

Modelagem Numérica de Câmaras de Combustão LPP Utilizando-se o Código CFX 5.6

Ronne Toledo

Ronne_toledo@msn.com

Carlos Alberto Gurgel Veras

Gurgel@unb.br

Armando Caldeira Pires

armandocp@unb.br

Antônio César Pinho Brasil Jr.

Brasil@enm.unb.br

University of Brasília, Mechanical Engineering Department, Laboratory of Energy and Environment, Brasília-DF, 70910-900

Resumo. O completo domínio e conhecimento do processo de combustão, largamente presente na sociedade moderna, está ainda distante de ser obtido pela ciência. Não obstante, importantes avanços têm sido alcançados. O presente trabalho discute os processos de combustão em regime pobre e de pré-mistura típicos de câmaras LPP (Lean Premixed and Prevaporized) através de uma abordagem computacional, utilizando o programa comercial CFX 5.6. O escoamento foi modelado utilizando as equações de Navier-Stokes em conjunto com o modelo $k-\epsilon$ para descrever a turbulência. O processo de combustão da chama de pré-mistura foi descrito utilizando o modelo "Flamelet" acoplado a um modelo para o avanço da reação global. No fechamento do modelo de avanço da reação global utilizou-se a abordagem proposta por Zimont. Algumas simulações bidimensionais, em problema com simetria axial, foram realizadas e os resultados comparados com dados experimentais. Para este caso específico, uma análise das discrepâncias entre dados experimentais e numéricos permitiu, por tentativa e erro, o ajuste das constantes do modelo. Adicionalmente, a análise mostrou as dificuldades do modelo em prever o comportamento da combustão na região de recirculação a jusante do corpo rombudo, bem como a saída da câmara. Variando-se as condições de contorno de temperatura nas paredes e da parcela de radiação, foi possível melhorar as predições numéricas nesta classe de problema.

Palavras chave: "Flamelet", Combustão, Turbinas a gás, Simulação Numérica.

1. Introdução

Atualmente, a modelagem de processos de combustão em regime de pré-mistura tem destaque como tema de pesquisa. A dificuldade em se modelar tal fenômeno está relacionada, principalmente, à falta de entendimento da interação entre a turbulência do escoamento e as taxas de reações químicas da combustão. De fato, são dois os desafios: (i) modelar as tensões de Reynolds e (ii) determinar as taxas das reações químicas do processo de combustão - lembrando que estes processos têm forte acoplamento.

A forma geral dos modelos mais utilizados para descrever a turbulência e as reações químicas são os modelos do tipo transporte (difusão e convecção) destas propriedades físicas em questão ($k-\epsilon$, ω , etc), usando termos adicionais de fonte e sorvedouros. Esta abordagem tem mostrado bons resultados para aplicações de engenharia (Jones at al., 1982). Entretanto o desafio maior está na determinação das taxas médias das reações químicas, e de como a turbulência interfere nestas taxas. Um dos modelos mais usados na abordagem deste problema (EBC - Magnussen at al., 1976) está baseado na suposição de que as reações químicas são infinitamente rápidas, isto é, a escala de tempo da turbulência é muito maior do que a escala de tempo das reações químicas. Outros modelos são baseados na consideração do transporte de uma função de densidade de probabilidade (PDF) para descrever o progresso ou avanço da reação global (BML - Candel, 1994) ou a concentração das espécies químicas -Flamelet, Pope (1985).

As dificuldades na utilização de modelos do tipo EBC, em que a média das taxas de reação químicas são modeladas, recaem na determinação, com boa precisão, das espécies químicas intermediárias, das espécies químicas de menor concentração incluindo-se as poluentes. Adicionalmente, tem-se outro fator negativo associado ao alto custo computacional devido ao número de equações de transporte que devem ser resolvidas, uma para cada espécie.

No presente trabalho, optou-se por uma abordagem em que se utilizaram modelos do tipo PDF assumida para descrever a posição da chama acoplados aos modelos *Laminar Flamelet* (Pope, 1985) para descrever a evolução das espécies químicas. Estes modelos foram aplicados no estudo de uma chama no interior de um combustor para o qual estão disponíveis medições experimentais de temperatura e espécies químicas principais como CO, CO₂ e O₂. A combustão no interior da câmara ocorre em regime de pré mistura pobre ($\Phi = 0,6$) de propano e ar. Uma intensa comparação dos resultados obtidos com os cálculos numéricos foi feita com o intuito de validar o modelo utilizado e identificar a sensibilidade da solução a diferentes condições de contorno e constantes do modelo.

2. Formulação Matemática

O escoamento é descrito utilizando-se das equações de Navier Stokes com a média de Reynolds para representar o comportamento médio das propriedades de transporte. No fechamento das equações de Reynolds foi utilizado um modelo do tipo $k-\varepsilon$ para representar os efeitos da turbulência. A equação da energia também foi solucionada considerando os termos fontes das espécies químicas e radiação. Para descrever a radiação, uma aproximação diferencial considera uma equação de transporte para a radiação, assumindo como consequência que a intensidade radioativa é isotrópica (Raithby, 1991). A concentração das espécies químicas foi obtida através do modelo Laminar Flamelet, em conjunto com um modelo para a descrição do avanço da reação global, descritos a seguir.

2.2 O Modelo Flamelet

O modelo de combustão, denominado de *Flamelet* (Peter, 2000), descreve a interação da cinética química do processo de combustão dos gases com a turbulência do escoamento. Este, baseia-se na hipótese da velocidade da reação ser muito mais rápida que a velocidade de dissipação turbulenta das pequenas escalas, mensuradas pelo número de Damköhler, definido como sendo a razão entre o tempo característico do escoamento turbulento e o tempo da reação química da combustão. Neste caso, a combustão ocorre em uma fina camada denominada de *Flamelet*, ou num elemento de chama.

A principal vantagem deste modelo reside na sua capacidade de incluir o cálculo do transporte molecular bem como da produção de espécies intermediárias com custo numérico relativamente baixo. O modelo também permite que se utilize uma malha computacional com baixo nível de refinamento. Adicionalmente, pela sua simplicidade, podem-se contornar problemas não lineares com flutuações inerentes aos processos relacionados com cinética química, tornando-se um método bastante robusto.

O modelo consiste na solução das equações de transporte para dois escalares que descrevem as reações químicas, independente do número de espécies. Cálculos de chama laminares realizados previamente e armazenados em bibliotecas fornecem informações detalhadas sobre a cinética química de todas as espécies intermediárias, reduzindo desta forma o tempo computacional. A relação entre os resultados dos cálculos da chama laminar e a chama turbulenta é estabelecida através de uma função de densidade de probabilidade (PDF), como demonstrou Pope (1985).

A ligação dos cálculos prévios de chama laminar com o escoamento turbulento é feita utilizando-se o método estatístico. Para cada ponto da malha que descreve o escoamento turbulento, uma PDF poder ser calculada utilizando uma equação de transporte (Pope, 1985 e Nilsson et al., 2000). Nesta abordagem não se faz necessário modelar os termos fontes da cinética química, que são fortemente não lineares, tornando o método bastante atrativo. Outros modelos, contudo, são fundamentais para o fechamento do problema, como a flutuação da pressão e a difusão molecular. Quando o regime da combustão é caracterizado por elementos de chama, a difusão molecular está acoplada ao termo que descreve a reação química, permitindo a substituição do modelo das reações químicas pelo modelo da difusão molecular. Como hipóteses principais para esta abordagem tem-se, (i) química rápida; (ii) número de Lewis, definido pela razão entre difusão térmica e de massa, constante e igual à unidade para todas as espécies químicas; (iii) combustão em regime de *Flamelets* e (iv) alimentação do combustível e do oxidante deve ser feita de forma independente ou uma combinação linear entre os mesmos. Após o cálculo das variáveis que determinam as espécies químicas, e com a utilização da biblioteca de chama laminar, previamente calculada, é possível definir a concentração das espécies químicas em todo o domínio computacional. Por fim, a equação da energia permite calcular a temperatura dos gases.

2.3 Modelo Flamelet para Chamas de Difusão

Em uma chama de difusão, o combustível é alimentado em separado do oxidante. A combustão dos gases ocorre em uma fina camada onde combustível e oxidante se inter difundem, definindo uma zona de reação. Nesta região ocorrem as principais reações exotérmicas. Admite-se que o fenômeno de convecção e difusão dos elementos químicos tem a mesma ordem de magnitude, por outro lado, a velocidade das reações é de ordem muito superior. Nas últimas décadas, diferentes modelos procuraram descrever estes fenômenos. A maioria destes modelos pressupõe equilíbrio químico local para combustão com reações infinitamente rápida. Os resultados das previsões utilizando estes modelos de equilíbrio, entretanto, superestimam espécies intermediárias como por exemplo, CO e H₂. Estes resultados sugerem que os efeitos de não-equilíbrio são importantes e devem ser considerados numa modelação mais correta do fenômeno físico. Além disso, estes efeitos de não-equilíbrio são essenciais para prever fenômenos de extinção e descolamento da chama.

Linan (1961) apresenta um dos trabalhos pioneiros ao incorporar efeitos de não-equilíbrio em chamas de difusão. O autor analisou em detalhes a fina estrutura de uma folha de chama, denominada de *Flamelet*. Neste trabalho, ele utilizou o número de Damköhler como parâmetro de expansão, definido como sendo a razão entre o tempo do escoamento turbulento e o tempo da reação química.

Para modelar a combustão utilizando o modelo Flamelet é preciso definir o escalar fração de mistura (Z). De forma simplificada, a fração de mistura é a soma da fração mássica de todos os componentes elementares para todas as espécies químicas.

Assumindo que o coeficiente de difusividade e a capacidade térmica são iguais para todos os elementos químicos, pode-se obter uma equação de conservação da fração de mistura somando-se as equações de conservação para todas as espécies químicas. Nesta operação matemática, os termos fontes e sumidouros para as espécies se anulam, demonstrando que a fração de mistura não depende da reação química.

O processo de combustão em chamas de difusão ocorrem em uma fina camada (*Flamelet*) próximo da superfície onde a fração de mistura é estequiométrica ($Z = Z_{est}$) por consequência, para melhor descrever o fenômeno das *Flamelets* é conveniente representar as equações das propriedades do escoamento, como a temperatura, em um sistema de coordenada fixo na superfície onde a fração de mistura é estequiométrica. No código CFX 5, a equação da temperatura neste novo sistema de coordenadas torna-se unidimensional após manipulações algébricas, transformação de coordenadas, adoção de algumas hipóteses simplificadoras e, principalmente pela introdução de uma nova coordenada definida como estiramento da chama (*stretched coordinate*). Os efeitos de não equilíbrio, devido à influência do campo de escoamento ao redor do elemento de chama, são considerados por meio de uma taxa de estiramento. Para valores críticos desta taxa a chama se extingue, uma vez que a produção de calor não é suficiente para compensar as perdas por condução. Nesta situação a temperatura cai abaixo do limite de ignição de forma que as reações químicas se congelam. Uma importante consequência desta derivação é a possibilidade de se representar a estrutura da chama *Flamelet* por um modelo unidimensional.

2.4 Acoplamento da Chama Laminar com a Turbulência.

Em escoamento turbulento, a equação de transporte da fração de mistura média pode ser deduzida usando a média de Favre. O mesmo se aplica na derivação da variância da fração de mistura média. Esta última expressão tem a mesma estrutura da equação de transporte da fração de mistura média, com exceção de dois termos de fontes adicionais. Um representa a produção da variância da fração de mistura e outro a sua dissipação. A equação possui um termo denominado escalar dissipativo que, em escoamento turbulento, é definido a partir de correlações empíricas. A média da concentração das espécies é obtida como função da fração de mistura média, da variância da fração de mistura e o escalar de dissipação. O cálculo desta integral é realizado previamente e armazenado em uma tabela de dados conhecida como biblioteca da chama laminar. Durante o processo de cálculo do escoamento, os valores previamente integrados são recuperados e utilizados nos cálculos, sendo interpolados para valores intermediários, quando necessário. A função de densidade de probabilidade empregada nos cálculos foi a β -PDF.

2.5 O Modelo para Chama de Pré Mistura.

Em uma chama de pré mistura, o combustível é misturado previamente com o oxidante de forma que a fração de mistura média e instantânea é igual em todo o domínio. Nestas condições, o modelo *Flamelet*, deduzido com base em um sistema de coordenada posicionada em uma superfície de fração de mistura estequiométrica não pode ser aplicado diretamente. Entretanto, utilizando-se um modelo para descrever a frente de chama turbulenta em conjunto com a biblioteca da chama laminar, possibilita modelar chamas de pré mistura.

Este modelo que descreve a frente de chama é denominado de modelo de avanço da reação global, que em conjunto com modelos que descrevem a velocidade da chama turbulenta, determinam a posição da chama turbulenta. Depois de determinada a posição da chama no domínio computacional, utiliza-se a biblioteca da chama laminar, previamente calculada, para definir as concentrações das espécies químicas.

O modelo do avanço da reação global pode ser deduzido a partir da definição de um escalar que descreve o avanço da reação global. A composição química do fluido é estabelecida através de uma relação linear entre a composição do fluido antes da reação (reagentes) e depois da reação de combustão (produtos da reação, ou gases queimados). Essa distribuição bimodal do escalar é justificada a partir da hipótese de que o tempo das reações químicas é muito maior do que o menor tempo das escalas de turbulência (escalas de Kolmogorov).

A equação de transporte para o valor médio do escalar progresso da reação pode ser deduzida utilizando-se, também, a média de Favre. Nesta equação, o valor padrão para o número de Schmidt de é 0,9. Para fechar o modelo é preciso definir a velocidade de chama turbulenta. Estão disponíveis, na literatura, vários modelos para descrever esta propriedade, grande parte obtida através de relações empíricas. No modelo padrão utilizado no CFX .6 (Zimont et al., 1998; Zimont et al., 1999; Zimont, 2001) para descrever a velocidade da chama turbulenta aparecem constantes numéricas, um fator de estiramento da chama que contabiliza a redução da velocidade de propagação devido a altas taxas de deformação. Este efeito contabiliza, em termos estatísticos, a probabilidade da dissipação turbulenta em atingir valores críticos, ou seja, acima do valor crítico a chama se extingue enquanto para valores inferiores ao valor crítico os efeitos de estiramento são ignorados.

Assumindo uma distribuição probabilística Log-Normal para a taxa de dissipação de turbulência, o fator de estiramento é definido a partir de parâmetros como o valor padrão da variação desta taxa de dissipação, alguns

coeficientes empíricos, condutividade térmica da mistura não queimada, flutuação da velocidade, escala integral da turbulência e escala de Kolmogorov (η). Aparece ainda, nesta expressão, uma taxa de dissipação crítica, que é calculada com base no gradiente de velocidade crítica, e na viscosidade cinemática do gás.

Para o escoamento laminar o gradiente de velocidade crítica para a extinção pode ser obtido numericamente. Entretanto para escoamentos turbulentos o valor crítico deve ser maior do que no caso laminar. Isto porque os pequenos vórtices turbulentos, responsáveis por grandes taxas de estiramento, podem sobreviver tempo suficiente para extinguirem a frente de chama local. Diferentes modelos podem resultar em significantes variações no valor do gradiente de velocidade crítico, portanto, este coeficiente deve ser ajustado de acordo com resultados experimentais. De fato, este é um dos principais parâmetros a ser ajustado.

Em simulações de turbinas a gás com metano e ar, que operam em pré mistura com baixas razões de equivalência, Zimont et al. (1998) e Zimont (2001) utilizaram valores para o gradiente de velocidade crítica na faixa de 6000 a 10000, com relativo sucesso.

Por fim, a velocidade da chama laminar, S_L , é um segundo parâmetro determinante neste modelo. Este parâmetro pode variar dependendo da razão de estequiometria da mistura. Em chamas com pré mistura perfeita, pode ser suficiente um valor constante para descrever esta propriedade, dado que a fração de mistura também permanece constante em todo o domínio. O valor da velocidade de chama laminar utilizada nos cálculos, foi obtido de Nilsson et al. (2000) definido através de cálculo teórico (código CHEMKIN) usando um mecanismo de reação de 402 reações e 50 espécies químicas (Peters, 1993) para o C_3H_8 e Klaus et al. (1997) para o NO_x .

A Tabela 1 apresenta o valor das principais constantes dos modelos utilizados nos cálculos do presente trabalho. Na Tabela 1, σ_c é o valor padrão para o número de Schmidt da taxa de avanço da reação global, em termos médios, A é um coeficiente do modelo, μ_{str} é um valor padrão empírico do modelo e g_{cr} é o gradiente de velocidade crítica.

Tabela 1 - Valor padrão das constantes numéricas utilizadas nos cálculos.

σ_c	A	μ_{str}	g_{cr}	S_L
0,9	0,5	0,28	8000	0,743

3. Estrutura da Chama de Pré-Mistura Turbulenta.

A caracterização de uma chama de pré mistura passa pelo entendimento das interações entre a fina zona de reação da chama laminar com as estruturas turbulentas do escoamento. Os parâmetros fundamentais nesta caracterização são a espessura da zona de reação da chama laminar e o tamanho das estruturas turbulentas do escoamento. A caracterização da espessura da chama laminar, δ_l , pode ser obtida através de cálculos para a chama laminar unidimensional em códigos como o CHEMKIN. A caracterização do escoamento turbulento passa pelo entendimento da coexistência de múltiplas estruturas turbulentas de diferentes escalas. A primeira escala turbulenta, de importância para esta análise, é a micro escala de Kolmogorov, que representa as menores estruturas turbulentas (vórtices) do escoamento. Estas estruturas têm características de alta vorticidade e elevadas taxas dissipativas da energia cinética. No extremo oposto, as escalas integrais da turbulência, l_t , representam as maiores estruturas turbulentas, que são as dimensões características do equipamento.

A relação entre estas duas escalas turbulentas e a dimensão característica da chama laminar determinam os diferentes regimes de combustão. O primeiro regime, o de chama enrugada, ocorre quando a espessura da chama laminar é muito menor do que as menores escalas turbulentas ($\delta_l \leq \eta$). Nesta condição, a turbulência somente consegue enrugar a frente de chama laminar, critério de Williams-Klimov (Williams, 1993). No outro extremo, se caracteriza o regime de combustão de reações distribuídas, critério de Damköhler (Abraham et al., 1985). Neste regime, a dimensão da chama laminar é muito maior do que as maiores escalas do escoamento ($\delta_l \geq \eta$). Intermediando estes dois regimes assintóticos está o regime de chama em vórtices, que é caracterizado quando o tamanho da chama laminar é maior do que a micro-escala de Kolmogorov e menor do que a escala integral da turbulência ($l_t \leq \delta_l \leq \eta$). Nesta condição as estruturas turbulentas de tamanho intermediário podem deformar a frente de chama de tal forma a criar uma frente de chama desconexa.

Utilizando a definição do número de Damköhler e do número de Reynolds Turbulento pode-se caracterizar o regime de combustão de um sistema conhecendo-se as propriedades do escoamento e as dimensões características da chama laminar deste sistema.

Para o cálculo da cinética química de uma chama laminar, utilizou-se o código CHEMKIN 3.7 com um modelo de reação química de 53 espécies químicas e 325 reações (GRI – Mech 3.0). A Figura 1 apresenta o perfil das principais espécies químicas, temperatura e velocidade para uma chama laminar pré misturada em regime pobre (abaixo da estequiometria).

Destes cálculos foram obtidos os valores da espessura de chama e da velocidade de propagação de chama laminar, sendo estes respectivamente 0,001 m e 0,1868 m. Este valor de velocidade de chama foi empregado nos cálculos. Observa-se uma discrepância significativa entre a velocidade de propagação de chama calculada e o valor sugerido por Nilsson et al. (2000).

Além destes dois resultados, cálculos teóricos de Konnov (2000), com mecanismo composto de 127 espécies e 1207 reações, e resultados experimentais de Vagelopoulos et al. (1994) e Van Maaren et al. (1994) mostram que para uma chama pobre ($\Phi = 0.6$) a velocidade de queima pode variar entre 11 e 17 cm/seg.

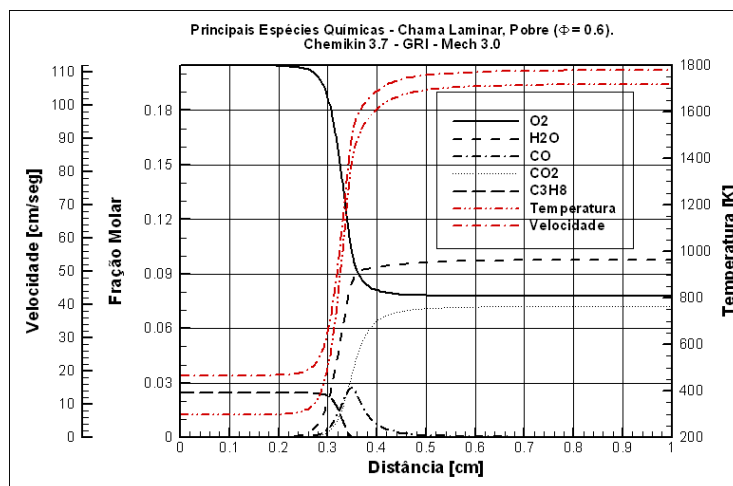


Figura 1 - Perfil de Temperatura, velocidade e espécies químicas de uma chama laminar pobre ($\Phi = 0.6$).

Além das dimensões da chama laminar e sua velocidade é preciso conhecer as dimensões características da turbulência e como estas se relacionam entre si. Através de análises dimensionais, Tennekes et al. (1972) e Libby et al. (1980) mostram que a escala de Kolmogorov da turbulência, onde os efeitos dissipativos são predominantes, pode ser relacionada com a taxa de dissipação. A taxa de dissipação turbulenta, por sua vez, pode ser estimada através da flutuação da velocidade e do comprimento característico da escala turbulenta. Após estas definições, é possível estabelecer a relação entre a micro escala de Kolmogorov e a escala integral da turbulência, (Turns, 1996).

É possível observar que através das expressões anteriores existem duas maneiras de se definir a escala integral da turbulência, uma através da dimensão características do equipamento em estudo e a outra através da expressão que relaciona a escala integral com a taxa de dissipação turbulenta.

No presente trabalho, o combustor possui um diâmetro de 186 mm. Uma primeira suposição para o tamanho característico da escala integral da turbulência é defini-la como sendo da dimensão característica do equipamento, porém optou-se por uma alternativa um pouco mais conservadora. A escala integral da turbulência foi tomada como sendo 80% do tamanho característico do equipamento, isto é, 0,1488 m. Uma segunda forma de se avaliar o valor da escala integral da turbulência seria através da expressão que a relaciona com a taxa de dissipação turbulenta. Obviamente que estas duas escalas possuem ordens de grandeza diferentes para representar a mesma propriedade gerando, desta forma, um ponto de divergência na análise da estrutura da chama turbulenta. A primeira escala, baseada nas dimensões do equipamento, é de natureza física que em determinadas condições e níveis de turbulência pode não representar a realidade. Por outro lado, a segunda escala, baseada em análise dimensionais ou teóricas, que em cálculos numéricos está diretamente acoplada ao modelo de turbulência utilizado, definindo a taxa de dissipação e a flutuação média da velocidade. O sucesso ou fracasso da representação, através dos modelos de turbulência utilizado nos cálculos numéricos, determina a qualidade da análise da estrutura da chama. Idealmente, seria importante dispor de resultados experimentais de todos os parâmetros utilizados nesta análise, o que obviamente não é possível, na maioria dos casos.

Os cálculos numéricos discutidos neste trabalho, conforme definido anteriormente foram baseados no modelo k- ϵ . O valor da taxa de dissipação é um resultado direto da aplicação deste modelo, e o valor da flutuação da velocidade pode ser obtido conhecendo-se, localmente, a energia cinética turbulenta.

Com base nos resultados numéricos do caso 17 (Tabela 5) estimou-se os valores de Danköhler e Reynolds turbulento para diversos pontos do domínio computacional. A Figura 2 apresenta os resultados destas estimativas utilizando as duas diferentes formas propostas para o cálculo da escala integral da turbulência. Estes valores confrontados no diagrama proposto por Abraham et al. (1985), auxiliam na caracterização da estrutura da chama turbulenta. É importante salientar que esta caracterização pode ser controversa, conforme mostra a literatura.

O resultado do diagrama da Fig. 2 sugere que a estrutura da chama de pré mistura para o caso analisado neste trabalho está numa fronteira entre chama enrugada (C) e a chama em vórtices (B). O modelo utilizado para representar a combustão dos gases neste trabalho foi deduzido com base na existência de uma região conexa de reações químicas (chama conexa), características das chamas enrugadas. Em chamas desconexas, que ocorrem quando o regime de combustão é do tipo chama em vórtices (B), pode não ser o mais indicado para este modelo, visto que pode produzir resultados discrepantes quando confrontados a dados experimentais. Como os valores de Reynolds turbulento e Danköhler foram baseados em resultados numéricos e seus valores indicam uma possível coexistência de diferentes

regimes de combustão, somente a confrontação de resultados de temperatura e espécies químicas poderá validar ou não o modelo de combustão utilizado.

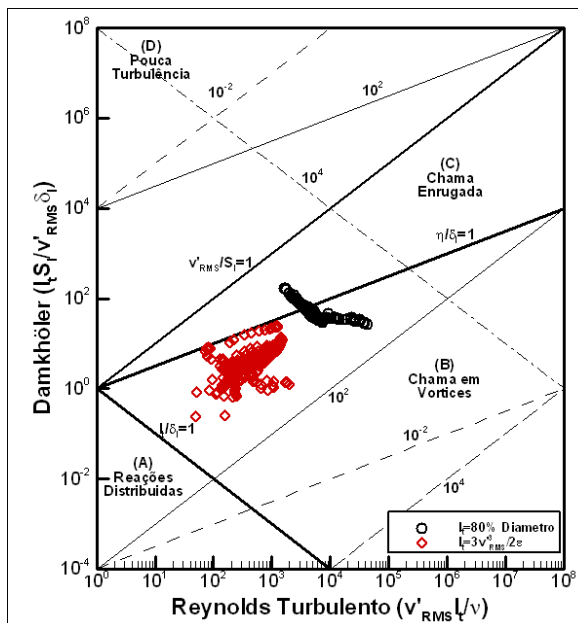


Figura 2 - Representação dos números de Dankhøler e Reynolds turbulento no diagrama que define a estrutura chama turbulenta (Turns, 1996).

4. Medidas Experimentais.

No presente trabalho, foi feita uma extensiva comparação entres os resultados numéricos obtidos das simulações e dados experimentais do trabalho de Anacleto (1993). As análises destas comparações permitiram ajustar os modelos utilizados além de determinar a capacidade de previsão dos mesmos.

No trabalho experimental, Anacleto (1993) utiliza uma câmara de combustão apresentada no esquema da Fig. 3.

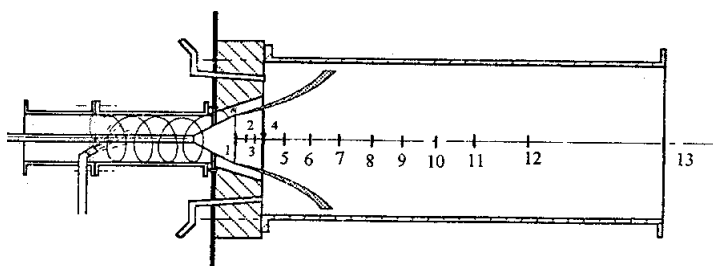


Figura 3 - Esquema da câmara de combustão experimental, Anacleto(1993).

Uma série de medidas de temperatura e fração molar das espécies químicas CO, CO₂ e O₂ foi realizada ao longo de 13 seções axiais, conforme numeração da Fig. 3.

Devido às condições de simetria do escoamento, segundo Anacleto (1993), todas as medidas experimentais foram ao longo de linhas radiais partindo do centro para a extremidade, posicionadas em seções axiais pré-determinadas.

Os parâmetros principais de operação da câmara, utilizados para comparação no presente trabalho encontram-se na Tabela 2.

Em face da grande quantidade de dados experimentais disponíveis (846 pontos) para a comparação com os valores numéricos, desenvolveu-se uma metodologia para tal procedimento. Esta metodologia de comparação está baseada na diferença percentual absoluta entre o valor numérico e experimental, conforme apresentado na Eq. (1).

Este valor foi calculado para todos os pontos experimentais disponíveis. Na Eq. (1), T representa a variável que está sendo comparada (temperatura, fração de CO, CO₂ ou O₂). Para cada seção radial foram realizados cálculos de média e variância dos valores da $Dif\%$. A média em cada seção representa a capacidade do modelo em prever o

fenômeno físico nesta seção. Como as seções estão distribuídas em diferentes regiões da câmara de combustão, torna-se possível determinar onde o modelo obtém sucesso nas previsões.

Tabela 2 – Condições experimentais.

Ar Com Rotação	Combustível	Razão de Equivalência ϕ	Temperatura Ar Primário
$25e^{-3} [m^3/s]$	C_3H_8	0.6	300 [K]

$$Dif\%(T)_{[XYZ]} = \left| \frac{(T_{Num} - T_{Exp})}{T_{Exp}} \right|_{[XYZ]} \quad (1)$$

5. Resultados e Discussão

Nos cálculos bidimensionais axissimétricos, o plano de simetria suporta o cálculo da componente tangencial do escoamento. No CFX 5.6 não é possível realizar diretamente cálculos em 2D, porém, de forma equivalente, pode se fazer cálculos em 3D de uma parte ou fatia da geometria, em que os dois planos radiais delimitadores desta fatia tem propriedades de simetria para os escalares do cálculo (u , v , w , fração de mistura, etc).

Neste trabalho, foram realizadas diversas previsões objetivando averiguar quais os parâmetros dos modelos de combustão presentes no código CFX 5.6 são relevantes na obtenção de resultados coerentes com medidas experimentais. A Tabela 3 apresenta o detalhamento da malha utilizado nas previsões numéricas.

Tabela 3 – Detalhamento das malhas utilizadas nos diversos casos.

Testes	TLM ¹ (mm)	RTL ²		RV ³		Ctd ⁴		No. Nós	No. Elementos		
		Min ⁸	Max ⁸	Min	Max	Min	Max		Tdo ⁵	Prisma ⁶	Pirâmide ⁷
1 a 6	5,0	1,06	10,50	1	34,32	1	42	6250	25195		
7 e 8	3,0	1,03	11,94	1	48,41	1	46	18594	83808		
9 e 10	3,0	1,02	28,54	1	156,471	1	44	11149	40019		
11 a 17	3,0	1,03	800,12	1	60,90	1	42	21446	38683	14035	1
18	1,0	1,00	817,91	1	95,64	1	46	234277	922772	79375	1

¹ TLM - Tamanho Lateral máximo permitido a cada elemento em todo o domínio.

² RTL - Razão de Tamanho L definida como a razão entre o menor e o maior dos lados dentre todos os elementos conectados a um mesmo nó.

³ RV - Razão de Volume definida como a razão entre os volumes do menor e do maior dos elementos conectados a um mesmo nó.

⁴ Ctd - Conectividade definida como o número de elementos conectados a um mesmo nó.

⁵ Tdo - Tetraedro que define o número de elementos Tetraédricos em todo o domínio computacional.

⁶ Prisma. Número de elementos do tipo prisma encontrado em todo o domínio computacional.

⁷ Pirâmides. Número de elementos Piramidais encontrados em todo o domínio computacional.

⁸ Min e Max são os valores mínimos e máximos encontrados em todo o domínio computacional.

A Tabela 4 apresenta uma lista das previsões realizadas neste trabalho com suas respectivas condições de contorno, a saber:

No. Teste – Esta coluna numera todos os casos calculados e objeto de análises deste trabalho. A seqüência dos casos está disposta em ordem cronológica de execução. Os primeiros oito testes foram feitos de forma preliminar para avaliar a influência de alguns dos fatores, como o valor da velocidade crítica de extinção, por exemplo.

Malha – Define os tipos de malha usadas nos cálculos. Em todos os casos foram utilizadas malhas triangulares. R0 designa a primeira malha proposta. R1 designa uma modificação da malha R0 com um refinamento em determinadas regiões. Este refinamento é feito basicamente nas regiões de quina como no corpo rombudo ou na entrada da câmara. A tabela apresenta detalhes específicos das malhas utilizadas nos cálculos.

Ref. Na Parede – Alguns casos foram feitos com malhas refinadas junto às paredes, para melhor modelar os efeitos da camada limite. Foram utilizados entre 12 a 15 camadas no refinamento junto à parede. Os elementos destas camadas são elementos do tipo piramidais e prismáticos. Este tipo especial de refinamento também denominado de “Inflation Boundary”, foi utilizado nos casos de 11 a 17. Na Tabela 4, “N” significa a não existência deste tipo de refinamento e “S” especifica a presença do refinamento na parede.

Ângulo Entre os Planos de Simetria – Dois tipos de geometria foram testadas no presente trabalho, preliminarmente propôs-se uma geometria em que o ângulo de separação entre os planos de simetria era de 10°.

Gradiente de velocidade crítica – Principal parâmetro numérico a ser ajustado com base em resultados teóricos, numéricos e experimentais. Este parâmetro pode variar de acordo com o combustível e as condições experimentais. Para a combustão de metano e ar em câmaras de combustão de turbinas e em condições de mistura pobre, valores da

ordem de 6000 a 10000 foram utilizados com sucesso (Zimont, 1999 e Zimont et al., 2001). O valor padrão do CFX é de 8000. Para os teste analisados no presente trabalho, preliminarmente, utilizou-se o valor padrão do CFX, porém, as predições mostraram ser inadequado. Outros valores foram testados e verificou-se que, para tais casos, valores entre 2500 e 3000 deram resultados mais aderentes com dados experimentais.

Cond. Cont. Saída – Condição de contorno a saída. O CFX permite basicamente dois tipos de condição de contorno Saída (“Outlet”) ou Aberta (“Opening”). Na condição de contorno de Saída (“Outlet”), designada com S na tabela, os gases internos a câmara de combustão só podem sair. Quando de alguma forma, devido a condições de recirculação do escoamento próximo à saída, há a necessidade da entrada de gases externos ao domínio, o CFX de forma automática, define uma condição de parede para aqueles elementos. Desta forma, não é permitido que gases externos se misturem aos gases internos à câmara de combustão. Na condição de contorno Aberta (“Opening”), designada na tabela como A, é permitida a entrada de gases quando a recirculações do escoamento assim o fazem. As propriedades destes gases são definidas nos próximos itens.

Int. Turb. Gases Ext. – Intensidade da Turbulência dos Gases Externos. Designa o percentual da intensidade turbulenta de gases externos à câmara que entra pela saída devido à recirculação do escoamento interno (aplicáveis quando a condição de contorno a saída for aberta). Por falta de informações de como poderiam ser os valores da turbulência a saída deste tipo de câmara de combustão, utilizou-se valores padrões entre 5% e 10%, sugeridos pelo manual do CFX 5.6. Apesar da falta de informação referente a estes valores, acredita-se que eles tenham pouca influência no resultado final, pois a quantidade efetiva de gases externos que entra pela saída da câmara é mínima.

Temp. Gases Ext. [K] – Temperatura dos Gases externos. Este é o valor, da temperatura dos gases externos a câmara de combustão que entrarão pela saída. Este, parece ser um parâmetro bastante sensível no casamento dos resultados numéricos e experimentais, principalmente em nós próximo à parede. A justificativa para isto se deve à influência da temperatura dos gases externos na equação da energia, principalmente nas regiões onde há recirculação (próximo a parede), aumentando, desta forma, a perda de calor por convecção.

Tipo dos Gases Ext. – Tipo dos Gases Externos. Define a condição de reagente (não queimado) ou queimado dos gases externos a câmara de combustão que entrarão pela saída. A condição de gases reagentes, designados com “F”, ou queimados, designados com “Q” é um parâmetro relacionado com o modelo do progresso da reação. Valor unitário para este parâmetro representa gases queimados, “Q”, e nulo representa reagentes. Este também se mostrou ser um importante parâmetro na melhoria das predições.

Frac. Mistura Ext. – Fração de Mistura dos Gases Externos. Define a composição química dos gases externos a câmara de combustão que entrarão pela saída da câmara de combustão devido a efeitos de recirculação do escoamento interno (aplicáveis quando a condição de contorno a saída for aberta). Este é um importante parâmetro a ser definido, pois se mostrou ser bastante sensível nos resultados finais. A definição de um valor adequado, contudo, mostrou-se de difícil previsão. Supor que o gás externo é composto somente de oxidante (fração de mistura igual a zero) não seria muito razoável, pois mesmo que o gás externo a câmara de combustão seja ar, com fração de mistura zero, os gases que entram na câmara de combustão pela saída são uma mistura de o ar e os gases que saem da própria câmara de combustão. Assim, de forma preliminar, iniciou-se com um valor de fração de mistura igual a zero (ar), porém, outros valores foram testados e não influenciaram os resultados finais de forma significativa.

Radiação – Modelo de radiação utilizado nos cálculos. Preliminarmente não foram realizados cálculos de radiação. Esta foi uma hipótese inicial razoável considerando que os reagentes são transparentes. Resultados preliminares indicaram que a temperatura estava entre 100 a 200 K acima dos valores obtidos experimentalmente. Após introduzirem-se cálculos da radiação, esta diferença caiu radicalmente, indicando resultados muito próximos dos dados experimentais.

Parede – Condição de contorno da parede. Este parâmetro define as condições de contorno das paredes que formam a câmara de combustão. Na tabela, “A”, significa uma parede adiabática enquanto que o valor numérico representa a temperatura em Kelvin na qual a parede se encontra em uma condição de contorno de temperatura fixa. Inicialmente supôs-se que o escoamento seria do tipo adiabático, devido às altas velocidades dos gases. Contudo, esta alternativa não foi a mais apropriada, pela diferenças entres as predições numérica e os resultados experimentais, principalmente em regiões próximo as paredes. Por fim, a condição de contorno de temperatura fixa apresentou melhores resultados. O critério utilizado para definir a temperatura em que a parede se encontra foi bastante aleatório e empírico baseado em tentativa e erro com suposições iniciais, a partir de dados experimentais. O ideal seria a modelagem do fenômeno térmico nas paredes, ou de forma alternativa, a introdução de um coeficiente de perda de calor pelas paredes. Este coeficiente poderia ser obtido através de experimentos ou através de uma análise teórica. Como resultados experimentais deste tipo não estavam disponíveis, principalmente para os casos aqui estudados, optou-se por supor alguns valores e testá-los. A Figura 4 apresenta a numeração das estações nas paredes definidas pelas condições de contorno apresentadas na Tabela 4.

O volume de informação gerado por todos os cálculos realizados bem como a quantidade de informação experimental disponível para comparação torna a análise bastante laboriosa. Para auxiliar nesta tarefa, desenvolveu-se um algoritmo estatístico utilizando-se uma linguagem de programação script denominada PERL. A este algoritmo, suportado pelo programa CFX-Post do código CFX 5.6, coube a tarefa de ler e comparar todos os 846 pontos experimentais disponíveis de Anacleto (1993). Este total de pontos está dividido entre 241 para a temperatura, 182 para a fração de CO, 210 para a de CO₂ e 213 para a de O₂. O algoritmo estatístico executou os cálculos para a comparação

entre valores experimentais e numéricos. Além disto, foram realizados cálculos para a média e variância do valor de $D_{if}^{\%}$ em todo o domínio, erro global, bem como para cada uma das seções radiais destacadas na Fig. 3.

Tabela 4 - Configuração numérica utilizada nos testes analisados no presente trabalho.

No. Teste	Malha	Ref. Na Parede	Ang. do Plano de Simetria	$g_{cr} [s^{-1}]$	Cond. Cont. Saída	Int. Turb. Gases Ext.	Temp. Gases Ext. [K]	Tipo dos Gases Ext.	Fraç. Mistura Gases Ext.	Radiação	Parede						
											1	2	3	4	5	6	7
1	R0	N	10°	8000	A	5	400	F	0.0	-	A	A	A	A	A	A	A
2	R0	N	10°	8000	A	5	400	F	0.0	-	A	A	A	A	A	A	A
3	R0	N	10°	3000	A	5	400	F	0.0	-	A	A	A	A	A	A	A
4	R0	N	10°	3000	A	5	400	F	0.0	-	A	A	A	A	A	A	A
5	R0	N	10°	8000	A	5	400	F	0.0	-	A	A	A	A	A	A	A
6	R0	N	10°	5000	S	-	-	-	-	-	A	A	A	A	A	A	A
7	R1	N	10°	8000	A	5	400	F	0.0	-	A	A	A	A	A	A	A
8	R1	N	10°	3000	S	-	-	-	-	-	A	A	A	A	A	A	A
9	R0	N	4°	1000	A	5	1701	Q	0.0	-	300	300	300	300	300	300	300
10	R0	N	4°	1000	A	5	1701	Q	0.0	P1	A	300	300	300	300	300	300
11	R0	S	4°	5000	A	5	1701	Q	0.0	-	A	A	A	A	A	A	A
12	R0	S	4°	10000	A	5	1300	Q	0.0	-	A	A	300	300	300	300	300
13	R0	S	4°	2500	A	10	800	Q	0.0	P1	A	300	300	300	300	500	700
14	R0	S	4°	2500	A	10	800	Q	0.037	-	A	300	300	300	300	500	700
15	R0	S	4°	2500	A	10	800	Q	0.037	P1	A	300	300	300	300	500	700
16	R0	S	4°	2500	S	-	-	-	-	P1	A	300	300	300	300	500	700
17	R0	S	4°	2500	A	5	1400	Q	0.028	P1	A	300	300	300	300	500	700
18	R1	S	4°	5000	A	5	1701	Q	0.0	-	A	A	A	A	A	A	A

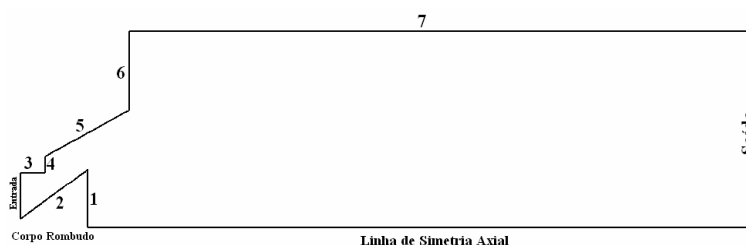


Figura 4 - Geometria simulada com as numerações das paredes definidas nas condições de contorno.

Para se compreender as principais diferenças entre os testes e as respectivas causas, é fundamental compreender como as diversas variáveis estão relacionadas entre si. A primeira cadeia desta relação é das espécies químicas (CO, CO₂, O₂, etc). No modelo Flamelet, para uma chama de difusão o escalar de maior influência na determinação da concentração das espécies químicas é a fração de mistura. Porém, no presente caso, chama de pré mistura, a fração de mistura é constante em todo o domínio computacional ($\phi=0.6$). Neste caso, o escalar dominante é o progresso da reação. O principal parâmetro de controle deste escalar é o gradiente de velocidade crítica $g_{cr} [s^{-1}]$.

A temperatura do gás no interior da câmara de combustão se relaciona com as espécies químicas através da equação da energia. Outros efeitos importantes para a determinação da temperatura, que também estão relacionados com a equação da energia, são as perdas de calor por radiação, condução e convecção nas paredes da câmara. Por fim, um terceiro fator de menor importância, porém não irrelevante, é a mistura dos gases internos com os externos à câmara de combustão por efeito da recirculação na seção de saída do domínio físico estudado.

Com estes conceitos revistos, torna-se mais fácil à identificação das discrepâncias entre os diversos casos analisados. A Tabela 5 apresenta os resultados globais para todos os casos estudados. Nesta tabela, Erro Médio representa a média dos resultados da comparação entre os valores obtidos nos cálculos numéricos e os experimentais, utilizando a Eq. (1) para os pontos do domínio computacional que possuíam medidas experimentais. Além do Erro Médio, a Tabela 5 apresenta a variância desta média. Esta propriedade mostra a capacidade do modelo numérico em

predizer o escoamento real, verificada através de dados experimentais. Altos valores de variância indicam que a linha de tendência do comportamento numérico oscila ao longo da linha de tendência do comportamento real, mesmo que o Erro Médio seja pequeno. Em geral, como pode ser visto, baixos valores do Erro Médio são acompanhados por baixos valores de variância.

Tabela 5 – Estatística entre os valores numéricos e experimentais.

Testes	Temperatura		[CO ₂]		[O ₂]	
	Erro Médio	Variância	Erro Médio	Variância	Erro Médio	Variância
1	53,0%	0,008	104,6%	9,371	22,4%	0,008
2	25,0%	0,095	132,0%	14,275	40,5%	0,086
3	19,5%	0,093	121,9%	13,979	30,8%	0,041
4	27,3%	0,104	107,8%	14,457	13,4%	0,020
5	22,6%	0,084	98,1%	11,803	17,2%	0,043
6	18,3%	0,099	112,2%	14,660	14,5%	0,026
7	25,4%	0,095	110,8%	14,925	14,2%	0,022
8	14,9%	0,100	116,0%	12,854	19,3%	0,012
9	19,6%	0,100	131,6%	14,288	40,2%	0,071
10	16,5%	0,022	44,6%	0,402	25,3%	0,078
11	18,9%	0,125	121,7%	15,095	17,0%	0,033
12	21,5%	0,119	122,9%	15,390	16,7%	0,029
13	11,0%	0,018	37,3%	0,602	11,3%	0,017
14	11,8%	0,020	33,2%	0,442	11,2%	0,017
15	11,5%	0,020	39,3%	0,554	12,0%	0,018
16	10,8%	0,014	36,4%	0,436	11,7%	0,017
17	11,0%	0,015	33,1%	0,310	11,5%	0,018
18	30,4%	0,141	120,2%	15,089	18,1%	0,033

A numeração dos testes fora estabelecida com base na ordem cronológica de execução dos cálculos. Os testes de 1 a 8 foram preliminares (geometria preliminar de 10°) onde se variou basicamente o gradiente de velocidade crítica e a condição de contorno da saída. Pouco se pôde concluir com respeito a estes casos, principalmente pelo fato de que houve poucas modificações entre eles. De qualquer forma o erro global da temperatura ficou entre 20% a 50%. Um resultado importante desta fase preliminar de cálculo foi a de que o gradiente de velocidade crítico inicial de 8000 mostrou-se inadequado e que o valor ideal estaria na faixa de 3000.

Do caso 9 em diante, com a utilização de uma geometria menor (4°) e com maior números de nós para representar o domínio, Além de um rigoroso controle das condições de contorno, os resultados obtidos foram mais satisfatórios. Uma comparação entre os casos 8, 9 e 10 sugere a importância de se incluir a radiação e as condições de contorno para a temperatura da parede.

De forma global, os casos 16 e 17 apresentam os melhores resultados entre todos analisados, com destaque para o caso 17 que apesar de ter maior erro na temperatura (0,2% maior que no caso 16) apresenta melhores resultados tanto para a fração de CO₂ quanto para a de O₂. Uma análise das condições de contorno entre estes dois cálculos mostra pouca influência entre as condições de contorno do tipo “Aberta” ou “Saída”. A condição de contorno “Aberta” possibilita um melhor resultado para a fração de CO₂ em até 3%. Esta conclusão não pode ser generalizada por causa dos vários parâmetros exigidos em uma condição de contorno do tipo “Aberta”, Além disso, a média global pode mascarar erros locais importantes.

6. Conclusão

Utilizando-se o código CFX 5.6 foram realizadas predições numéricas de um câmara de combustão em regime de pré mistura de propano e ar. Para se descrever o processo de combustão, utilizou-se o modelo laminar Flamelet em conjunto com uma PDF pré assumida do tipo β -PDF. No estudo realizado, identificou-se o gradiente de velocidade crítica g_{cr} como um parâmetro importante para se recuperar resultados experimentais, recomendando-se o valor de 2500 s⁻¹. Para o presente caso estudado, os melhores resultados foram obtidos com a utilização de uma geometria axissimétrica de 4°, discretizada por uma malha de 21446 nós. Foi incluído na equação da energia um cálculo de radiação usando o modelo de aproximação diferencial (Raithby 1991). Trabalhos futuros pretendem incluir cálculos tridimensionais bem como teste de diferentes modelos de turbulência e da cinética química do processo de combustão.

Estes novos modelos da cinética química incluirão tanto a utilização de diferentes bibliotecas para a chama laminar quanto modelos reduzidos de reações.

7 – Referências Bibliográficas

- Abraham, J., Williams, F. A., and Bracco, F. V., “A discussion of Turbulent Flame Structure in Premixed Charges,” Paper 850345, SAE P-156, Society of Automotive Engineers, Warrendale, PA, 1985.
- Abraham, J., Williams, F.A., and Bracco, F.V., “A discussion of Turbulent Flame Structure in Premixed Charges,” Paper 850345, SAE P-156, Society of Automotive Engineers, Warrendale, PA, 1985.
- Anacleto, P.J.S.M. “Análise Experimental de uma Câmara de Combustão axissimétrica com Pré-Vaporização e Pré-Mistura de reagentes”, Tese de Mestrado, Instituto Superior Técnico, 1993.
- Bray, K.N.C., “The challenge of turbulent combustion”, Proceedings of the 26th International Symposium on Combustion, The Combustion Institute, Pittsburgh, 1996, pp. 1±26.
- Candel, S., Weynante, D., Lacas, F., Darabiha, N., Rolon, C., “Current Progress and Future Trends in Turbulent Combustion”, Combust. Sci. Technol. 98 (1994) 245±264.
- GRI – Mech 3.0, 1999, [http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/]
- Jones, W.P., Whitelaw, J.H., “Calculation methods for reacting turbulent flows: a review”, Combust. Flame 48 (1982) 1±26.
- Klaus, P., Warnatz, J., “Mechanism C2/NO”, 1997 [<http://rea-flow.iwr.uni-heidelberg.de/HOME.english.html>].
- KONNOV, A.A. Detailed reaction mechanism for small hydrocarbons combustion. Release 0.5 <http://homepages.vub.ac.be/~akonnov/>, 2000.
- KONNOV, A.A., Development and validation of a detailed reaction mechanism for the combustion of small hydrocarbons. 28-th Symposium (Int.) on Combustion, Edinburgh, 2000. Abstr. Symp. Pap. p. 317
- Libby, P.A., and Williams, F.A., “Fundamental Aspects in Turbulent Reacting Flows” (P. A. Libby, and F. A. Williams, eds.), Springer-Verlag, New York, 1980.
- Linan, A. “On the internal structure of laminar diffusion flames”. Technical note, Inst. nac. de tec. aeron., Esteban Terradas, Madrid, Spain, 1961.
- Magnussen, B.F., Hjertager, B.H. “On mathematical modeling of turbulent combustion with special emphasis on soot formation and combustion”, Proceedings of the 16th International Symposium on Combustion, The Combustion Institute, Pittsburgh, 1976, pp. 719±729.
- Manual do CFX 5.6
- Nilsson, P., Bai, X.S. “Level-set flamelet library approach for premixed turbulent combustion”, Experimental Thermal and Fluid Science 21 (2000) 87-98.
- Peters, N. “Flame calculations with reduced mechanisms – an outline”, N.Peters, B. Rogg (Eds.) Reduced Mechanisms for Applications in Combustion Systems, Lecture Notes in Physics, vol m-15, Springer, Berlin, 1993, pp.3-14
- Peters, N. “Turbulent Combustion”. Cambridge monographs on mechanics, Cambridge University Press, 2000.
- Pope, S.B. “PDF methods for turbulent reactive flows, Prog. Energy Combust. Sci. 11 (1985) 119-192
- Raithby, G. D., “Equations of motion for reacting, particle-laden flows”, Progress report, Thermal Science Ltd., 1991.
- Tennekes, H., and Lumley, J.L., “A first Course in Turbulence”, MIT Press, Cambridge, MA, 1972.
- Turns, S. R., “An Introduction to Combustion: concepts and applications”, McGraw-Hill Inc. Series in Mechanical Engineering, 1996.
- Vagelopoulos, C.M., Egolfopoulos, F.N., Law, C.K. 25th Symp. (Int.) on Combustion, The Combustion Institute, 1994, pp. 1341-1347.
- Van Maaren, A., and de Goey, L.P.H. Combust. Sci. technol., 1994, v. 102, pp. 309-314.
- Williams, F.A., “Asymptotic Methods in Turbulent Combustion,” AIAA Journal, 24:867-875.

- Zimont, V.L. "Gas Premixed Combustion at High Turbulence. Turbulent Flame Closure Combustion Model". Proceedings of the Mediterranean Combustion Symposium, Instituto di Richerche sulla Combustione - CNR, Italy, pp. 1155-1165, 1999.
- Zimont, V.L., Polifke, Biagioli, F. and Syed, Khawar "Modelling turbulent premixed combustion in the intermediate steady propagation regime". Progress in Computational Fluid Dynamics, Vol. 1, pp. 14-28, 2001.
- Zimont, V.L., Polifke, W., Bettelini, M. and Weisenstein, W. "An efficient Computational Model for Premixed Turbulent Combustion at High Reynolds Numbers Based on a Turbulent Flame Speed Closure". J. Engineering for Gas Turbines and Power (Transactions of the ASME), vol 120, pp. 526-532, 1998.

Numerical Modeling of LPP Combustion Chamber with the CFX 5.6 Code

Ronne Toledo
Ronne_toledo@msn.com
Carlos Alberto Gurgel Veras
Gurgel@unb.br
Armando Caldeira Pires
armandocp@unb.br
Antônio César Pinho Brasil Jr.
Brasil@enm.unb.br
University of Brasília, Mechanical Engineering Department, Laboratory of Energy and Environment, Brasília-DF,
70910-900

Abstract

Combustion processes are largely present in the modern society, though its complete knowledge is far from be obtained by science. Notwithstanding, a good deal of improvements has been attained. This paper discusses the combustion processes that takes place in a lean environment with previous mixture of the reactants, typical of LPP (Lean Premixed Pre-vaporized) combustors. The study was conducted in a computational approach, where the commercial code CFX 5.6 was largely employed. The flow was modeled with the Navier-Stokes equations along with the k- ϵ model to describe turbulence. To deal with the combustion process, in a premixed system, a Flamelet model was used coupled to a second model necessary for advancing the global reaction. The approach suggested by Zimont, for advancing the global reaction, was used in closing the system. 2-D numerical predictions in axial geometry were conducted and compared to available experimental data. In this case, a parametric investigation helped to adjust model constants, by means of trial and error. In addition, the analysis indicated model's restrictions in predicting combustion behavior in the recirculation zone downstream of the bluff body, as well as at the combustor exit. By varying boundary conditions for temperature, on combustor walls, and the parcel of radiation, it was possible to improve numerical predictions for this class of problem.

Key-words: Flamelet, combustion, gas turbine, numerical simulation.