



**Universidade Federal de Uberlândia  
Faculdade de Engenharia Mecânica  
Laboratório de Mecânica dos Fluidos**



Laura Pereira de Castro 11721EAR015

**RELATÓRIO PARCIAL DAS ATIVIDADES DA ALUNA DE INICIAÇÃO  
CIENTÍFICA FAU-UFU**

**2019**

## LISTA DE SIMBOLOS

- $C_{\Omega}$  Constante.
- $E_a$  Energia de ativação.
- $R$  Constante do gás ideal.
- $T_b$  Temperatura do gás queimado.
- $T_u$  Temperatura do gás não queimado.
- $\vec{V}$  Vetor de velocidade.
- $\vec{X}$  Vetor de posição.
- $X_e$  Fração mássica da espécie e.
- $\Delta G$  Tamanho do filtro.
- $\Gamma$  Coeficiente de difusão.
- $\Gamma_t$  Coeficiente de difusão turbulenta.
- $\Delta t$  Passo de tempo.
- $\Omega_m$  Frequência de mistura.
- $\omega_{\alpha}$  Taxa de reação química.
- $\Phi$  Vetor de fração mássica.

## I. INTRODUÇÃO

O método de função densidade de probabilidade vem sendo usado desde 1969, quando Ludgreen derivou, modelou e resolveu a equação do transporte para a PDF conjunta de velocidade. Em seguida, entre 1974 e 1976 Dopazo, O'Brien e Pope derivaram, modelaram e resolveram a equação do transporte para a PDF de composição conjunta. Esse método se baseia na análise de certos pontos do fluxo em cada instante, utilizando da estatística para o estimar. No presente trabalho isso foi feito por meio do estudo de partículas lagrangianas.

De acordo com Vedovoto[5], há dois métodos para encontrar as funções de densidade, o primeiro é assumir que a função densidade tenha um formato particular parametrizado pelos momentos iniciais. Contudo é um método pouco preciso quando são levados em conta efeitos químicos complexos. Outro método mais eficiente é obter a PDF conjunta diretamente das suas equações de transporte, método chamado de método da PDF conjunta de composição. No presente trabalho foi escolhido o segundo método visando a oportunidade de posteriormente aplicar mais efeitos químicos.

Foi escolhido usar o modelo de fechamento proposto por Villermaux e Deville[6], conhecido como IEM (interaction by exchange with the mean) ou LMSE (linear mean-square estimation) para modelagem do transporte de escalares no espaço de composições. Esse modelo em casos de mistura molecular se baseia na redução das flutuações escalares, o que remete a tendência instantânea dos escalares à sua média local.

A priori foi desenvolvido um modelo simplificado desconsiderando a combustão, o **modelo sem reação química** e posteriori foi desenvolvido o modelo completo com a cinética química, denominado **modelo completo**. Ademais, foi utilizado o software Cantera[2], que fornecer propriedades termodinâmicas mais precisas de cada espécie química e complementar a cinética química no modelo completo.

## II. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Visando um desenvolvimento competente do projeto, primeiramente foi construída a base teórica acerca do tópico combustão, função densidade e a aplicação dessas na combustão turbulenta. Para isso foi feito o estudo dos seguintes livros e artigos:

- Introdução à combustão: conceitos e aplicações [4]
- Progress in probability density function methods for turbulent reacting flows [3]
- Filtered density function for large eddy simulation of turbulent reacting flows [1]
- Mathematical and numerical modeling of turbulent reactive flows using hybrid LES / PDF methodology [5]
- Cantera: An Object-oriented Software Toolkit for Chemical Kinetics, Thermodynamics, and Transport Processes [2]

## III. METODOLOGIA

### A. Modelo sem reação química

É proposto como volume de controle um cubo de dimensão  $1\text{ m}^3$ , pelo qual entra  $H_2$  pela esquerda e  $O_2$  pela direita com velocidades constantes  $\vec{V}_{H_2}$  e  $\vec{V}_{O_2}$ , respectivamente. Desse modo, a cada instante de tempo é atualizada a posição da partícula é atualizada pela equação 1.

$$\vec{X}^n = \vec{X}^{n-1} + \vec{V} \times \Delta t \quad (1)$$

Para análise da composição de cada partícula, foi criada a variável  $\phi$  foi definida da equação 2, de modo que  $X_i$  é a fração mássica do elemento  $i$  e  $N_s$  é o número de espécies.

$$\phi = \{X_1, X_2, \dots, X_{N_s}\} \quad (2)$$

Utilizando o modelo de fechamento IEM-LMSE chegamos a equação 3, que ao ser discretizada pode ser escrita conforme a equação 4. Sendo  $\omega_\alpha$  a taxa de reação química, que é nula como esse trabalho está analisando apenas a micromistura, e  $\Omega_m$  é a frequência de mistura definida na equação 5, onde  $C_\Omega$  é uma constante,  $\Gamma$  é o coeficiente de difusão,  $\Gamma_t$  é o coeficiente de difusão turbulento e  $\Delta_G$  é o tamanho do filtro.

$$\frac{d\phi}{dt} = -\Omega_m(\phi - \bar{\phi}) + \omega_\alpha \quad (3)$$

$$\phi^n = \phi^{n-1} + (-\Omega_m(\phi^{n-1} - \bar{\phi}^{n-1}) + \omega_\alpha) \times \Delta t \quad (4)$$

$$\Omega_m = \frac{C_\Omega(\Gamma + \Gamma_t)}{\Delta_G^2} \quad (5)$$

A partir da equação 4 e das condições iniciais e dos parâmetros de simulação explicitados em 1 é possível desenvolver um programa computacional conforme mostrado na figura 1.

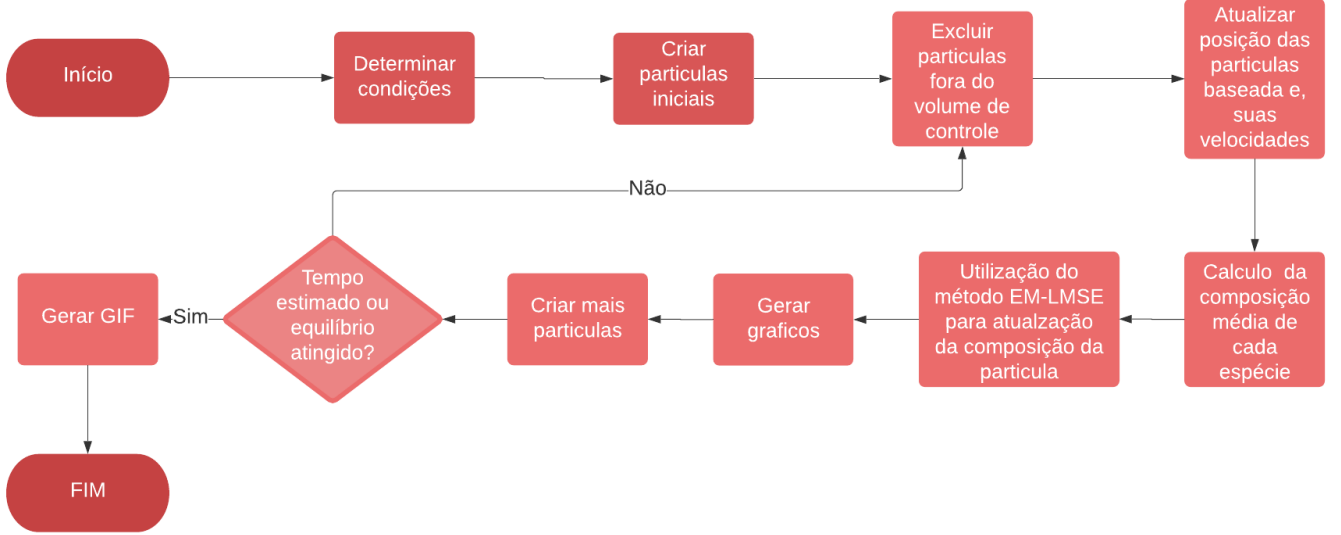


Figura 1: Fluxograma

## B. Modelo Completo

## IV. RESULTADOS

### A. Modelo sem reação química

Para simular o volume de controle foi utilizado os parâmetros indicados na Tabela 1

Parâmetro	Valor
$\Delta t$	0.1 s
$\vec{V}_{H_2}$	$(0, 0, 0.01)m/s$
$\vec{V}_{O_2}$	$(0, 0, -0.01)m/s$
$C_\Omega$	2
$\Delta_G$	0.1
$\Gamma$	0.001
$\Gamma_T$	0.001

Tabela 1: Parâmetros

É possível visualizar o volume de controle em função da composição de  $H_2$  nas figuras ??, ?? e ?? nos instantes  $t=0$  s,  $t=25$  s e  $t=50$  s, respectivamente. Contudo, para uma análise quantitativa também foi analisada a distribuição da composição pelo tempo (PDF) nas figuras ??, ?? e ?? nos instantes  $t=0$  s,  $t=25$  s e  $t=50$  s, respectivamente. Portanto, pode-se perceber que conforme esperado, com o variar do tempo a composição média tanto do  $O_2$  quanto do  $H_2$  tendem a média.

Por fim, é possível analisar a função distribuição acumulada nas figuras ??, ?? e ?? e a função densidade real do problema nas figuras ??, ?? e ??.

### B. Modelo Completo

Para simular o volume de controle foi utilizado os parâmetros indicados na Tabela 2

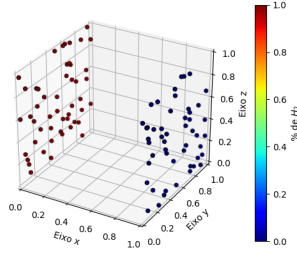


Figura 2: Visualização 3D em t=0 s

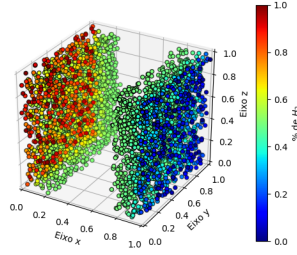


Figura 3: Visualização 3D em t=25 s

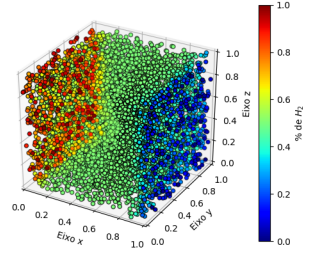


Figura 4: Visualização 3D em t=50 s

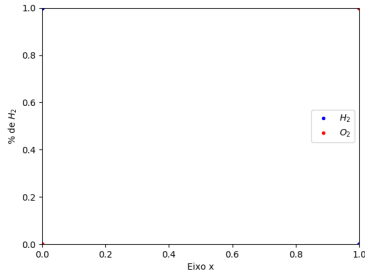


Figura 5: Composição em t=0 s

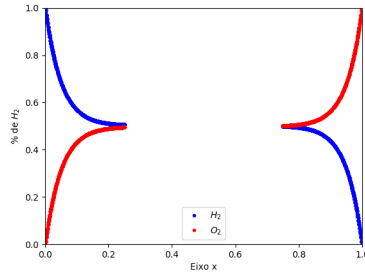


Figura 6: Composição em t=25 s

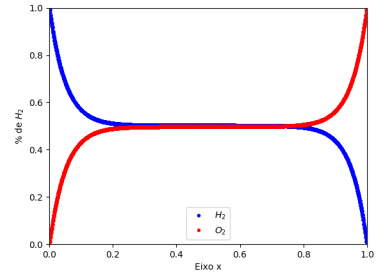


Figura 7: Composição em t=50 s

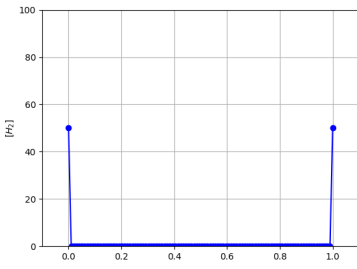


Figura 8: Função CDF em t=0 s

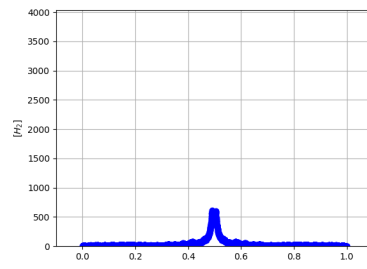


Figura 9: Função CDF em t=25 s

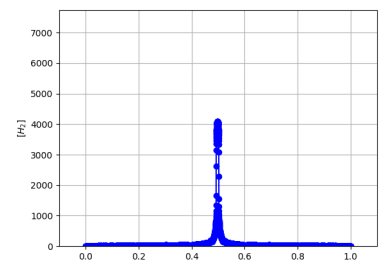


Figura 10: Função CDF em t=50 s

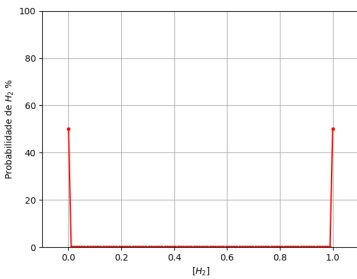


Figura 11: Função PDF em t=0 s

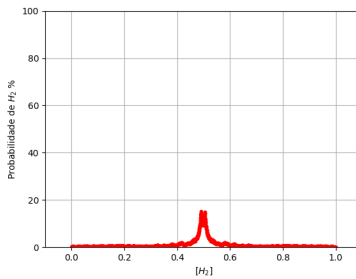


Figura 12: Função PDF em t=25 s

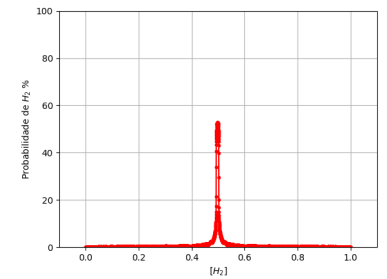


Figura 13: Função PDF em t=50 s

É possível visualizar o volume de controle em função da composição de  $H_2O$  nas figuras 14, 15 e 16 nos instantes t=0 ms, t=1.5 ms e t=3 ms, respectivamente. Contudo, para uma análise quantitativa também foi analisada a distribuição da composição pelo tempo (PDF) nas figuras 17, 18 e 19 nos instantes t=0 ms, t=0.7 ms e t=1.5 ms, respectivamente. Portanto, pode-se perceber que conforme esperado, com o variar do tempo a composição média do  $H_2O$  tendem a 1.

Por fim, é possível analisar a função distribuição acumulada nas figuras 20, 21 e 22 e a função densidade real do problema nas figuras 23, 24 e 25.

Parâmetro	Valor
$\Delta t$	0.0001 s
$\vec{V}$	$(0,0,0)m/s$
$E_a$	83600/9.28
$R$	8.315
$T_u$	560
$T_b$	2000

Tabela 2: Parâmetros

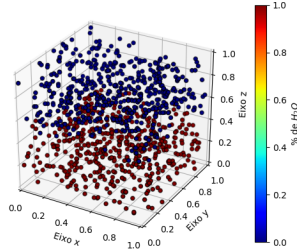


Figura 14: Visualização 3D em t=0 ms

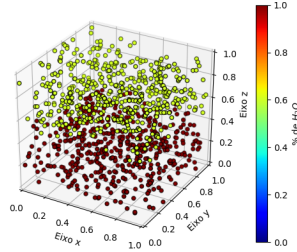


Figura 15: Visualização 3D em t=0.7 ms

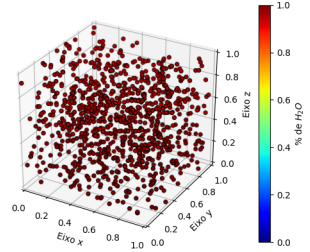


Figura 16: Visualização 3D em t=1.5 ms

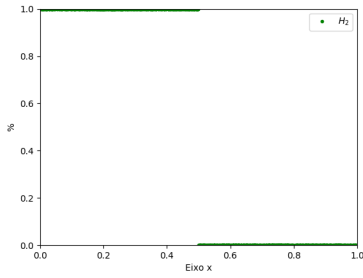


Figura 17: Composição em t=0 ms

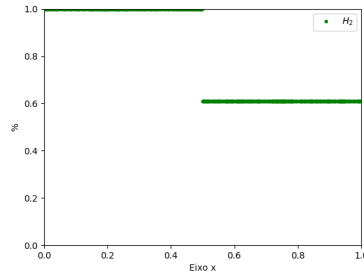


Figura 18: Composição em t=0.7 ms

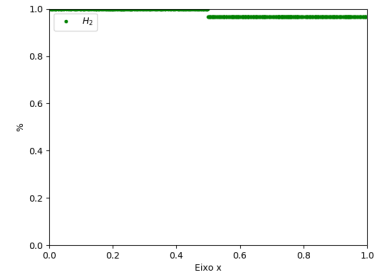


Figura 19: Composição em t=1.5 ms

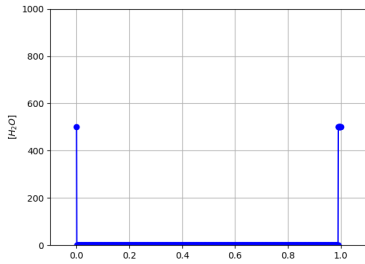


Figura 20: Função CDF em t=0 ms

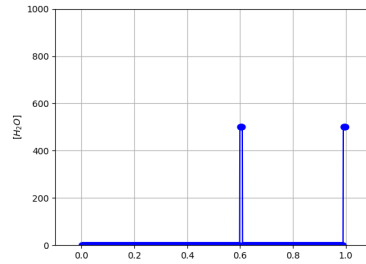


Figura 21: Função CDF em t=0.7 ms

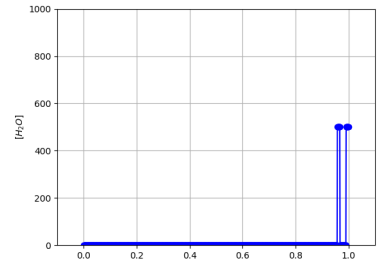


Figura 22: Função CDF em t=1.5 ms

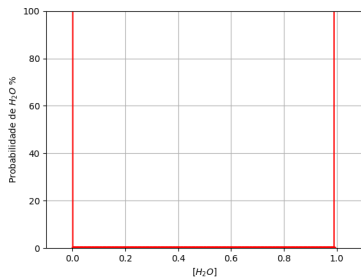


Figura 23: Função PDF em t=0 ms

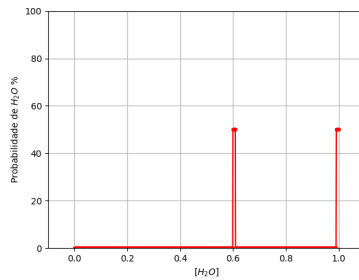


Figura 24: Função PDF em t=0.7 ms

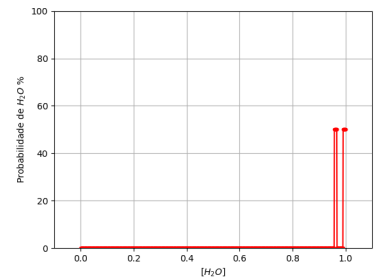


Figura 25: Função PDF em t=1.5 ms

## REFERÊNCIAS

- [1] COLUCCI, P., JABERI, F., GIVI, P., AND POPE, S. Filtered density function for large eddy simulation of turbulent reacting flows. *Physics of Fluids* (1998).
- [2] GOODWIN, D. G., SPETH, R. L., MOFFAT, H. K., AND WEBER, B. W. Cantera: An object-oriented software toolkit for chemical kinetics, thermodynamics, and transport processes. <https://www.cantera.org>, 2018. Version 2.4.0.
- [3] HAWORTH, D. Progress in probability density function methods for turbulent reacting flows. *Progress in Energy and Combustion Science* (2010).
- [4] STEPHEN, T. *Introdução À Combustão: Conceitos e Aplicações*. BOOKMAN COMPANHIA ED, 2013.
- [5] VEDOVOTO, J. M. Mathematical and numerical modeling of turbulent reactive flows using hybrid les / pdf methodology, 2011.
- [6] VILLERMAUX, E., AND DEVILLON, J. C. Representation de la coalescence et de la redispersion des domaines de segregation dans un fluide par un modele d'interaction phenomenologique. *Second International Symposium on Chemical Reaction Engineering* (1972).