_k \text{Sign}(\xi - \xi_k) \text{Exp}\left(-d_k \sqrt{(\xi - \xi_k)^2 + (\eta - \eta_k)^2}\right) \quad (18)$$

$$Q(\xi, \eta) \equiv - \sum_{k=1}^{n'} A_k \text{Sign}(\eta - \eta_k) \text{Exp}(-C_k |\eta - \eta_k|) \\ - \sum_{k=1}^{m'} B_k \text{Sign}(\eta - \eta_k) \text{Exp}\left(-D_k \sqrt{(\xi - \xi_k)^2 + (\eta - \eta_k)^2}\right) \quad (19)$$

$$\frac{\partial r}{\partial \xi} \frac{\partial z}{\partial \eta} + \frac{\partial r}{\partial \eta} \frac{\partial z}{\partial \xi} = 0 \quad (20)$$

O sistema de equações acima é numericamente resolvido utilizando-se o método das diferenças finitas, sendo o sistema algébrico resultante solucionado empregando-se o algoritmo de Gauss-Seidel com SOR.

A geração analítica da malha da região 3 é efetuada conhecendo-se os pontos da interface entre as regiões 2 e 3. A partir destes pontos são traçadas retas da direção cilíndrica radial, ligando os referidos pontos a fronteira de truncamento do domínio, sobre esta reta são distribuídos os pontos da malha nesta região. A distribuição dos pontos sobre na direção radial cilíndrica é dada por:

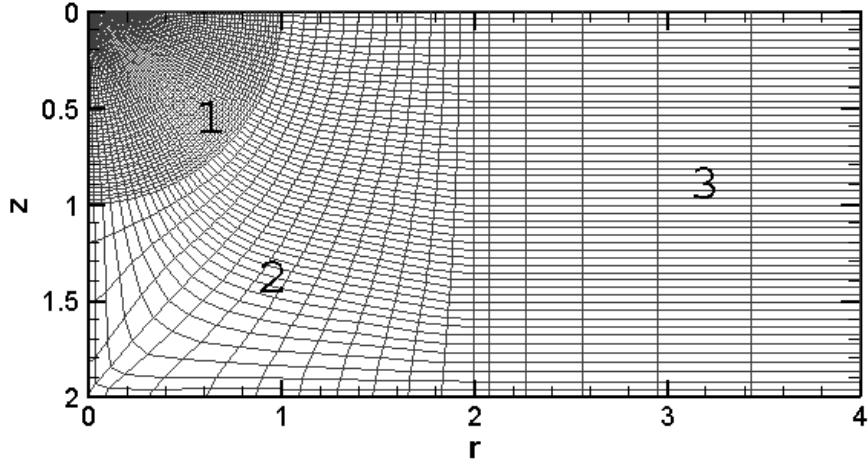


Figura 2. Representação da malha no plano físico.

$$\kappa = \frac{\ln\left(\frac{c-a}{r_{(\xi_c, M)} - r_{(\xi_c-1, M)}}\right)}{\ln(N - \xi_c)} \quad (21)$$

$$z_{(\xi, \eta)} = z_{(\xi_c, \eta)} \quad (22)$$

$$r_{(\xi, \eta)} = (c-a)\left(\frac{\xi - \xi_c}{N - \xi_c}\right)^{\kappa} + r_{(\xi_c, \eta)} \quad (23)$$

onde  $a$  é o valor de  $r$  na fronteira entre as regiões 2 e 3,  $N$  é o número de pontos na direção  $\xi$  e  $\xi_c$  é o valor de  $\xi$  na fronteira entre as regiões 2 e 3. A malha na região 3 possui características cilíndricas.

Na região 1, a malha é gerada a partir dos pontos da fronteira entre as regiões 1 e 2, traçando retas destes pontos até a origem do sistema de coordenadas esféricas. Estas retas são retas radiais esféricas sobre a quais são arbitrados os pontos da malha. Na região 1 a malha possui características esféricas. Os pontos são distribuídos na região 1 segundo as seguintes equações:

$$R(\xi) = R_0 \left( \frac{\xi - 1}{\xi_{(R_0)} - 1} \right)^{y_1}, \text{ em } 0 \geq R \geq R_0 \quad (24)$$

$$\theta(\xi, \eta) = \theta(\xi_{(R_0)}, \eta) \quad (25)$$

onde  $y_1$  é uma constante arbitrária.

Conhecidos os pontos da malha na região 3 em  $r$  e  $z$  e na região 1 em  $R$  e  $\theta$ , estes pontos são transformados para o sistema de coordenadas generalizadas. Desta forma, todas as regiões da malha são escritas no sistema de coordenadas generalizadas.

A malha empregada utiliza a metodologia apresentada por Moreira Filho et al (2002) onde os pontos gerados mapeam os volumes finitos e suas faces. Este procedimento visa melhorar o cálculo das métricas da transformação do sistema de coordenadas esférica para o de coordenadas generalizadas.

A Figura 3 apresenta as regiões da malha no plano físico e no plano computacional. Esta figura demonstra a simplificação do domínio ao se empregar o sistema de coordenadas generalizadas.

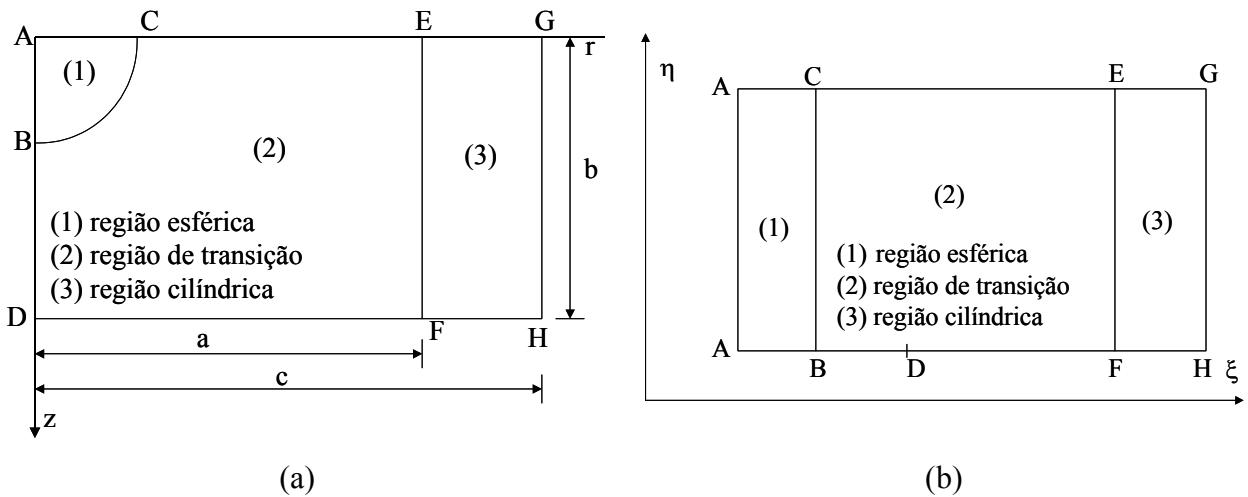


Figura 3. Regiões da malha no plano físico (a) e no plano computacional (b).

#### 4. RESULTADOS

Os resultados apresentados a seguir consideram os seguintes parâmetros do modelo:  $e = 0,1$ ,  $b = 2$ ,  $Pe = 1$ ,  $q = 2$  e  $f_{st} = 0,8$ . A análise de convergência da solução numérica foi realizada confrontando-se os casos descritos na Tabela 1.

Tabela 1. Casos avaliados na análise de convergência da solução.

CASO	NÚMERO DE VOLUMES	INTERVALO DE TEMPO	$c$
1	8050 (115x70)	0.002	15
2	16300 (163x100)	0.001	15
3	10500 (150x70)	0.002	20

A partir dos casos relacionados na Tabela 1 verificou-se que as soluções para o potencial de Shvab-Zel'dovich possuem uma discrepância absoluta máxima inferior a 0,6%, enquanto as soluções para a velocidade  $u$  possuem uma discrepância relativa inferior a 4%. Estes resultados são considerados satisfatórios sendo os campo de velocidade  $u$  e do potencial  $f$  apresentados nas Figuras 4 e 5. Nestas Figuras o tempo  $t = 0,1$  corresponde a um tempo no inicio do processo de combustão e o tempo  $t = 0,7$  corresponde a um tempo no final do processo de combustão.

As isosuperfícies de velocidade  $u$  e de potencial  $f$  mostradas nas Figuras 4 e 5 apresentam-se deformadas devido ao processo interativo entre gotas. A deformação destas superfícies aumenta ao longo do tempo. Entretanto, os gradientes de velocidade e do potencial  $f$  são atenuados ao longo do tempo.

O comportamento da isosuperfície referente ao potencial de Shvab-Zel'dovich estequiométrico ( $f_{st} = 0,8$ ) indica que a chama, inicialmente esférica, assume uma geometria elipsoidal.

#### 5. CONCLUSÕES

O procedimento de geração de malha proposto, aliado ao sistema de coordenadas generalizadas, favorece a abordagem do problema matemático estudado em um único bloco. Os resultados apresentados são qualitativamente concordantes com a física do problema. A solução numérica foi considerada convergida, sendo avaliados o número de volumes da malha, a posição de truncamento do domínio e o intervalo de tempo.

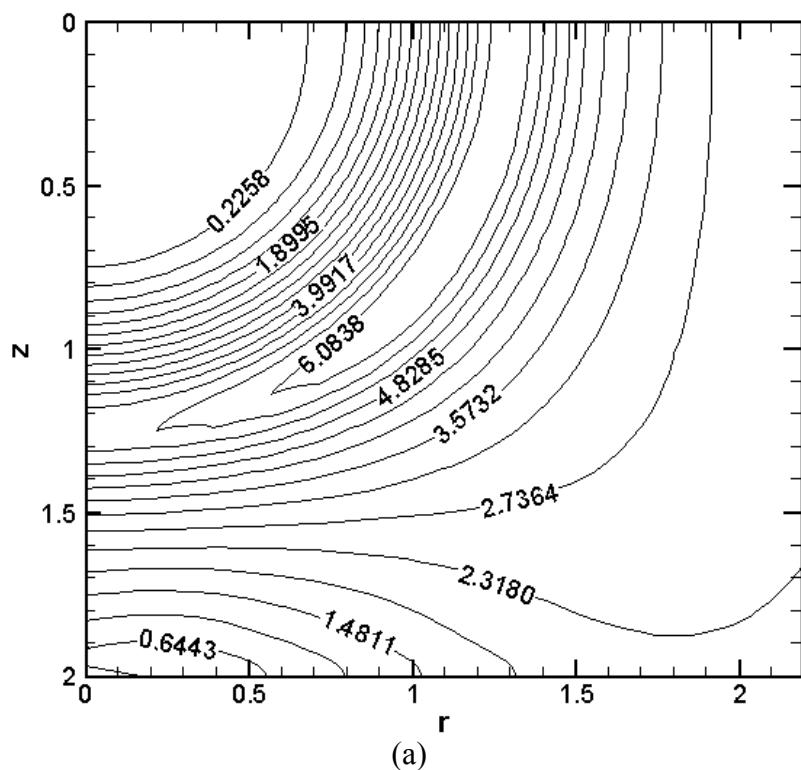


Figura 4. Campo de velocidades radial nos tempos  $t = 0,1$  (a) e  $t = 0,7$  (b).

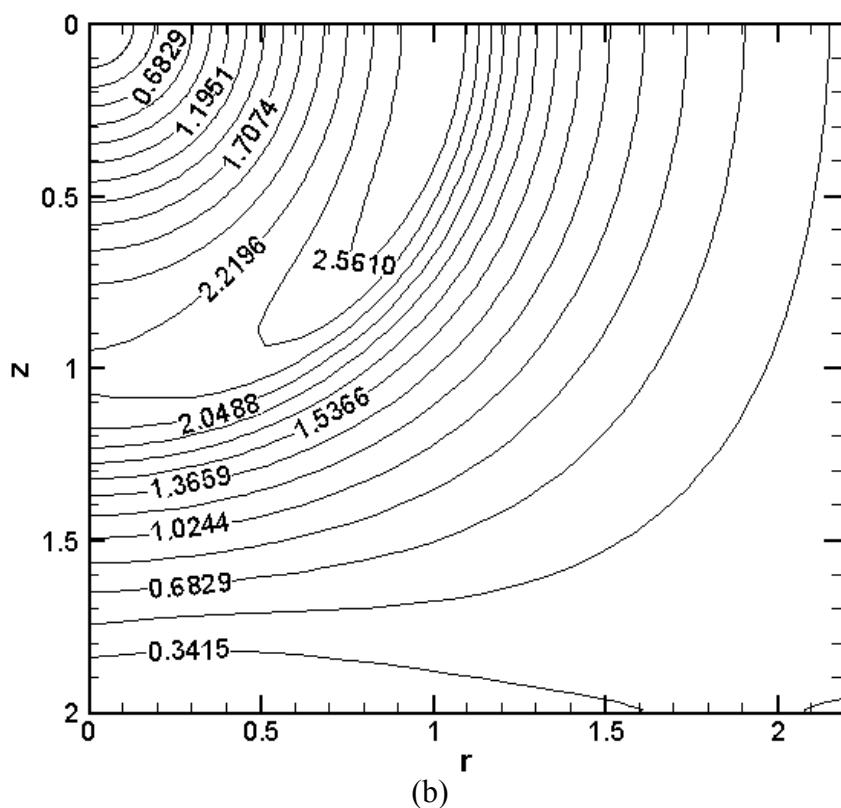


Figura 4. (cont.) Campo de velocidades radial nos tempos  $t = 0,1$  (a) e  $t = 0,7$  (b).

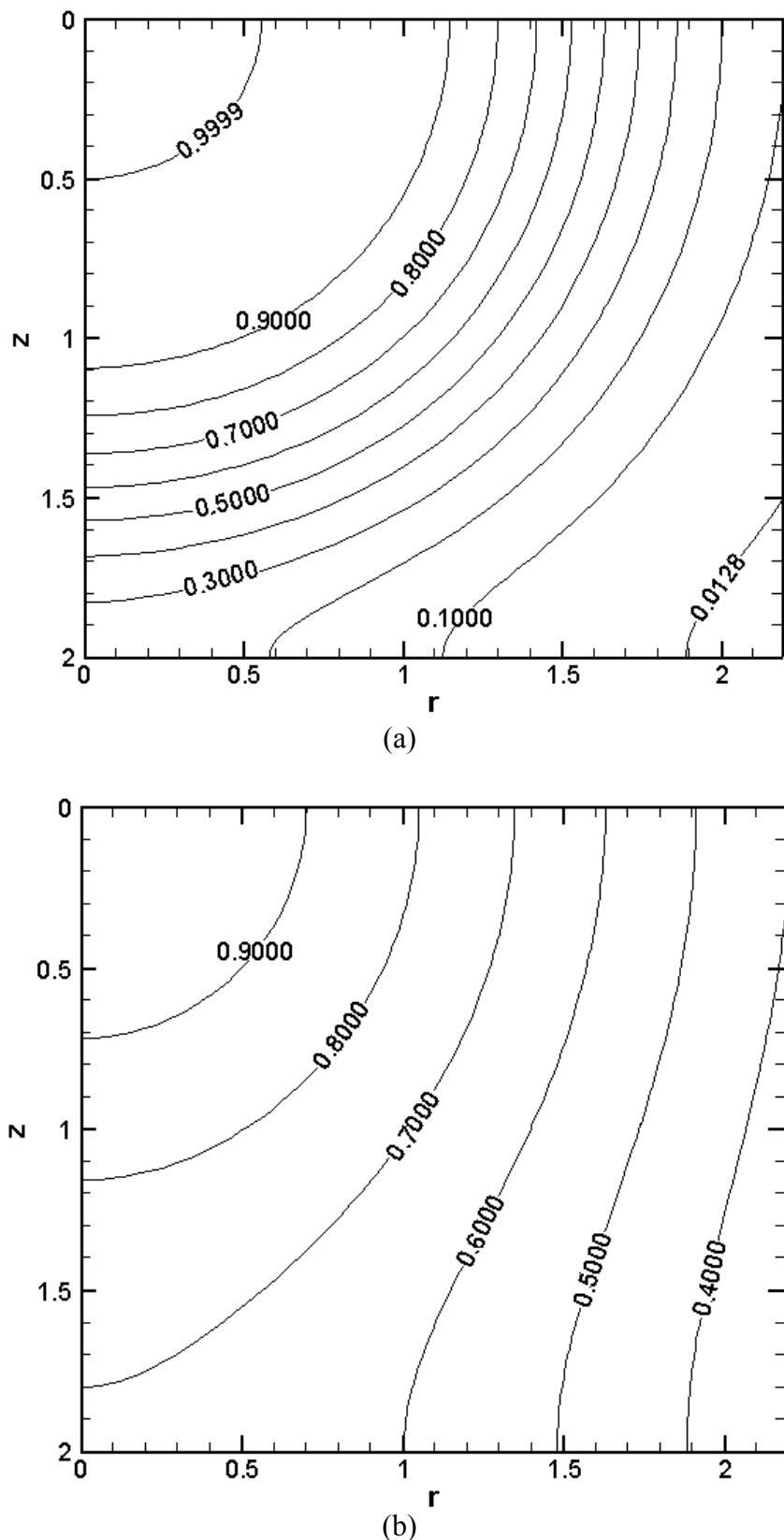


Figura 5. Campo do potencial  $f$  nos tempos  $t = 0,1$  (a) e  $t = 0,7$  (b).

## 6. REFERENCIAS

Aggarwal, S. K., Yan, C., 2002, "Transcritical Vaporization of Liquid Fuel Droplet in a Supercritical Ambient", Combustion Science and Technology, v. 174, pp. 103-130.

Bellan, J., 2000, "Supercritical (and Subcritical) Fluid Behavior and Modelling: Drops, Steams, Shear and Mixing Layers, Jets and Sprays", Progress in energy and Combustion Science, v. 26, pp. 329-366.

Caldeira, A. B., 2004, "Combustão de uma Coluna de Gotas em Condições Supercríticas", D.Sc. dissertação, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, Brasil.

Daou, J., Rogg, B., 1998, "Convective Burning of Gasous Fuel Pockets and Supercritical Droplets", Combustion and Flame, v. 115, pp. 145-157.

Leiroz, A. J. K., 1996, "Numerical Study of Droplet-Stream Vaporization and Combustion", Ph.D. dissertação, University of California at Irvine, Irvine, California, USA.

Maliska, C. R., 1995, "Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional", LTC, Brasil.

Moreira Filho, E. G., Mejias, M. M., Orlande, H. R. B., Leiroz, A. J. K., 2002, "Computational Aspects of Metrics Evaluation for the Finite Volume Method", Anais do IX Congresso Brasileiro de Engenharia e Ciências Térmicas, CD ROM, Caxambú, Brasil.

Press, W. H., Teukolsky, S. A., Vetterling, W. T., Flannery, B. P., 1992, "Numerical Recipes in Fortran – The Art of Scientific Computing", 2 ed, Cambridge.

Raithby, G. D. e Torrance, K. E., 1974, "Upstream-Weighted Differencing Schemes and Their Application to Elliptic Problems Involving Fluid Flow", Computers & Fluids, v. 2, pp. 191-206.

Thompson, J. F., Warsi, Z. U. A., Mastin, C. W., 1985, "Numerical Grid Generation – Foundations and Applications", Elsevier Science Publishing.

Van Dormaal, J. P., Raithby, G. D., 1984, "Enhancements of the Simple Method for Predicting Incompressible Fluid Flows", Numerical Heat Transfer B, v. 7, pp. 147-163.

## **HYBRID GRID GENERATION TO PROBLEMS OF VAPORIZATION AND COMBUSTION OF AN DROPLET-STREAM**

**Aldélio Bueno Caldeira**

Military Engineering Institute, Mechanical and Materials Engineering Department  
22290-270 - Rio de Janeiro - RJ – Brazil

**Albino José Kalab Leiroz**

**Helcio Rangel Barreto Orlande**

Federal University of Rio de Janeiro, Department of Mechanical Engineering – POLI/ COPPE  
21945-970 - Rio de Janeiro - RJ – Brazil

**Abstract.** *The present work describes the development of a hybrid grid for numerical studies of droplet-stream combustion and vaporization processes. The structured grid is developed using a generalized coordinate system. Initially, the solution domain is split into three subdomains. For two subdomains, grids are analytically generated using the spherical and cylindrical characteristics of the phenomena within the near and far fields of the droplet-stream. Numerical grid generation is applied in a transition region allowing the matching of the analytically generated grids. Results for droplet-stream combustion are discussed.*

**Keywords.** *grid generation, combustion, droplet.*