

UNIVERSIDADE FEDERAL DE JUIZ DE FORA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA DE PRODUÇÃO E MECÂNICA
CURSO DE GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA

Janderson Honório Mazzine Afonso
João Pedro Dutra Ferreira
José Vitor Maia Monteiro

AVALIAÇÃO 2 DE FUNDAMENTOS DE COMBUSTÃO
Simulação Numérica de Velocidade de Chama: Resultados, Discussões e
Conclusões
Etanol e Metanol

Juiz de Fora

2019/3

SUMÁRIO

1	DESENVOLVIMENTO DO CÓDIGO	3
2	RESULTADOS METANOL	5
3	RESULTADOS ETANOL	8
4	DISCUSSÃO E CONCLUSÕES	12
	REFERÊNCIAS	16

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1 – Velocidade de chama laminar de Metanol (CH_3OH) me metros por segundo, em função da razão de equivalência para diferentes temperaturas de entrada no combustor, a uma pressão de 8 atm.	6
Figura 2 – Velocidade de chama laminar de Metanol (CH_3OH), em polegadas por segundo, em função da razão de equivalência para diferentes temperaturas de entrada no combustor, a uma pressão de 8 atm.	7
Figura 3 – Velocidade de chama laminar de Etanol (C_2H_5OH) me metros por segundo, em função da razão de equivalência para diferentes temperaturas de entrada no combustor, a uma pressão de 8 atm.	10
Figura 4 – Velocidade de chama laminar de Etanol (C_2H_5OH), em polegadas por segundo, em função da razão de equivalência para diferentes temperaturas de entrada no combustor, a uma pressão de 8 atm.	11
Figura 5 – Veículo de competição de arrancada categoria DT-B (dianteira turbo classe B) movido a Metanol e embalagem do produto. Fonte: Autores.	12
Figura 6 – Comparação da velocidade de chama laminar da mistura ar-metanol, obtida experimentalmente e através do mecanismo Gri-Mech 3.0 para uma temperatura de 300 K e pressão de 1 atm na entrada do combustor. Disponível em: http://combustion.berkeley.edu/gri-mech/version30/figs30/CH3OHSu.gif .	13
Figura 7 – Comparação da velocidade de chama laminar da mistura ar-etanol, obtida experimentalmente e numericamente para diferentes temperaturas de entrada no combustor. Extraído de Frassoldati et al. (2010).	14
Figura 8 – Comparação da velocidade de chama laminar da mistura ar-etanol e ar metanol, obtida experimentalmente e através do mecanismo C1-C3 para uma temperatura de 343 K e pressão de 1 atm na entrada do combustor. Extraído de Ranzi et al. (2012).	15

1 DESENVOLVIMENTO DO CÓDIGO

O código base utilizado para a simulação de velocidade de chama foi o *flamespeed_sensitivity.py*, que pode ser encontrado no site do Cantera na página *Python Examples*, seção *One-Dimensional Flames*.

A atividade relacionada a segunda avaliação envolvia a simulação numérica para a determinação da velocidade de chama laminar a pressão constante para temperaturas de 300 a 600 K com incrementos de 50K entre as temperaturas, para razões de equivalência de 0,1 a 3,0, em metros por segundo e polegadas por segundo.

Porém, o código original, apenas calculava a velocidade de chama a uma temperatura, para uma equação em equilíbrio (sem variação da razão de equivalência), para apenas uma temperatura de entrada no combustor. O código também não plotava gráficos. Assim, algumas modificações foram feitas a fim de atingir os objetivos.

A linha 13 do código original, $p = ct.one_atm$ recebeu um produto por 8, a fim de atingir o objetivo da avaliação do comportamento da velocidade de chama a uma pressão constante de 8 atm. Logo, a linha 13 ficou: $p = 8*ct.one_atm$.

A fim de possibilitar a variação da temperatura na entrada do combustor, a linha 14 do código, $Tin = 300.0$, foi substituída pela definição de um número de temperaturas ($tpoints = 7$), e um vetor dimensionado por este número, a fim de se obter o incremento de temperatura desejado: $Tin = np.linspace(300, 600, tpoints)$.

Para trabalhar com os arquivos *.cti*, a linha 20 ($gas = ct.Solution('gri30.xml', 'gri30_mix')$) foi alterada a trabalhar apenas com um arquivo *.cti*, a ser alterado de acordo com o combustível estudado.

A variação da temperatura foi possível criando um laço do tipo *for* na linha 20 do código desenvolvido, utilizando cada uma das temperaturas presentes no vetor temperatura criado anteriormente.

Já para a implementação da variação da razão de equivalência, algumas providências tiveram que ser criadas. A primeira foi criar, assim como na temperatura, uma variável para definir o tamanho do vetor de temperaturas, isto é, quantos pontos de ϕ seriam adotados (linha 21 do código desenvolvido: $npoints=59$). Este valor poderia ser aumentado para permitir um gráfico mais suave, ou diminuído para reduzir o tempo de execução. Em seguida, definiu-se o vetor ϕ como sendo um vetor de tamanho $npoints$, variando entre 0,1 e 3,0 (linha 22 do código desenvolvido: $\phi = np.linspace(0.10, 3.00, npoints)$). Neste ponto, criou-se também os dois vetores resposta, vms e vin vazios a fim de receber os valores de velocidade em metros por segundo e polegada por segundo respectivamente.

Em seguida, foi feito outro laço *for*, desta vez com o intuito de variar o ϕ . Aqui, alterou-se a linha 15 do código original ($reactants = 'CH4:0.45, O2:1.0, N2:3.76'$) para a

função *gas.X*, que permite definir os componentes da pre mistura de maneira separada. A sintaxe utilizada (*gas.X = 'C2H5OH':1, 'O2':3/phi[i], 'N2':3*3.76/phi[i]*), permite que o primeiro termo seja substituído pelo combustível de interesse, enquanto o segundo e o terceiro, quando divididos pelo *phi* permitem que a razão de equivalência da mistura seja alterada. Importante mencionar que a equação deve ser equilibrada manualmente antes de receber o quociente por *phi*, a fim de representar a razão que se deseja obter de fato.

A fim de o código trabalhar com os valores variáveis setados para cada iteração, na função *gas.TPX* os termos *Tin* e *reactants* foram substituídos por *Tin[j]* e *gas.TPX*, setando assim as condições da mistura na entrada do combustor para as diferentes condições. O cálculo é feito pelas funções *f*, onde *f* é uma variável que recebe a mistura, *f.set_refine_criteria* determina o refinamento da solução e *f.solve* calcula e determina a solução. Na função *f.solve*, o parâmetro *loglevel* varia de 0 a 5 e indica a quantidade de informações (*Logs*) que irão aparecer no console de execução, onde 0 não aparecerá nenhuma, e 5 aparecerá com alto grau de detalhamento. O parâmetro *auto* permite que o solver altere os métodos de cálculo até encontrar uma resposta para o cálculo.

A partir da linha 28 do código original, nada seria aproveitado, portanto foram retiradas para diminuir o custo computacional. Por sua vez, no código desenvolvido, neste ponto os vetores *vms* e *vin* são preenchidos com os valores calculados, para posteriormente serem plotados nos gráficos com o auxílio da biblioteca *matplotlib*, que são os objetivos da presente simulação.

2 RESULTADOS METANOL

O primeiro combustível a ser simulado foi o Metanol, que se encontrava no modelo padrão do Cantera, a *gri30*. Antes de rodar o código foi necessário determinar a proporção estequiométrica para combustão do metano. O equilíbrio ficou da seguinte forma:



Como neste caso estamos interessados apenas em descobrir o termo a , temos que:

$$C = b.C \longrightarrow b = 1 \quad (2.2)$$

$$4.H = c.2H \longrightarrow c = 2 \quad (2.3)$$

$$O + a.2O \longrightarrow b.O_2 + c.O \quad (2.4)$$

$$a.2 = 4 - 1 \quad (2.5)$$

$$a = 1,5 \quad (2.6)$$

Assim, definido o valor de a temos que para haver a combustão completa de 1 mol de metanol precisamos de 1,5 mols de ar, que é composto de 1 mol de O_2 e 3,76 mols de N_2 .

Estabelecido isso, pode-se preencher a linha do código desenvolvido referente a composição do gás com a expressão `'CH3OH':1, 'O2':1.5/phi[i], 'N2':(1.5*3.76)/phi[i]` que irá calcular assim a velocidade para diferentes razões de equivalência (ϕ).

Os gráficos obtido para velocidade de chama do metanol em metros por segundo pode ser visto na figura 1 enquanto o gráfico da velocidade em polegadas por segundo pode ser visualizado na figura 2.

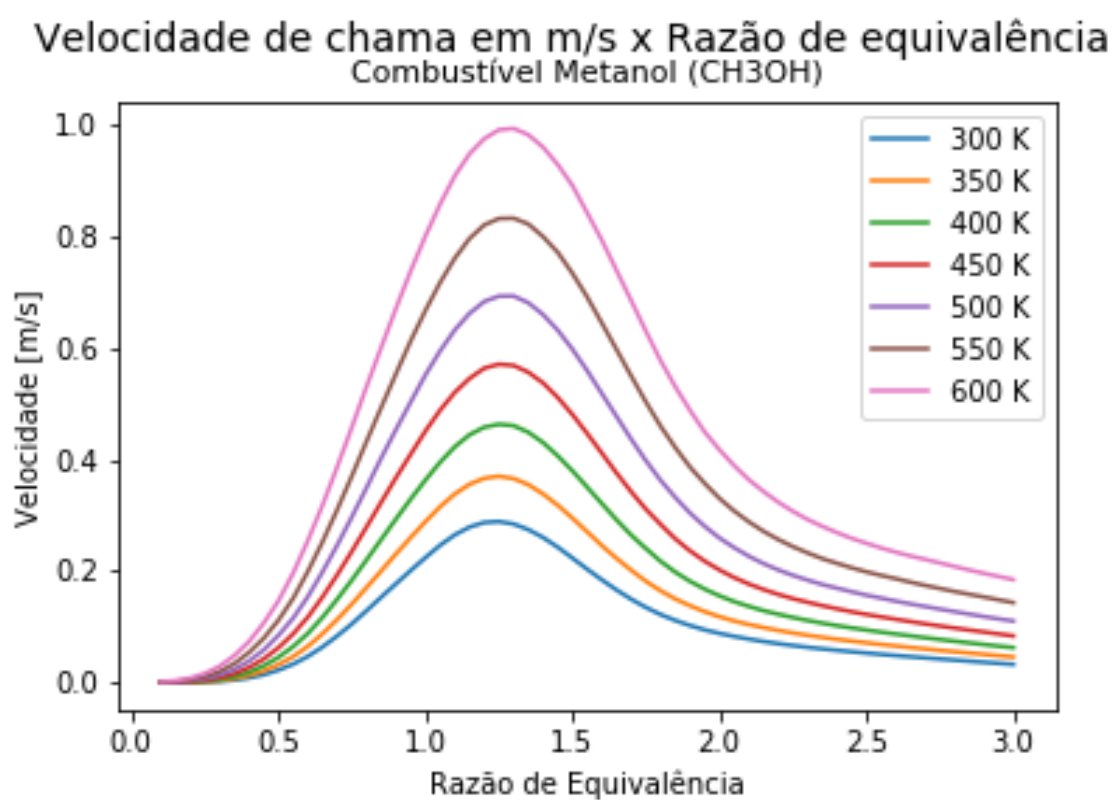


Figura 1 – Velocidade de chama laminar de Metanol (CH_3OH) em metros por segundo, em função da razão de equivalência para diferentes temperaturas de entrada no combustor, a uma pressão de 8 atm.

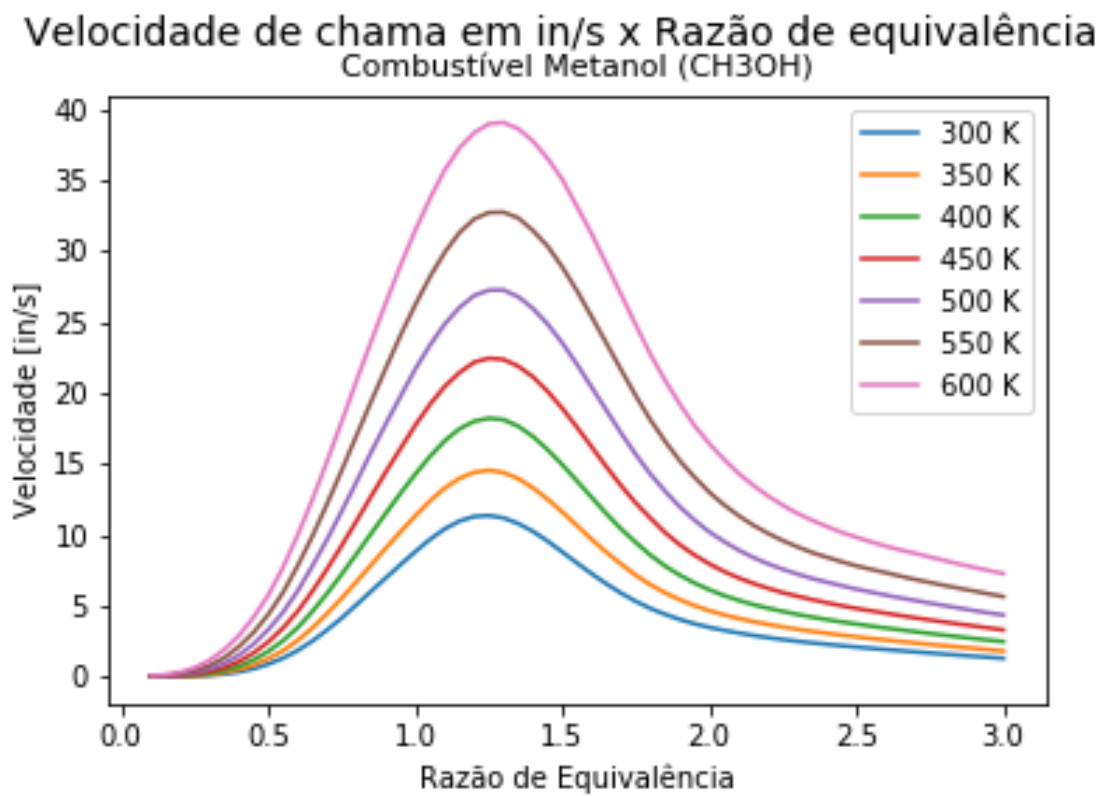


Figura 2 – Velocidade de chama laminar de Metanol (CH_3OH), em polegadas por segundo, em função da razão de equivalência para diferentes temperaturas de entrada no combustor, a uma pressão de 8 atm.

3 RESULTADOS ETANOL

Em seguida simulou-se o Etanol, que se encontrava no modelo de mecanismo completo do *Creck Modeling*, a *compleo.cti* utilizado na simulação do butanol na primeira avaliação. Assim como para o mentanol, antes de rodar o código foi necessário determinar a proporção estequiométrica para combustão do mentano. O equilíbrio ficou da seguinte forma:



Como neste caso estamos interessados apenas em descobrir o termo a , temos que:

$$2C = b.C \longrightarrow b = 2 \quad (3.2)$$

$$6.H = c.2H \longrightarrow c = 3 \quad (3.3)$$

$$O + a.2O \longrightarrow b.O_2 + c.O \quad (3.4)$$

$$a.2 = 7 - 1 \quad (3.5)$$

$$a = 3 \quad (3.6)$$

Assim, definido o valor de a temos que para haver a combustão completa de 1 mol de etanol precisamos de 3 mols de ar, que é composto de 1 mol de O_2 e 3,76 mols de N_2 .

Estabelecido isso, pode-se preencher a linha do código desenvolvido referente a composição do gás com a expressão `'C2H5OH':1, 'O2':3/phi[i], 'N2':3*3.76/phi[i]` que irá calcular assim a velocidade para diferentes razões de equivalência (ϕ). Porém, ao se iniciar a simulação com o mecanismo completo, observou-se que o mesmo era inviável devido a quantidade de equações envolvidas, que tornaram o código demasiadamente longo. Selecionou-se então os modelos detalhados que pudessem atender a simulação em um menor tempo. No site do *Creck Modeling*, os mecanismos detalhados da Gasolina, Biogasolina, C2-C3 e Biomassa possuem o etanol como um dos elementos combustíveis.

Apesar da velocidade de execução maior, logo verificou-se que o código não alcançava a convergência com os mecanismos adotados para os valores iniciais de ϕ . Investigando os artigos relacionados aos mecanismos, citados nas páginas do *Creck Modeling* e dentro dos arquivos dos mecanismos, foi possível verificar que as análises de velocidade de chama

são feitas em razões de equivalência superiores a 0,4, como pode ser visto em Ranzi et al. (2012).

Assim, a fim de determinar o melhor mecanismo a ser implementado, variou-se o ϕ no sentido decrescente, a fim de descobrir o modelo que melhor se comportava, possuindo o melhor desempenho e atingindo um valor de ϕ limite inferior aos demais. Com isso, verificou-se que o mecanismo C2-C3 era melhor a ser empregado para a simulação do Etanol, atingindo um limite próximo de $\phi = 0.33$. Configurou-se então o código para trabalhar com uma variação de ϕ de 0,35 a 3,0.

Os gráficos obtido para velocidade de chama do metanol em metros por segundo pode ser visto na figura 3 enquanto o gráfico da velocidade em polegadas por segundo pode ser visualizado na figura 4.

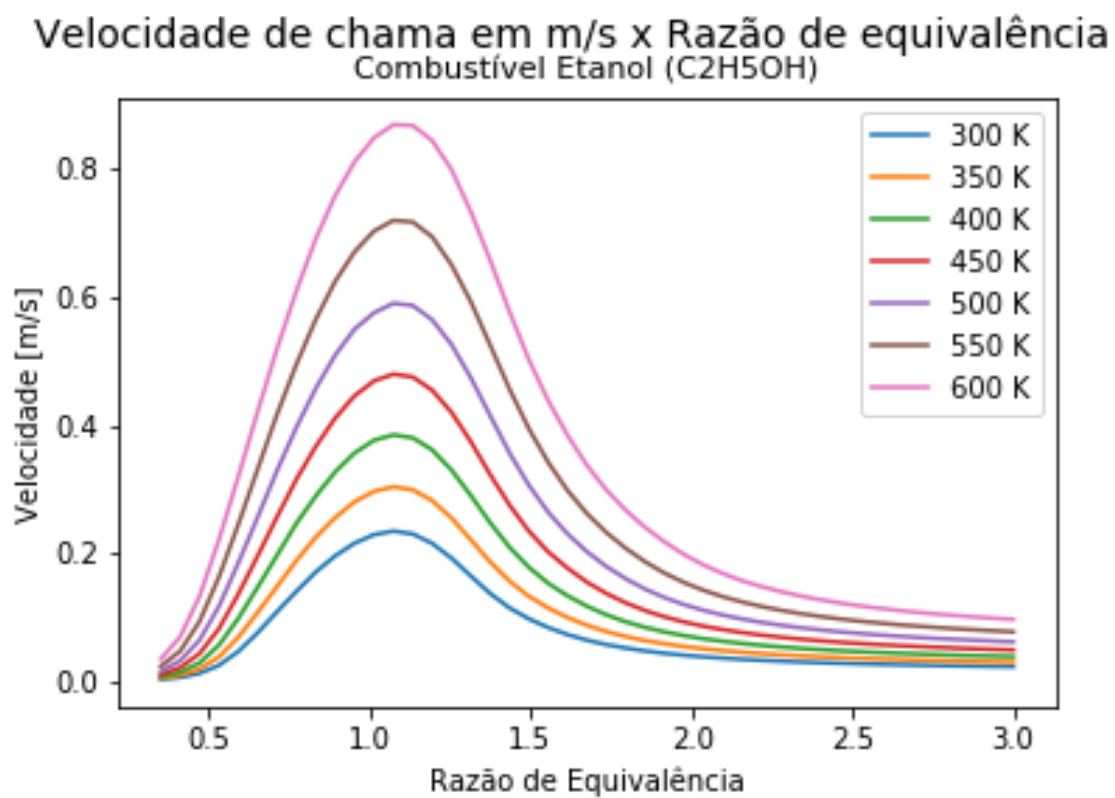


Figura 3 – Velocidade de chama laminar de Etanol (C_2H_5OH) em metros por segundo, em função da razão de equivalência para diferentes temperaturas de entrada no combustor, a uma pressão de 8 atm.

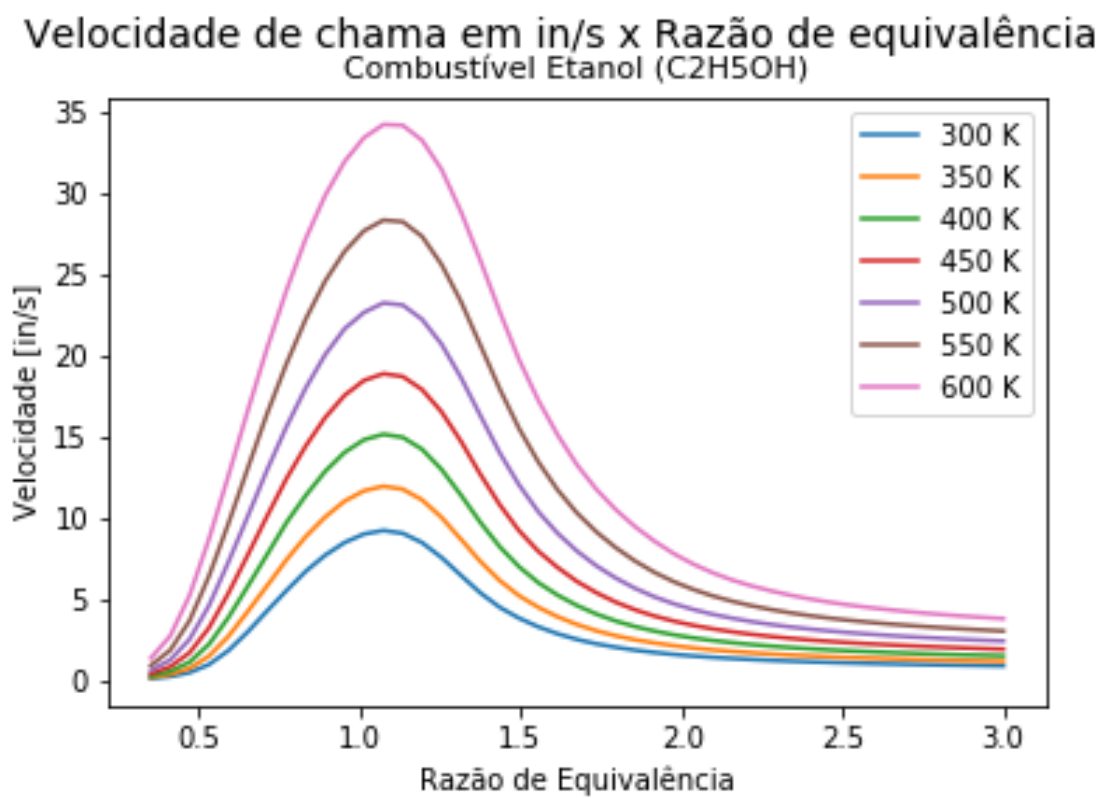


Figura 4 – Velocidade de chama laminar de Etanol (C_2H_5OH), em polegadas por segundo, em função da razão de equivalência para diferentes temperaturas de entrada no combustor, a uma pressão de 8 atm.

4 DISCUSSÃO E CONCLUSÕES

Analizando os gráficos gerados pelo código para a velocidade de chama laminar pré misturada e os gráficos presentes no artigo de Ranzi et al. (2012) para os diferentes mecanismos, observa-se que o comportamento das curvas para os mais diversos compostos é semelhante, diferindo levemente acerca do ponto de equivalência onde ocorre a velocidade máxima de chama, que fica sempre compreendido em uma região de mistura levemente rica ($1,00 < \phi < 1,30$).

Em ambos combustíveis em estudo, a máxima velocidade de chama ocorreu para uma temperatura de entrada no combustor de 600 K, alcançando próximo de 1 m/s (aproximadamente 39,30 in/s) para o Metanol e próximo de 0,9 m/s (aproximadamente 35,40 in/s) para o Etanol.

Como o estudo das chamas laminares são a base para o estudo das chamas turbulentas, na qual os mesmos processos físicos se encontram presentes, comparando o etanol e metanol em aplicações práticas, fica evidente que para veículos de competição de alto desempenho, como carros de competição de arrancada, um procedimento comum é alterar o combustível de etanol para uma mistura com metanol, a fim de obter um maior desempenho do motor (figura 5) sem necessitar de alterações físicas no perfil da câmara de combustão.



Figura 5 – Veículo de competição de arrancada categoria DT-B (dianteira turbo classe B) movido a Metanol e embalagem do produto. Fonte: Autores.

No site do Gri-Mech 3.0 pode-se acessar uma imagem gerada através da comparação dos dados experimentais obtidos por Egolfopoulos et al. (1989) com os dados obtidos através do modelo para um temperatura de entrada no combustor de 300 K a uma pressão de 1 atm (figura 6). Verifica-se então que há uma boa correlação entre os resultados

experimentais e os obtidos pelo modelo até $\phi = 1,1$. A partir deste valor, o modelo e os dados experimentais começam a divergir, inclusive indicando um pico de velocidade em $1,20 < \phi < 1,30$, enquanto o pico dos dados experimentais ocorre em aproximadamente $\phi = 1,1$, além de um comportamento distinto para razões de equivalência baixa ($\phi < 0,7$). Isto demonstra que para um estudo na faixa de $(0,70 < \phi < 1,10)$ o modelo Gri-Mech 3.0 pode ser adotado com uma precisão ótima, enquanto para estudos fora desta faixa de razão de equivalência, outros mecanismos deverão ser considerados.

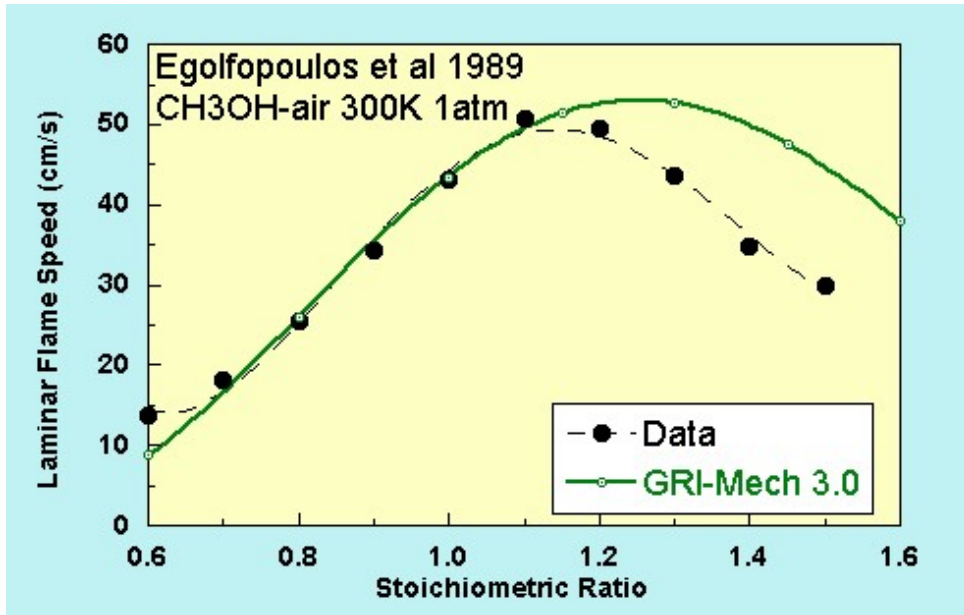


Figura 6 – Comparação da velocidade de chama laminar da mistura ar-metanol, obtida experimentalmente e através do mecanismo Gri-Mech 3.0 para uma temperatura de 300 K e pressão de 1 atm na entrada do combustor. Disponível em: <http://combustion.berkeley.edu/gri-mech/version30/figs30/CH3OHSu.gif>.

Frassoldati et al. (2012) apresenta um estudo sobre o modelo cinético e de oxidação de misturas envolvendo Etanol, que culminaram no modelo detalhado de *Primary Reference Fuels (PRF) + PAH + Alcohols + Ethers (Version 1412, December 2014)*, presentes no site da *CRECK Modeling*, que não foi aplicado no código por questões de desempenho. Porém, a figura 7 retirada do artigo apresenta um gráfico relacionando os valores obtidos experimentalmente com os do modelo supracitado para a velocidade de chama a diferentes temperaturas de entrada no combustor, em função da razão de equivalência. Apesar de não ser imediatamente comparável com os gráficos obtidos, devido as condições de pressão na entrada diferentes das aplicadas neste estudo, é possível verificar a semelhança comportamental das curvas no que tange a região de máxima velocidade ($1,10 < \phi < 1,30$) e perfil de curvas, além de sua adequação aos valores obtidos experimentalmente, demonstrando assim a validade da utilização desta modelagem para o estudo do comportamento da velocidade de chama para o combustível Etanol.

Para o modelo adotado neste trabalho para a simulação do Etanol, Ranzi et

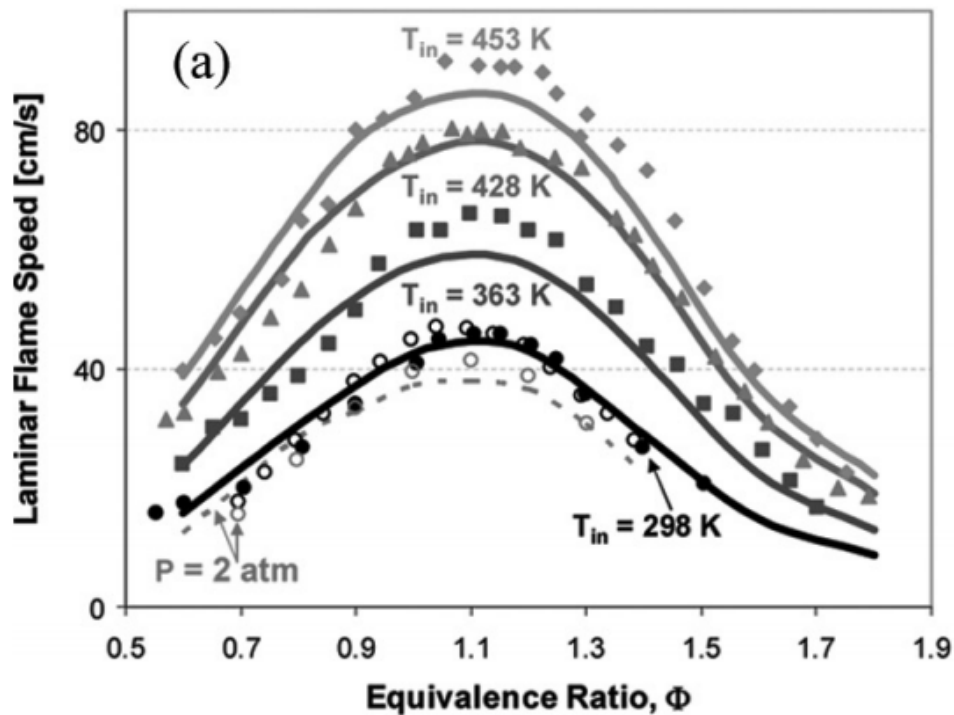


Figura 7 – Comparação da velocidade de chama laminar da mistura ar-etanol, obtida experimentalmente e numericamente para diferentes temperaturas de entrada no combustor. Extraído de Frassoldati et al. (2010).

al. (2012) descreve na seção 3.3.1 o comportamento do mecanismo C1-C3 disponível no site da *CRECK Modeling*. Na figura 8 vemos a curva do etanol (C_2H_5OH) obtida através do mecanismo para uma temperatura de 343 K e pressão de 1 atm na entrada do combustor. Para essas condições verifica-se uma alta precisão dos resultados em $0,80 < \phi < 1,5$, apresentando uma leve dispersão para valores de ϕ menores que 0,8. Tal condição evidencia que os valores que por ventura fossem obtidos para $\phi < 0,35$, não seriam compatíveis com o observado experimentalmente, não tendo assim valor para a análise. Vale mencionar também o mau comportamento do metanol com este mecanismo, para $\phi < 0,95$, evidenciando a necessidade de cuidados durante a escolha do modelo adequado para o estudo deste mecanismo.

Assim como no relatório apresentado anteriormente para a determinação de temperatura de chama adiabática e fração molar de produtos da combustão, que para um estudo preciso do comportamento da combustão, se deve, inicialmente, determinar em qual faixa de trabalho se deseja estudar, para então definir o melhor mecanismo a ser utilizado, que alie precisão com os dados experimentais e baixo custo computacional. Para isso, a bibliografia apresentada nos sites das agregadoras de modelos são ferramentas essenciais na determinação do modelo de mecanismo a ser empregado na simulação.

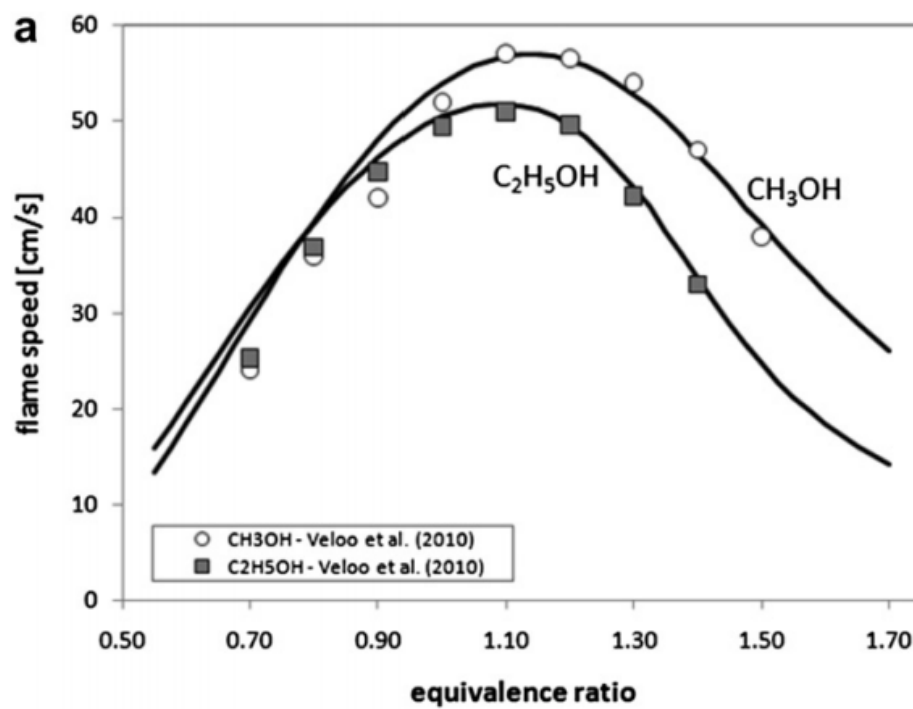


Figura 8 – Comparação da velocidade de chama laminar da mistura ar-etanol e ar metanol, obtida experimentalmente e através do mecanismo C1-C3 para uma temperatura de 343 K e pressão de 1 atm na entrada do combustor. Extraído de Ranzi et al. (2012).

REFERÊNCIAS

- [1] BOHORQUEZ, W. O. I. *Fundamentos de Combustão: Aulas 24, 25 e 28*. Disponível em: http://www.ufjf.br/washington_irrazabal/teaching/mec052-fundamentals-of-combustion/.
- [2] CANTERA. *Cantera Documentation*. Disponível em <https://cantera.org/documentation/index.html>.
- [3] CRECK MODELING. *Complete mechanism, Version 1412, December 2014*. Disponível em <<http://creckmodeling.chem.polimi.it/menu-kinetics/menu-kinetics-detailed-mechanisms/menu-kinetics-complete-mechanism>>.
- [4] CRECK MODELING. *Primary Reference Fuels (PRF) + PAH + Alcohols + Ethers, Version 1412, December 2014*. Disponível em <<http://creckmodeling.chem.polimi.it/menu-kinetics/menu-kinetics-detailed-mechanisms/menu-kinetics-prf-pah-alcohols-ethers-mechanism>>.
- [5] CRECK MODELING. *C1-C3 mechanism, Version 1412, December 2014*. Disponível em <<http://creckmodeling.chem.polimi.it/menu-kinetics/menu-kinetics-detailed-mechanisms/menu-kinetics-c1-c3-mechanism>>.
- [6] EGOLFOPOULOS, F.N.; XHU, D.X.; LAW, C.K.. *Laminar flame speeds of methanol-air at 1 atm 300K*. Combust. Sci. Tech. 83, 33, 1989.
- [7] FRASSOLDATI, A. et al. *Kinetic Modeling of the Oxidation of Ethanol and Gasoline Surrogate Mixtures*. Combustion Science And Technology, [s.l.], v. 182, n. 4-6, p.653-667, 10 jun. 2010. Informa UK Limited.
- [8] GRI-MECH. *What's New in Gri-Mech 3.0*. Disponível em <<http://combustion.berkeley.edu/gri-mech/version30/text30.html>>.
- [9] MATPLOTLIB. *Style sheets reference*. Disponível em <https://matplotlib.org/3.1.0/gallery/style_sheets/style_sheets_reference.html>.
- [10] RANZI, E. et al. *Hierarchical and comparative kinetic modeling of laminar flame speeds of hydrocarbon and oxygenated fuels*. Progress In Energy And Combustion Science, [s.l.], v. 38, n. 4, p.468-501, ago. 2012. Elsevier BV.