

## Simulação numérica do combustor de Mitchell: Efeito da umidade sobre o monóxido de carbono AO XXVIII CREEM

Carlos Eduardo Leite de Oliveira, carloseduardoleite055@gmail.com<sup>1</sup>  
Fabio Alfaia Da Cunha, fabioalfaia@unb.br<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Universidade de Brasília (UnB), Campus Gama - St. Leste Projeção A - Gama Leste, Brasília - DF, 72444-240.

**Resumo.** A finalidade deste artigo é a análise do efeito da umidade sobre o monóxido de carbono na saída do combustor de Mitchell por uma simulação numérica utilizando o método CVFEM (Control Volume Finite Element Method) aplicando um mecanismo cinético detalhado para combustão de metano/ar pelo método GRI-Mech 3.0, utiliza-se o modelo de combustão considerando chamas de difusão laminar e suas determinadas simplificações pelas equações de Navier-Stokes para o caso do experimento de Mitchell. São obtidos os perfis radiais de fração molar do metano ( $CH_4$ ), água ( $H_2O$ ) e monóxido de carbono ( $CO$ ) para diferentes distâncias do centro do combustor de Mitchell. Portanto, é averiguado pelos perfis radiais de frações molares a influência da umidade sobre o monóxido de carbono, validando a simulação realizada.

**Palavras chave:** Combustor de Mitchell. Umidade. Monóxido de carbono. CVFEM.

**Abstract.** The aim of this article is to analyze the effect of humidity on carbon monoxide at the outlet of the Mitchell burner through a numerical simulation using the CVFEM method (Control Volume Finite Element Method) applying a detailed kinetic mechanism for methane/air combustion by the Method GRI-Mech 3.0, the combustion model is used considering laminar diffusion flames and their certain simplifications by the Navier-Stokes equations for the case of the Mitchell experiment. Radial profiles of the mole fraction of methane ( $CH_4$ ), water ( $H_2O$ ) and carbon monoxide ( $CO$ ) are obtained for different distances from the center of the Mitchell combustor. Therefore, the influence of humidity on carbon monoxide is verified by the radial profiles of molar fractions, validating the simulation performed.

**Keywords:** Mitchell burner, Humidity, Carbon monoxide, CVFEM.

### 1. INTRODUÇÃO

A combustão tem um papel primordial na evolução da humanidade, essencial para o que conhecemos hoje da mobilidade humana (em níveis de motores de carros até propulsões aeroespaciais) e em tarefas cotidianas como acender um fogão elétrico. Atualmente, o carvão mineral é a principal fonte de produção de energia elétrica obtida através da combustão, logo o estudo desse fenômeno é de suma importância até para diminuições de poluentes, Turns (2013). Os trabalhos experimentais descritos em Mitchell (1975) e Mitchell *et al.* (1980) é investigado a formação de óxidos de nitrogênio em chamas de difusão laminar axissimétrica. Essas investigações estão sendo referenciadas todos para a combustão metano-ar.

Um dos primeiros estudos tentando descrever de forma numérica os resultados encontrados nos experimentos de Mitchell foi o Smooke *et al.* (1989) que aplica um modelo de diferenças finitas, estudando sistemas de co-fluxo confinados e não confinados, para um modelo de combustão com ênfase na química de taxa finita em uma chama de difusão laminar em um domínio axissimétrico bidimensional, onde, uma corrente cilíndrica de combustível é cercado por um jato de oxidante co-fluindo e, é considerado a difusão na direção axial por um sistema totalmente elíptico que para a época era inovador.

Os queimadores utilizados no experimento de Mitchell definem uma estrutura tridimensional para no mínimo um dos reagentes, ou seja, a modelagem desse sistema utilizando condições de contorno simplificada e uma simplificação para uma configuração axissimétrica bidimensional não consegue descrever na forma adequada esses experimentos. Logo, é apresentado em Cunha e Veras (2021) a descrição do modelo na forma tridimensional utilizando códigos em MATLAB baseado no CVFEM (Control Volume Finite Element Method) para descrever na forma detalhada as condições de contorno de entrada tridimensional e investigar alguns efeitos de parâmetros físicos e químicos em seus sistemas de reações.

Para esse trabalho, é modelado o experimento de Mitchell utilizando fluidodinâmica computacional investigando a influência da umidade sobre o monóxido de carbono na combustão do metano-ar na saída do combustor de Mitchell, tendo em vista que essa propriedade possivelmente é uma das causas do surgimento de fuligem e formação de poluentes para este processo de combustão de chama de difusão laminar.

## 2. MODELO DE COMBUSTÃO

O modelo de combustão envolve o cálculo do escoamento laminar a partir das equações de Navier-Stokes, o cálculo da composição da mistura de gases a partir de equações de conservação de espécies químicas e o cálculo das temperaturas a partir da entalpia e da composição da mistura de gases. As equações de conservação da massa Eq. (1), de Navier-Stokes (2), o cálculo da composição da mistura de gases a partir de equações de conservação de espécies químicas Eqs. (3) e (4) e o cálculo das temperaturas a partir da entalpia e da composição da mistura de gases Eq. (5).

Como o cálculo do número de Reynolds no processo de combustão é variável, tendo em vista que na reação química entre o combustível e o oxidante existe a variação deste valor durante o processo. Contudo, foi verificado pelo experimentalista Mitchell (1975) que o comportamento da chama durante a combustão é de um fenômeno de escoamento laminar.

O escoamento laminar de um fluido newtoniano foi calculado pelas equações de Navier-Stokes, dadas para este caso específico pela equação de conservação da massa Eq. (1) e pela equação de conservação da quantidade de movimento Eq. (2).

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

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

Onde  $\mathbf{u}$  é o vetor velocidade,  $p$  é a pressão,  $\rho$  é a massa específica,  $\mu$  é a viscosidade dinâmica,  $g$  é a aceleração da gravidade e o termo  $(\rho - \rho_\infty) g$  contabiliza o efeito das forças de empuxo sobre o escoamento.

A composição da mistura de gases foi calculada pelas equações de conservação de espécies químicas, Eq. (3), a fração de massa da espécie química “ $n$ ” foi calculada pela restrição  $\sum_{k=1}^n Y_k = 1$  e as espécies químicas de 1 até “ $n - 1$ ” são determinadas pela Eq. (3).

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho Y_k) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} Y_k) = -\nabla \cdot \mathbf{J}_k + R_k, k = 1, \dots, n - 1 \quad (3)$$

A taxa de produção líquida de cada espécie é avaliada a partir da Eq. (4), que necessita de um mecanismo de reação química para ser explicitada. As difusões ordinária e térmica foram usadas para descrever o fluxo de difusão:  $\mathbf{J}_k = \mathbf{J}_{od} + \mathbf{J}_{td}$ . A difusão ordinária resulta de gradientes de concentração e foi aproximada como (Turns, 2013):  $\mathbf{J}_{od} = -\rho D_{k,m} \nabla Y_k$ , onde  $D_{k,m}$  é o coeficiente de difusão binário efetivo para espécies na mistura. A difusão térmica resulta de gradientes de temperatura e foi aproximada como Turns (2013):  $\mathbf{J}_{td} = -(D_{k,T}) \nabla T$ , onde  $T$  é a temperatura e  $D_{k,T}$  é o coeficiente de difusão térmica.

$$\mathbf{R}_k = \mathbf{W}_k \sum_{j=1}^{n_R} \left[ \mathbf{C}_{m,j} (\mathbf{v}''_{k,j} - \mathbf{v}'_{k,j}) \left( \mathbf{k}_{f,j} \prod_{k=1}^n \mathbf{C}_k^{\mathbf{v}'_{k,j}} - \mathbf{k}_{r,j} \prod_{k=1}^n \mathbf{C}_k^{\mathbf{v}''_{k,j}} \right) \right] \quad (4)$$

Em que  $W_k$  é o peso molecular da espécie  $k$ ,  $n$  é o número total de espécies químicas,  $n_R$  é o número de reações químicas,  $C_k$  é a concentração molar da espécie  $k$  e  $C_{m,j}$  é o efeito de um terceiro corpo na reação  $j$ . Os termos  $v'_{k,j}$  e  $v''_{k,j}$  são os coeficientes estequiométricos na reação  $j$ . Os termos  $k_{f,j}$  e  $k_{r,j}$  são as constantes de taxa das reações direta e reversa  $j$  respectivamente.

A taxa de produção líquida de cada espécie pode ser avaliada com mecanismos de reação globais ou detalhados. Nas simulações que utilizam mecanismos globais de passo único as temperaturas preditas geralmente são maiores que da chama adiabática, pois a oxidação do combustível resulta diretamente em  $CO_2$  e  $H_2O$  Turns (2013). Para melhorar os cálculos, a oxidação parcial de  $CH_4$  pode ser considerada, resultando em  $CO$  e  $H_2$ , o que está de acordo com o observado experimentalmente em chamas de hidrocarbonetos, onde grandes quantidades de  $CO$  e  $H_2$  podem existir em equilíbrio com  $CO_2$  e  $H_2O$  Law (2006). Em tal cálculo, a taxa de oxidação de  $CO$  é colocada em função da concentração de  $H_2O$ , isto porque a maioria do  $CO$  é consumida por  $OH$  que, como primeira aproximação, pode ser assumido em equilíbrio com  $H_2O$  Jones e Lindstedt (1988). A grande vantagem dos mecanismos de reação globais é o número reduzido de espécies químicas e passos de reação, porém, os resultados obtidos de tais mecanismos são aproximações geralmente qualitativas. Predições quantitativas requerem mecanismos de reação detalhados. Face ao exposto, visando precisão nas predições, as taxas de reação  $R_k$  foram calculadas com base no mecanismo de reação GRI-Mech 3.0, composto por 53 espécies e 325 reações.

As temperaturas foram calculadas a partir das espécies químicas e da entalpia absoluta. A equação de conservação de energia foi escrita em termos de entalpia absoluta para evitar um termo fonte da reação química, Eq. (5). A entalpia absoluta é a soma de uma entalpia que leva em conta a energia associada às ligações químicas e uma entalpia que está associada apenas à temperatura Turns (2013).

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho h) + \nabla \cdot \left( \rho \mathbf{u} h + \sum_{k=1}^n \mathbf{J}_k h_k \right) = \nabla \cdot \left( \frac{k_g}{c_p} \nabla h \right) + \nabla q_{rad} \quad (5)$$

Onde  $k_g$  é a condutividade térmica,  $c_p$  é o calor específico a pressão constante e  $\sum_{k=1}^n \mathbf{J}_k h_k$  representa o transporte de entalpia devido à difusão de espécies. O termo  $\nabla q_{rad}$  estima as perdas de calor devido à radiação, com base na aproximação opticamente fina Barlow *et al.* (2001). Os efeitos de absorção térmica não foram considerados e a emissão devido à radiação foi considerada somente para as espécies  $CH_4$ ,  $CO$ ,  $CO_2$  e  $H_2O$ .

## 2.1 Propriedades termofísicas

A massa específica calculada a partir da equação de estado do gás ideal em função da temperatura e do peso molecular da mistura:

$$\rho = p_0 W_{mix} / (R_u T) \quad (6)$$

Onde  $W_{mix} = 1 / \sum_{k=1}^n (Y_k / W_k)$ ,  $p_0$  é a pressão e  $R_u$  é a constante do gás ideal ( $= 8314 \text{ J/kmol K}$ ).

As dependências do calor específico a pressão constante de cada espécie  $k$  com a temperatura foram calculadas com polinômios, com coeficientes obtidos em Smith *et al.* (2019b). O calor específico a pressão constante da mistura de gases foi calculado pela Eq. (7).

$$c_p = \sum_{k=1}^n Y_k \bar{c}_{p,k} / W_k \quad (7)$$

A viscosidade ( $kg/m \cdot s$ ) e a condutividade térmica ( $W/m \cdot K$ ) de um componente puro são calculadas pelas Eqs. (8) e (9), respectivamente. A viscosidade e a condutividade térmica da mistura de gases são calculadas pelas Eqs. (10) e (11), respectivamente Bird *et al.* (2001).

$$\mu_k = 2,6693 \times 10^{-6} (W_k T)^{1/2} / (\sigma_k^2 \Omega_{\mu,k}) \quad (8)$$

$$k_k = (\bar{c}_{p,k} + 5R_u/4) (\mu_k / MW_k) \quad (9)$$

$$\mu = \sum_{k=1}^n X_k \mu_k / \left( \sum_{j=1}^n X_j \Theta_{kj} \right) \quad (10)$$

$$k = \sum_{k=1}^n X_k k_k / \left( \sum_{j=1}^n X_j \Theta_{kj} \right) \quad (11)$$

Em que,  $\Theta_{kj} = 8^{-1/2} (1 + W_k/W_j)^{-1/2} \left[ 1 + (\mu_k/\mu_j)^{1/2} (W_j/W_k)^{1/4} \right]^2$ ;  $X_k$ ,  $\sigma_k$  e  $\Omega_{\mu,k}$  são fração molar, diâmetro de colisão e integral de colisão para a viscosidade para uma espécie  $k$ , respectivamente.

O coeficiente de difusão binário efetivo foi calculado pela Eq. (12) e o coeficiente de difusão binário foi calculado pela Eq. (13) dado por Bird *et al.* (2001).

$$D_{k,m} = (1 - X_k) / \left( \sum_{j=1, j \neq k}^n X_j / D_{kj} \right) \quad (12)$$

$$D_{kj} = 1,8583 \times 10^{-7} \left[ T^{3/2} (1/W_k + 1/W_j)^{1/2} \right] / (p_{atm} \sigma_{kj}^2 \Omega_{D,kj}) \quad (13)$$

Onde  $\Omega_{D,kj}$  é uma integral de colisão,  $\sigma_{kj}$  é um diâmetro de colisão e  $p_{atm}$  é a pressão em atmosferas.

## 2.2 Código de fluidodinâmica computacional

Um código computacional de fluidodinâmica computacional foi desenvolvido na linguagem do software MATLAB para realização das simulações. O código foi projetado para resolver um escalar genérico conservado  $\phi$ . A equação geral de conservação, para um campo 2D, é dada por:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \phi) + \frac{\partial}{\partial z} (\rho u \phi) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \rho v \phi) = \frac{\partial}{\partial z} \left( \Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial z} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial r} \right) + S_\phi \quad (14)$$

Onde  $\rho$  é a massa específica,  $\Gamma_\phi$  é um coeficiente de difusão,  $u$  e  $v$  são as componentes do vetor velocidade  $\mathbf{u}$  nas direções  $-z$  e  $-r$  respectivamente.

Na Tabela 1 são apresentados os escalares considerados nas simulações. O código principal é suportado por um conjunto de rotinas para calcular o campo de velocidade, frações de massa e propriedades termofísicas. Devido à natureza

Tabela 1. Escalar conservado e outros termos principais na Eq. (14).

Equação	$\phi$	$\Gamma_\phi$	$S_\phi$
Continuidade	1	0	0
Componente de velocidade-Z	$u$	$\mu$	$\partial p / \partial z + (\rho - \rho_\infty) g$
Componente de velocidade-R	$v$	$\mu$	$\partial p / \partial r - \mu v / r^2$
Energia-FRM	$h$	$k_g / c_p$	$\nabla q_{rad} - \nabla \cdot \sum_{k=1}^n \mathbf{J}_k h_k$
Fração de massa	$Y_k$	$\rho D_{km}$	$\nabla \cdot [(D_{T,k} / T) \nabla T]$

do fenômeno sob investigação, as condições de contorno são de dois tipos:  $\phi$  prescritos nos contornos, ou seu fluxo é assumido nulo na direção normal à face ( $\frac{\partial \phi}{\partial n} = 0$ ).

Discretização da Eq. geral (14) foi baseada no CVFEM (*Control Volume Finite Element Method*), seguindo os passos sugeridos em ((Saabas e Baliga (1994), Masson *et al.* (1994), Cunha (2010) e Cunha e Veras (2021)). O CVFEM é baseado em uma abordagem de malha dupla, na qual uma malha não estruturada de elementos triangulares é utilizada para discretizar o domínio geométrico e a segunda malha, baseada em volumes de controle poligonais, é empregada na discretização das equações diferenciais. Um esquema de interpolação linear foi utilizado para discretização do termo de difusão. O esquema *Flow-Oriented upwind* de convergência rápida sugerido por Cunha e Veras (2021) foi utilizado para a discretização dos termos de advecção. Os termos fonte foram aproximados por integração de ponto único. O método de Euler foi usado para aproximar o termo transiente, usando o passo de tempo  $\Delta t$  para avançar a solução de  $\phi^0$  até  $\phi$ .

### 3. CASO DE SIMULAÇÃO

O experimento de Mitchell foi projetado para coletar as informações de propriedades físicas e químicas para uma chama de difusão laminar fechada, constante e atmosférica para a combustão do metano. É apresentado na Fig. 1 um desenho esquemático que consiste no confinamento da chama laminar em uma câmara cilíndrica com o material feito de vidro pyrex, contendo dois tubos concêntricos que faz a passagem do combustível e oxidante, que para o caso é o metano e o ar, é utilizado uma placa de bronze com diversos furos para a realizar a emissão dos reagentes. Como descrito anteriormente, o combustível (metano) e o oxidante (ar) são inseridos no combustor por placas perfuradas contendo uma distribuição concêntrica.

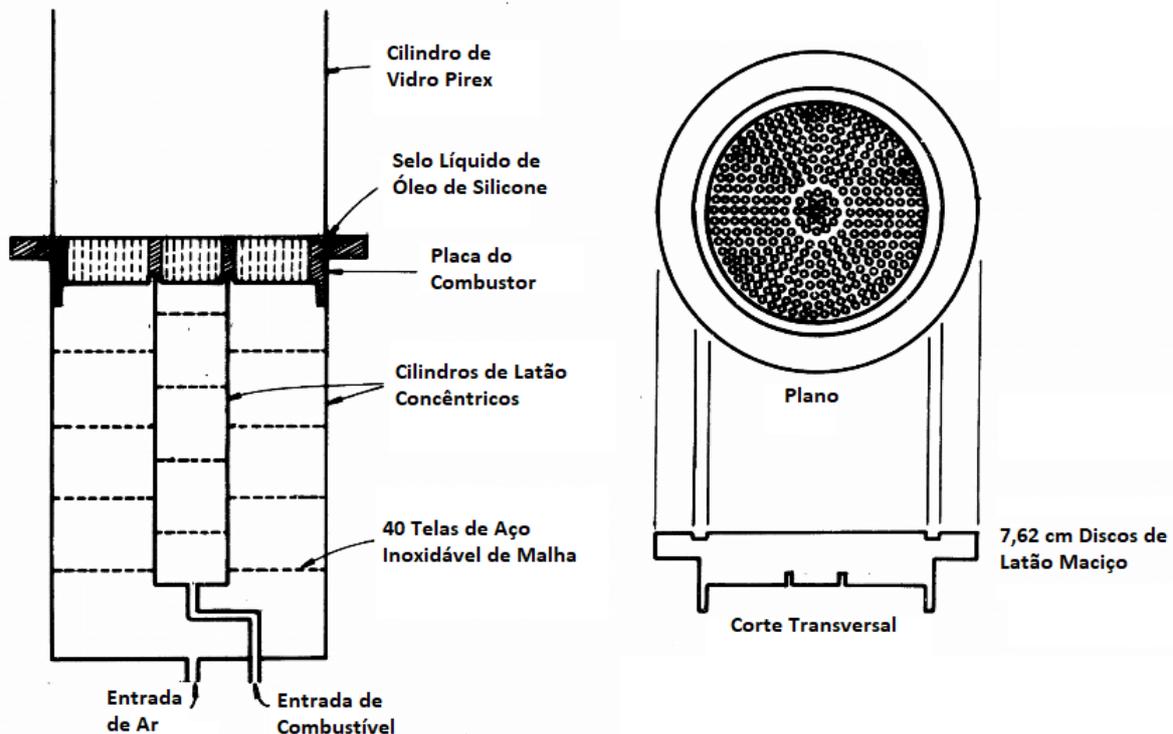


Figura 1. Esquemático do combustor de Mitchell. Adaptado de Mitchell (1975), reproduzida com permissão.

O domínio da simulação em 2D é apresentado na Fig. 2 onde é descrita a geometria do combustor de Mitchell fazendo as devidas aproximações com suas condições de contorno exemplificadas.

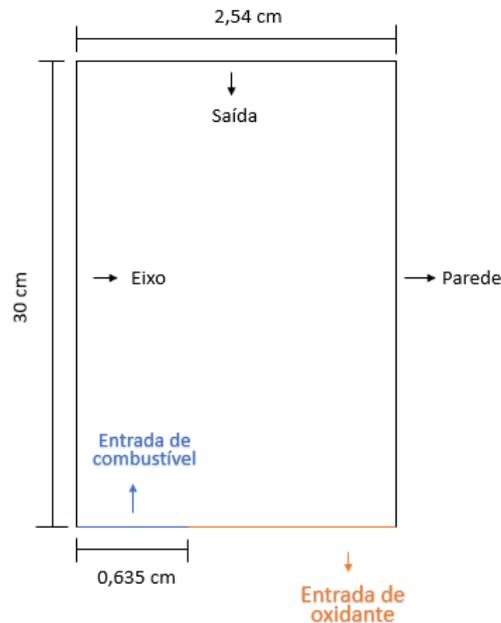


Figura 2. Domínio da simulação.

Na representação dos furos que existem na placa do combustor de Mitchell, descreve-se como entradas contínuas, tanto para a entrada do combustível como para a entrada do oxidante, representado na Fig. 1. Para o estudo da combustão a mistura de reagentes e produtos é de interesse neste estudo, logo um conceito bastante utilizado é da estequiometria. Logo, a quantidade estequiométrica de oxidante é simplesmente a quantidade necessária para queimar completamente certa quantidade de combustível. Se uma quantidade de oxidante maior do que a estequiométrica é fornecida, diz-se que a mistura é pobre em combustível (ou pobre); para fornecer uma quantidade de oxidante menor que a estequiométrica resulta em uma mistura rica em combustível (ou rica).

A razão estequiométrica oxidante-combustível, ou ar-combustível, é determinada por um balanço atômico, supondo que o combustível reage para formar um conjunto ideal de produtos Turns (2013).

No experimento de Mitchell apresentado em Mitchell (1975) é observado que existe uma infiltração de umidade na saída do combustor, ou seja, nos perfis de concentração de vapor de água assintotas que foram encontrados há porcentagens dessas concentrações na superfície do combustor, foi mostrado que isso ocorre devido ao fato que o ar úmido foi arrastado para a saída da blindagem do vidro pyrex. Para essa verificação e medição experimental do experimento de Mitchell (1975) é comentado que o teor de umidade do ar, área do combustor não foi medido. Assim, os produtos da combustão foram esgotados no laboratório, portanto, a concentração de água do ar na área de teste foi maior do que nas demais regiões do laboratório. Com isso, a partir de algumas propriedades medidas no laboratório foi estimada uma concentração máxima de água no ar de  $3,36 \text{ mol}$  por cento. Para alturas acima da superfície do combustor iguais e superiores a cinco centímetros, a sonda de amostragem estava dentro da célula de recirculação para distâncias superiores a  $1,25 \text{ cm}$  do eixo simétrico. O valor assintótico de  $2,8 \text{ mol}$  por cento do perfil de concentração de vapor de água é, portanto, indicativo do teor de umidade do ar incorporado.

Logo, é descrito que existe uma entrada de umidade na saída do combustor e com isso vai ocorrer influências nos resultados experimentais, ou seja, uma análise do efeito da umidade sobre o monóxido de carbono e de suma importância para este caso estudado.

De acordo com Flagan e Seinfeld (1988) a modelagem das reações de combustão é representar um processo por pequenos números de reações artificiais, cada uma das quais descrevendo os resultados de uma série de etapas fundamentais da reação, essa é uma das maneiras de fazer essa modelagem, chamado de mecanismos globais que reduzem muito a complexidade dos cálculos da cinética química, entretanto, para espécies menores, os mecanismos globais simplificados, podem não conter detalhes químicos suficientes para descrever as etapas de formação de poluentes.

Para uma modelagem adequada das reações de combustão para a nossa análise que busca verificar a influência da umidade sobre o monóxido de carbono na saída do combustor do experimento de Mitchell é utilizado o método GRI-Mech 3.0 que é basicamente um mecanismo cinético detalhado para combustão de metano/ar para modelar a combustão de gás natural, incluindo espécies nítricas para previsões de  $NO_x$  com 53 espécies e 325 reações Smith *et al.* (2019a).

Como mencionado anteriormente, esse método é bem apropriado para fazer a análise da influência da umidade sobre o monóxido de carbono.

#### 4. RESULTADOS E DISCUSSÕES

Os resultados das simulações são confrontados a dados experimentais obtidos de tabelas e gráficos de Mitchell (1975). Foi assumido na simulação que o combustível era  $CH_4$  puro, porém, o trabalho experimental só assegurava uma pureza de 98%. Foi relatado em Mitchell (1975) que ar úmido era arrastado para dentro do combustor, mas uma quantidade precisa de  $H_2O$  não foi relatada, por isso ar seco foi considerado em uma das simulações, chamada de “Simulação (ar seco)”, cuja composição é dada por  $Y_{O_2} = 0,2315$ ,  $Y_{N_2} = 0,7556$  e  $Y_{AR} = 0,0129$ . Em uma segunda, chamada de “Simulação (ar úmido)”, admitiu-se que a composição do ar admitido para o interior do combustor era igual a  $Y_{H_2O} = 0,025$ ,  $Y_{O_2} = 0,2257$ ,  $Y_{N_2} = 0,7367$  e  $Y_{AR} = 0,0126$ . A entrada de ar úmido a partir da saída do combustor teria sido mais realista, mas não foi adotada neste estudo porque o tempo da simulação ficaria extremamente grande. Os fatos citados são possíveis fontes de diferenças entre as predições e os dados experimentais de Mitchell (1975). Para essa primeira simulação numérica utilizou-se  $\Delta t = 10^{-4} s$ ,  $\Delta t_R = \Delta t/25000$  e  $tol = 10^{-5}$ . As simulações foram realizadas em um computador desktop com processador Intel® Core™ i7-6700k, memória DDR4 de 64 GB, SSD de 480 GB e sistema operacional Windows 10 Pro de 64 bits.

Perfis radiais de fração molar são apresentados na Fig. 3. Para  $Z = 1,2 cm$ , a fração molar de  $CH_4$  reduziu do valor máximo no centro do combustor para quase zero na posição próxima a chama e a fração molar de  $O_2$  foi do valor na corrente livre para quase zero nas proximidades da chama. As predições aproximaram muito bem as frações molares de  $O_2$  e  $CH_4$  nas três posições em  $Z$ . As predições dos perfis radiais de fração molar de  $O_2$  foram acertadas.

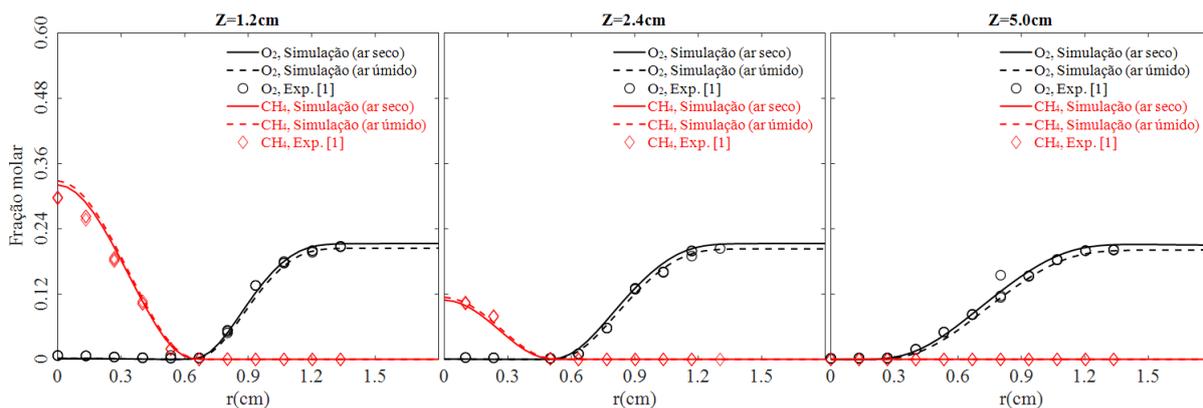


Figura 3. Perfis radiais de fração molar de  $O_2$  e  $CH_4$ .

As frações molares de  $CO_2$  e  $H_2O$  obtidas por simulação concordaram razoavelmente com os dados experimentais, conforme figura a seguir. As frações molares de  $CO_2$  foram bem preditas pela simulação na parte externa a chama e razoavelmente aproximadas na parte interna. A fração molar de  $CO_2$  no centro do combustor foi subestimada pela simulação. Em  $Z = 1,2 cm$  e  $Z = 2,4 cm$  são observadas boas concordâncias entre as predições e os dados experimentais para fração molar de  $H_2O$ , porém, para  $Z = 5,0 cm$  a fração molar de  $H_2O$  foi razoavelmente predita na parte interna da chama e subestimada na parte externa da chama, tal fato reforça a presença de umidade no oxidante, que segundo Mitchell (1975) era ocasionada pelo arrasto de ar úmido do laboratório para o interior do combustor.

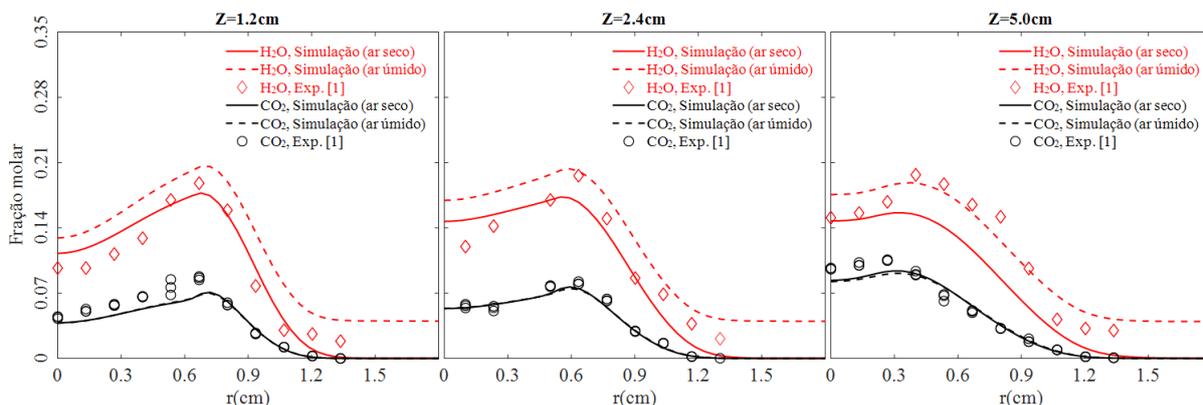


Figura 4. Perfis radiais de fração molar de  $CO_2$  e  $H_2O$ .

Perfis de fração molar de  $CO$  e  $H_2$  também são apresentados. A simulação com ar úmido aproximou mais a fração molar de  $CO$  experimental porque a reação  $CO + OH \leftrightarrow CO_2 + H$  é dominante no mecanismo de reação de  $CO$  e o radical  $OH$  extra necessário para o consumo de  $CO$  vem do  $H_2O$  do ar de oxidação.

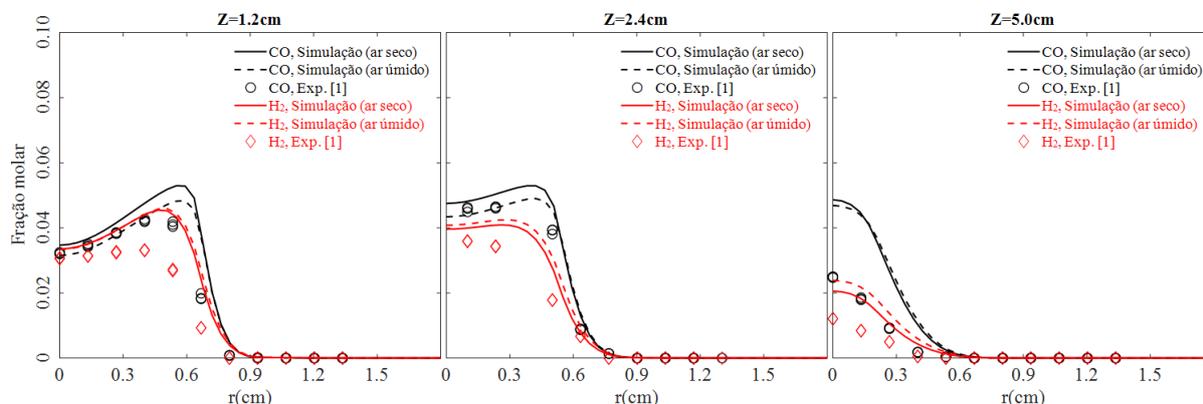


Figura 5. Perfis radiais de fração molar de  $CO$  e  $H_2$ .

## 5. CONCLUSÃO

Com os resultados obtidos é visível a melhora na concordância dos dados experimentais de Mitchell com a simulação, tendo em vista que a consideração da umidade faz uma diferença perceptível nos perfis radiais de frações molares, considerando o "ar úmido" e "ar seco" entrando no combustor em praticamente todos os casos com o acréscimo da umidade os resultados têm uma concordância bastante significativa com os dados experimentais, assim é validada a simulação realizada. Para trabalhos futuros a consideração do ar úmido entrando na saída do combustor será obtida uma maior aproximação com a realidade e conseqüentemente uma melhor concordância com os resultados.

## 6. REFERÊNCIAS

- Barlow, R.S., Karpetis, A.N., Frank, J.H. and Chen, J.Y., 2001. "Scalar profiles and NO formation in laminar opposed-flow partially premixed methane/air flames". *Combust. Flame*, Vol. , No. 127, pp. 2102–2118.
- Bird, R.B., Stewart, W.E. and Lightfoot, E.N., 2001. *Transport phenomena*. John Wiley & Sons, , second edition edition.
- Cunha, F.A., 2010. *Modelo matemático para estudo de processos reativos de partículas de carvão e biomassa*. Ph.D. thesis, in Mechanical Sciences, University of Brasília, Brazil.
- Cunha, F.A. and Veras, C.A.G., 2021. "Modelling laminar diffusion flames using a fast convergence three-dimensional cvfem code". *Combust. Theor. Model*, Vol. 25, No. 3, p. 460–487.
- Flagan, R.C. and Seinfeld, J.H., 1988. *Fundamentals of air pollution engineering*. PRENTICE HALL Englewood Cliffs, California Institute of Technology, edition.
- Jones, W.P. and Lindstedt, R.P., 1988. "Global reaction schemes for hydrocarbon combustion". *Combust. Flame*, Vol. , No. 73, p. 233–249.
- Law, C.K., 2006. *Combustion Physics*. Cambridge University Press, New York, edition.
- Masson, C., Saabas, H. and Baliga, B., 1994. "Co-located equal-order control-volume finite element method for two-dimensional axisymmetric incompressible fluid flow". *Int. J. Numer. Methods in Fluids*, Vol. 18, No. , pp. 1–26.
- Mitchell, R.E., Sarofim, A.F. and Clomberg, L.A., 1980. "Experimental and numerical investigation of confined laminar diffusion flames". *Combust. Flame*, Vol. , No. 37, pp. 227–244.
- Mitchell, R.E., 1975. *Nitrogen oxide formation in laminar methane-air diffusion flames*. Ph.D. thesis, MIT, USA.
- Saabas, H.J. and Baliga, B.R., 1994. "Co-located equal-order control-volume finite-element method for multidimensional, incompressible, fluid flow – part i: formulation". *Numer. Heat Trans. B*, Vol. , No. 26, pp. 381–407.
- Smith, G.P., Golden, D.M., Frenklach, M., Moriarty, N.W., Eiteneer, B., Goldenberg, M., Bowman, C.T., Hanson, R.K., Song, S., Gardiner, W.C., Jr., Lissianski, V.V. and Qin, Z., 2019a. "An optimized detailed chemical reaction mechanism for methane combustion". <[http://www.me.berkeley.edu/gri\\_mech/](http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/)>.
- Smith, G.P., Golden, D.M., Frenklach, M., Moriarty, N.W., Eiteneer, B., Goldenberg, M., Bowman, C.T., Hanson, R.K., Song, S., Jr., W.C.G., Lissianski, V.V. and Qin, Z., 2019b. "An optimized detailed chemical reaction mechanism for methane combustion". <[http://www.me.berkeley.edu/gri\\_mech/](http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/)>.
- Smooke, M.D., Mitchell, R.E. and Keyes, D.E., 1989. "Numerical solution of two-dimensional axisymmetric laminar diffusion flames". *Combust. Sci. and Tech.*, Vol. , No. 67, pp. 85–122.
- Turns, S.R., 2013. *Introdução à Combustão: Conceitos e Aplicações*. AMGH Editora, , 3rd edition.