



**UNIVERSIDADE FEDERAL DO CEARÁ**  
**CENTRO DE TECNOLOGIA**  
**DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA MECÂNICA**  
**CURSO DE GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA**

**HELTON CARLOS MARQUES SAMPAIO**

**ANÁLISE DA INFLUÊNCIA DE MODELOS DE TURBULÊNCIA E DE CINÉTICA  
QUÍMICA NA SIMULAÇÃO DE UMA CHAMA DE HIDROGÊNIO**

**FORTALEZA**

**2023**

HELTON CARLOS MARQUES SAMPAIO

ANÁLISE DA INFLUÊNCIA DE MODELOS DE TURBULÊNCIA E DE CINÉTICA  
QUÍMICA NA SIMULAÇÃO DE UMA CHAMA DE HIDROGÊNIO

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado ao  
Curso de Graduação em Engenharia Mecânica do  
Centro de Tecnologia da Universidade Federal do  
Ceará, como requisito parcial à obtenção do título  
de Engenheiro Mecânico  
Orientador: Prof. Dr. André Valente Bueno

FORTALEZA

2023

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação  
Universidade Federal do Ceará  
Sistema de Bibliotecas  
Gerada automaticamente pelo módulo Catalog, mediante os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

---

- S183a Sampaio, Helton Carlos Marques.  
ANÁLISE DA INFLUÊNCIA DE MODELOS DE TURBULÊNCIA E DE CINÉTICA QUÍMICA NA  
SIMULAÇÃO DE UMA CHAMA DE HIDROGÊNIO / Helton Carlos Marques Sampaio. – 2023.  
50 f. : il. color.
- Trabalho de Conclusão de Curso (graduação) – Universidade Federal do Ceará, Centro de Tecnologia,  
Curso de Engenharia Mecânica, Fortaleza, 2023.  
Orientação: Prof. Dr. André Valente Bueno.
1. Combustão. 2. Dinâmica dos fluidos computacional. 3. Emissões. 4. Chamas difusivas. I. Título.  
CDD 620.1
-

HELTON CARLOS MARQUES SAMPAIO

ANÁLISE DA INFLUÊNCIA DE MODELOS DE TURBULÊNCIA E DE CINÉTICA  
QUÍMICA NA SIMULAÇÃO DE UMA CHAMA DE HIDROGÊNIO

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado ao  
Curso de Graduação em Engenharia Mecânica  
do Centro de Tecnologia da Universidade  
Federal do Ceará, como requisito parcial à  
obtenção do título de Engenheiro Mecânico

Aprovada em:

BANCA EXAMINADORA

---

Prof. Dr. André Valente Bueno (Orientador)  
Universidade Federal do Ceará (UFC)

---

Prof<sup>ª</sup>. Dra. Carla Freitas de Andrade  
Universidade Federal do Ceará (UFC)

---

Prof. Dr. Paulo Alexandre Costa Rocha  
Universidade Federal do Ceará (UFC)

A todos os envolvidos, pelo apoio e confiança.

## AGRADECIMENTOS

A todos os integrantes do Laboratório de Hidrogênio Verde e Máquinas Térmicas, pois estar ao redor de pessoas que influenciaram meu crescimento nos âmbitos acadêmico e pessoal foi essencial para a realização deste trabalho.

Ao professor André Valente Bueno, pelo apoio e orientação.

Aos membros do programa de mestrado, Renno, Claudécir e Elmo, pelos ensinamentos, pela parceria, incentivo e amizade.

Aos demais membros do laboratório, pelas trocas de ideias e pelo bom gosto na escolha de cafés.

Ao Sr. Laércio, por me ensinar que sempre há mais trabalho, sempre mais pesado, a ser feito.

Agradeço também a todos os meus amigos, uma lista grande para citar todos os nomes (o que não me impede de citar alguns). A todos de Ocara e aos que fiz ao mudar para Fortaleza, por compartilharem comigo parte de suas vidas, verdadeiros tesouros, que me motivam a buscar o melhor. Por realmente estarem ao meu lado quando precisei. Tom, Hugo, Natália, Alexandre, Lenildo, Levi, Mariah, Juan, Gustavo, Ítalo, Bruno... sou grato pela felicidade que sinto só de pensar no nome de cada um de vocês.

À minha companheira, Maria Thayná, por todo apoio e paciência com um cabra exausto que nem eu durante a escrita deste trabalho. Por me mostrar que não desaprendi a rir durante esse caos que é a vida, o que dá gosto aos trabalhos árduos. Que coisa boa é ser apaixonado por uma grande amiga!

Ao meu pai, Hernande, por sempre enfatizar a importância do conhecimento, agora acho que só paro quando... não paro.

Aos meus irmãos e irmã, Vevé, Nandim e Herliana, que caminhos legais os que vocês trilham! É impossível não querer fazer o melhor sendo o irmão mais velho da galera mais competente e esforçada que conheço.

Ao meu irmão, Jorge, por viver toda a vida ao meu lado, não cabe em palavras o quanto o amo.

Por fim, agradeço especialmente a duas mulheres: Betiza e Rosa, por serem as pessoas mais incríveis que já conheci em toda minha vida.

## RESUMO

Em um cenário econômico da crescente do gás hidrogênio na matriz energética mundial como uma das medidas para mitigar os avanços da crise climática relativa ao uso de combustíveis fósseis, o Brasil se mostra um potencial produtor em escala desta fonte. A realização de uma análise computacional de uma chama difusiva de hidrogênio se mostra essencial para desenvolvimento e otimização de projetos. Dentre os diversos parâmetros envolvidos em uma simulação computacional de combustão, os modelos de turbulência e de cinética química se mostram essenciais para a predição do comportamento da chama em relação às taxas de emissão de espécies e temperatura média. Este trabalho visa analisar a influência de modelos de cinética química que variam em nível de complexidade e de modelos de turbulência que apresentam diferentes abordagens matemáticas por meio do *software* ANSYS-Fluent para predição do perfil axial de emissões e temperatura com uma chama difusiva turbulenta de gás hidrogênio,  $H_2$ . Os mecanismos GRI Mech 3.0 e de Conaire *et al.* (2004) foram comparados em conjunto com os modelos de turbulência  $k - \omega$  SST e  $k - \epsilon$  padrão. Uma malha hexaédrica não estruturada foi utilizada para a realização das simulações. Para ambos os mecanismos, os resultados para os modelos de turbulência indicam desempenhos divididos, com o  $k - \omega$  SST com melhores resultados nas curvas de  $O_2$  em geral e nas curvas de  $H_2O$  e Temperatura normalizada a partir do ponto  $z/d = 100$ . O modelo  $k - \epsilon$  teve melhor aproximação em geral nas curvas de  $N_2$ ,  $OH$ . Em geral, todas as configurações utilizadas superestimaram os valores de geração/consumo de espécies e de temperatura.

**Palavras-chave:** Combustão. Dinâmica dos fluidos computacional. Emissões. Chamas difusivas

## ABSTRACT

In an economic scenario characterized by the increasing adoption of hydrogen gas in the global energy matrix as one of the strategies to mitigate the advances of the climate crisis related to the use of fossil fuels, Brazil emerges as a potential large-scale producer of this energy carrier. The computational analysis of a diffusive hydrogen flame proves to be essential for the development and optimization of projects. Among the various parameters involved in a computational combustion simulation, turbulence and chemical kinetics models are crucial for predicting the flame behavior concerning species emission rates and average temperature.

This work aims to analyze the influence of chemical kinetics models varying in complexity and turbulence models employing different mathematical approaches using the ANSYS-Fluent software to predict the axial profile of emissions and temperature in a turbulent diffusive hydrogen gas flame,  $H_2$ . The GRI Mech 3.0 and Conaire *et al.* (2004) mechanisms were compared along with the  $k - \omega$  SST and standard  $k - \epsilon$  turbulence models. An unstructured hexaedral mesh was used for the simulations. For both mechanisms, the results for the turbulence models indicate mixed performances, with the  $k - \omega$  SST showing better results in general for  $O_2$  curves and for  $H_2O$  and temperature curves normalized from the  $z/d = 100$  point. The  $k - \epsilon$  model had a better overall fit for  $N_2$ ,  $OH$  curves. In general, all applied configurations overestimated the values of species generation/consumption and temperature.

**Keywords:** Combustion. Computational Fluid Dynamics. Emissions. Diffusive Flames



## LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – Esquema de uma chama com fluxo secundário de ar . . . . .	19
Figura 2 – Energia em função do sentido da reação . . . . .	21
Figura 3 – Componentes de tensão de uma célula fluida . . . . .	24
Figura 4 – Campo de pressão alternada . . . . .	25
Figura 5 – Sistema discretizado . . . . .	26
Figura 6 – Algoritmo acoplado com base em pressão . . . . .	28
Figura 7 – Abordagens para solução de turbulência . . . . .	29
Figura 8 – Simulação de um fluxo turbulento utilizando a) <i>DNS</i> , b) <i>LES</i> e c) <i>RANS</i> . . . . .	30
Figura 9 – Sinal de velocidade em escoamento turbulento . . . . .	30
Figura 10 – Tipos de malha . . . . .	35
Figura 11 – Esquema do aparato experimental . . . . .	36
Figura 12 – Medidas do modelo 3D desenvolvido . . . . .	38
Figura 13 – Variação da temperatura média de saída em função do tamanho de aresta . . . . .	41
Figura 14 – Vista frontal da malha utilizada . . . . .	42
Figura 15 – Vista lateral da malha utilizada . . . . .	42
Figura 16 – Fração molar de $H_2$ ao longo da chama . . . . .	43
Figura 17 – Fração molar de $OH$ ao longo da chama . . . . .	44
Figura 18 – Fração molar de $N_2$ ao longo da chama . . . . .	44
Figura 19 – Fração molar de $O_2$ ao longo da chama . . . . .	45
Figura 20 – Fração molar de $H_2O$ ao longo da chama . . . . .	45
Figura 21 – Temperatura normalizada ao longo da chama . . . . .	46

## LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Parâmetros geométricos do experimento . . . . .	37
Tabela 2 – Condições de contorno do experimento . . . . .	37
Tabela 3 – Estimativas de precisão e exatidão dos valores experimentais . . . . .	37
Tabela 4 – Especificações do computador utilizado . . . . .	39
Tabela 5 – Configurações de modelos de turbulência-cinética analisadas . . . . .	40
Tabela 6 – Tempo necessário para convergência . . . . .	46

## LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

<i>CFD</i>	Computational Fluid Dynamics
<i>DNS</i>	Direct Numerical Simulation
<i>LES</i>	Large Eddy Simulation
<i>LIF</i>	Laser Induced Fluorescence
<i>RANS</i>	Reynolds Averaged Navier Stokes
<i>SST</i>	Shear Stress Transport
FDP	Função Densidade de Probabilidade
LHMT	Laboratório de Hidrogênio e Máquinas Térmicas

## LISTA DE SÍMBOLOS

$\zeta$	Fração estequiométrica molar de ar-combustível
$MW_a$	Massa molar de ar
$MW_f$	Massa molar de combustível
$\Phi$	Razão de equivalência
$f$	Fração de mistura
$Y_F$	Fração mássica de combustível
$Y_{Pr}$	Fração molar de ar
$M_j$	Massa molar da espécie j
$\nu_j'$	Coefficiente estequiométrico do reagente j
$\nu_j''$	Coefficiente estequiométrico do produto j
$RR'$	Taxa de reação química
$k_r$	Coefficiente específico de taxa de reação
$T$	Temperatura
$Z_{AB}$	Frequência de colisão cinética do gás
$R$	Constante dos gases ideais
$E$	Energia de ativação da reação
$A$	Fator cinético pré-exponencial
$\rho$	Densidade
$\mathbf{u}$	Vetor velocidade
$\tau_{ij}$	Tensor de tensões viscosas
$F_j$	Força de campo
$\dot{Q}$	Termo fonte de calor
$t$	Tempo
$Y_j$	Fração mássica da espécie j
$D_j$	Coefficiente de difusividade da espécie j
$\phi$	variável arbitrária

$\Gamma$	Termo difusivo arbitrário
$S_{ij}$	Tensor de deformações
$\mu$	Viscosidade dinâmica
$\delta_{ij}$	Delta de Kronecker
$f_c$	Face arbitrária em uma célula
$\vec{A}_{f_c}$	Vetor área de uma face de célula arbitrária
$V$	Volume do sistema
$\mu$	Viscosidade dinâmica
$\alpha$	Fator de sub-relaxação
$\bar{U}$	Velocidade média
$u'$	Velocidade aleatória
$\mu_t$	Viscosidade dinâmica turbulenta
$\kappa$	Energia cinética turbulenta
$\varepsilon$	Dissipação de energia cinética turbulenta
$\omega$	Frequência turbulenta
$P_k$	Geração de energia cinética turbulenta

## SUMÁRIO

1	<b>INTRODUÇÃO</b>	15
2	<b>OBJETIVOS</b>	16
2.1	Objetivo geral	16
2.2	Objetivos específicos	16
3	<b>FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA</b>	17
3.1	<b>Combustão</b>	17
3.1.1	<i>Mistura ar-combustível</i>	17
3.1.2	<i>Chama não pré-misturada</i>	18
3.1.3	<i>Fração de mistura</i>	18
3.2	<b>Mecanismos de cinética química</b>	19
3.2.1	<i>Expressão de Arrhenius</i>	20
3.2.2	<i>Mecanismos para a combustão do hidrogênio</i>	21
3.3	<b>Método de Dinâmica dos Fluidos Computacional</b>	22
3.3.1	<i>Equações de transporte</i>	23
3.3.2	<i>Discretização das equações</i>	24
3.3.3	<i>Algoritmos de solução</i>	26
3.3.4	<i>Turbulência</i>	27
3.3.5	<i>Modelagem da Turbulência em CFD</i>	29
3.3.6	<i>Modelos RANS</i>	31
3.3.7	<i>Modelagem de combustão não pré-misturada</i>	33
3.4	<b>Malha</b>	34
3.4.1	<i>Malhas estruturadas e não estruturadas</i>	34
4	<b>METODOLOGIA</b>	36
4.1	<b>Caso analisado</b>	36
4.2	<b>Modelagem do volume de controle computacional</b>	37
4.3	<b>Geração de malha</b>	39
4.4	<b>Métodos numéricos aplicados</b>	39
4.4.1	<i>Configurações analisadas</i>	39
4.4.2	<i>Valores iniciais</i>	40
5	<b>RESULTADOS E DISCUSSÕES</b>	41

<b>5.1</b>	<b>Estudo de independência de malha</b> . . . . .	41
<b>5.2</b>	<b>Comparação dos modelos de turbulência e cinética química</b> . . . . .	42
<b>5.2.1</b>	<i>Comportamento da chama</i> . . . . .	42
<b>5.2.2</b>	<i>Desempenho computacional</i> . . . . .	46
<b>6</b>	<b>CONCLUSÃO</b> . . . . .	47
<b>7</b>	<b>SUGESTÕES DE TRABALHOS FUTUROS</b> . . . . .	48
	<b>REFERÊNCIAS</b> . . . . .	49

## 1 INTRODUÇÃO

A crise climática existente aparece como um dos efeitos causados pelo uso de combustíveis fósseis como principal alternativa nos diversos níveis de geração de energia em todo o mundo. Medidas como o aumento na rigidez das regulamentações ambientais e a busca pela integração e uma potencial transição energética para fontes limpas e renováveis se fazem necessárias, ao passo que a demanda energética mundial aumenta (OLIVEIRA, 2022).

O gás hidrogênio,  $H_2$ , tem ganhado destaque nos últimos anos como candidato a combustível capaz de chegar aos níveis de descarbonização demandados. Neste contexto, o Brasil apresenta potencial para produção de hidrogênio de baixo carbono devido às condições climáticas propícias (OLIVEIRA, 2022). A IEA (2023) apresenta uma previsão de demanda em 2050 de mais de 400 Mt de hidrogênio, com peso majoritário da produção para combustível de transporte, uso na indústria e geração de potência, o que evidencia o interesse pelo crescimento da fonte e, conseqüentemente, desenvolvimento tecnológico na área.

Tendo em vista a importância do tema, realizar simulações numéricas sobre a combustão do gás hidrogênio se mostra essencial, já que a abordagem numérica é uma ferramenta muito útil para entender o comportamento da chama sob diversas condições, proporcionando grande auxílio na predição de fenômenos e otimização de projetos, atuando, portanto, como guia para tomadas de decisão de uma série de situações práticas (VERSTEEG; MALALASEKERA, 2007).

Devido à combustão ser, em essência, um fenômeno químico que envolve cadeias complexas de reações e suas aplicações práticas, em sua maioria, ocorrerem em regime turbulento (GLASSMAN *et al.*, 2014), aplicar um método computacional encontra desafios na modelagem destes dois fenômenos. Ao longo da história, diversas abordagens tanto para a resolução do problema da turbulência quanto para a modelagem dos processos químicos foram desenvolvidas de acordo com os parâmetros a serem analisados e a capacidade computacional disponível. Portanto, o objetivo deste trabalho é realizar uma análise da influência de dois modelos, tanto de turbulência quanto de cinética química, na simulação numérica de uma chama turbulenta de hidrogênio, comparando de forma quantitativa qual configuração fornece o melhor resultado em relação à aproximação com a realidade e ao custo computacional necessário.



## **2 OBJETIVOS**

### **2.1 Objetivo geral**

Este trabalho tem como objetivo geral analisar a influência de ambos modelos de turbulência e mecanismos de cinética química com diferentes graus de complexidade na simulação computacional de uma chama de gás hidrogênio.

### **2.2 Objetivos específicos**

Uma série de objetivos específicos deve ser atingida para que o objetivo geral seja contemplado. Tais objetivos são:

1. Desenvolver o modelo 3D do caso analisado;
2. Selecionar mecanismos de cinética química apropriados para o caso analisado;
3. Realizar o estudo de independência de malha;

### 3 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

#### 3.1 Combustão

De acordo com Turns (2013), o fenômeno de combustão pode ser definido como uma "oxidação rápida gerando calor, ou ambos, calor e luz". A fina zona de reações de combustão que se propaga pela mistura ar-combustível é denominada chama. A combustão pode, portanto, ser classificada em dois modos: com ou sem chama e estas, por sua vez, podem ser divididas como pré-misturadas ou não pré-misturadas (ou de difusão). Para o propósito deste trabalho, terão enfoque o conceito e as características de chama não pré-misturada.

##### 3.1.1 Mistura ar-combustível

Tomando a simplificação da composição do ar com 21% de  $O_2$  e 79% de  $N_2$ , a combustão do gás Hidrogênio na condição estequiométrica pode ser representada pela Equação 3.1. A razão mássica estequiométrica de ar-combustível é obtida pela Equação 3.2.



$$\left(\frac{A}{F}\right)_{est} = \frac{4,76}{2} \zeta \frac{MW_a}{MW_f} \quad (3.2)$$

Onde  $MW_a$  e  $MW_f$  são, respectivamente, as massas molares de ar e combustível e  $\zeta$  é a razão molar estequiométrica de ar-combustível. Em aplicações de engenharia, é usual lidar com regimes onde há mais ou menos combustível em relação à condição estequiométrica. Para casos os quais há maior quantidade de oxidante do que a estequiométrica, a mistura é denominada pobre em combustível; já para uma quantidade de oxidante menor que a estequiométrica, a mistura é denominada rica em combustível (TURNES, 2013). Para quantificar o quanto uma mistura é rica ou pobre, o parâmetro denominado razão de equivalência  $\Phi$ , apresentado na Equação 3.3, pode ser utilizado.

$$\Phi = \frac{\left(\frac{A}{F}\right)_{est}}{\left(\frac{A}{F}\right)_{real}} \quad (3.3)$$

### 3.1.2 *Chama não pré-misturada*

Devido ao fato dos mecanismos de difusão de espécies serem consideravelmente mais lentos que as taxas de reação da cinética química, esta última representa um papel negligenciável em uma combustão não pré-misturada. A taxa de queima, portanto, é controlada pela difusão mútua entre combustível e oxidante, gerando uma mistura inflamável. Portanto, uma condição característica deste tipo de chama é o fato da taxa de queima ser determinada pela taxa de mistura das espécies (GLASSMAN *et al.*, 2014). O regime que a reação ocorre, por sua vez, é comandado pelo tipo de escoamento das espécies envolvidas no processo de difusão. No regime laminar, a taxa de mistura das espécies é predominantemente comandada por mecanismos de difusão molecular, ao passar para um regime turbulento de chama, a influência da convecção passa a apresentar um papel considerável na mistura das espécies (EL-MAHALLAWY; HABIK, 2002).

Em aplicações práticas, o modo que oxidante e combustível são inseridos na câmara de combustão também desempenha um papel importante na caracterização de chamas difusivas. Raghavan (2022) cita quatro configurações de fornecimento: jato, fluxo coaxial, fluxo contrário e fluxo cruzado. O escopo deste trabalho engloba chamas de jato com fluxo coaxial a baixa velocidade, as quais o jato interno de combustível é cercado por um fluxo anelar de oxidante, como mostrado na Figura 1, que também apresenta de forma geral a aparência da chama de acordo com a vazão volumétrica de oxidante, onde excesso de ar gera uma chama de aparência alongada chamada de superventilada e um fluxo de ar abaixo do estequiométrico gera uma chama mais aberta, denominada subventilada.

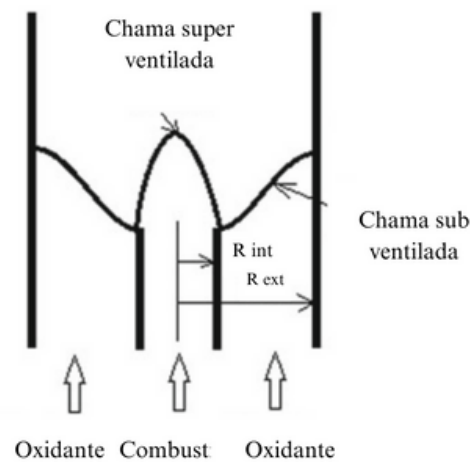
### 3.1.3 *Fração de mistura*

Para um sistema que conta com apenas uma única entrada separada para ambos, combustível e ar, Turns (2013) define, como apresentado na Equação 3.4, o escalar conservado fração de mistura,  $f$ , que não conta com termos fontes em sua equação de transporte e tem valor igual a 0 na entrada de oxidante e 1 na entrada de combustível. Nas outras regiões da chama, o valor de  $f$  varia entre 0 e 1.

$$f \equiv \frac{\text{Massa de material com origem no escoamento de combustível}}{\text{Massa de mistura}} \quad (3.4)$$

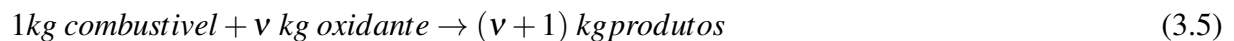
A Equação 3.5 apresenta a reação para 1 kg de combustível e  $v$  kg de oxidante. A fração de mistura, neste caso, pode ser apresentada matematicamente em 3.6.  $Y_F$  é a fração

Figura 1 – Esquema de uma chama com fluxo secundário de ar



Fonte: adaptado de Raghavan (2022).

mássica de combustível e  $Y_{Pr}$  é a fração mássica de produtos.



$$f = Y_F + \left( \frac{1}{\nu + 1} \right) Y_{Pr} \quad (3.6)$$

### 3.2 Mecanismos de cinética química

Uma reação real de combustão é composta de diversos subprocessos, ao invés de apenas um passo, como expresso na Equação 3.1, portanto, entender os subprocessos da reação é de extrema importância, tendo em vista que características importantes do fenômeno, como a formação de poluentes, extinção da chama ou o atraso de ignição em motores de combustão interna, é determinada pelas taxas de cinética química de cada passo na cadeia de reações envolvidas (TURNS, 2013). Portanto, para obter uma descrição acurada do comportamento de combustão, um conjunto de reações químicas deve ser utilizado. A estes conjuntos de reações é dado o nome de mecanismo de cinética química. Por fim, cabe ressaltar que a análise de mecanismos se estende não apenas para escalas de tempo infinitesimais, pois a formação de muitos poluentes se dá a temperaturas menores e a maiores escalas de tempo, inclusive após o processo de combustão (GLASSMAN *et al.*, 2014).

### 3.2.1 Expressão de Arrhenius

Uma reação genérica pode ser expressa como mostrado na Equação 3.7, onde os coeficientes estequiométricos de cada espécie  $M_j$ , nos reagentes e nos produtos é, respectivamente  $\nu_j'$  e  $\nu_j''$ . A taxa de reação química  $RR$  é proporcional ao produto das concentrações das espécies reagentes à potência de seu respectivo coeficiente estequiométrico, uma constante de proporcionalidade  $k_r$ , denominada coeficiente específico de taxa de reação, é aplicada para fornecer a relação de igualdade, presente na Equação 3.8.



$$RR = k_r \prod_{j=1}^n (M_j)^{\nu_j'} \quad (3.8)$$

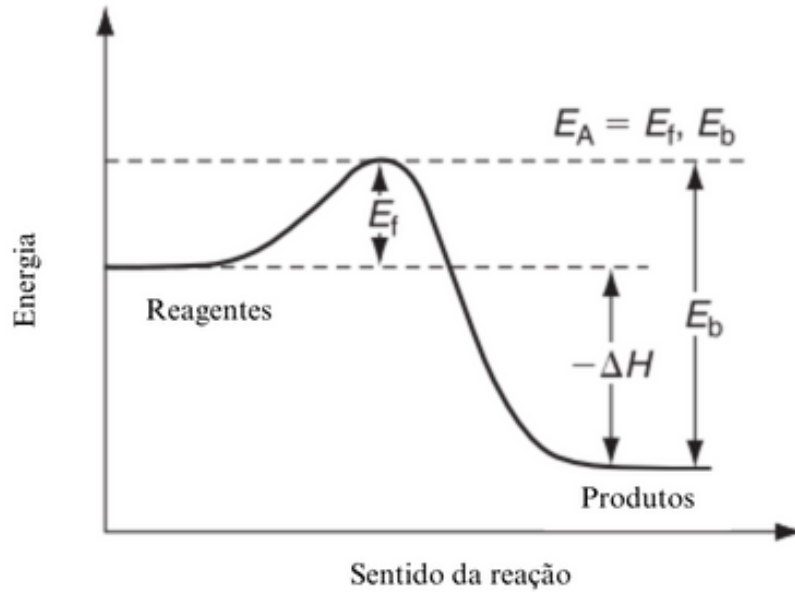
De acordo com Turns (2013), muitas etapas dos mecanismos de cinética química em um processo de combustão são caracterizados por reações bimoleculares, exemplificado na Equação 3.9. A postulação de Arrhenius afirma que apenas moléculas com uma energia maior que uma quantidade  $E$  irão reagir. Como mostrado na Figura 2 este termo pode ser interpretado como a barreira de energia potencial a ser superada para que a reação ocorra em direção a formação de produtos. Este estado de energia é relacionado pela temperatura  $T$  na qual a espécie se encontra, chegando à expressão na Equação 3.10, onde  $Z_{AB}$  é a frequência de colisão cinética do gás e  $R$  é a constante dos gases ideais.



$$RR = Z_{AB} \cdot \exp(-E/RT) \quad (3.10)$$

Correlacionando a Equação 3.10 com a Equação 3.8, a taxa de reação  $RR$  pode ser expressa como em 3.11. o fator  $A$  é chamado de fator cinético pré exponencial, e engloba a influência de  $Z_{AB}$ . Porém, aplicação desta equação não abrange radicais livres com baixa barreira de energia de ativação e reações de recombinação de espécies, processos nos quais a temperatura apresenta maior influência. Nestes casos, para inserir o papel da temperatura nas taxas de reações

Figura 2 – Energia em função do sentido da reação



Fonte: adaptado de Glassman *et al.* (2014).

é comum corrigir a Equação 3.10 adicionando o parâmetro  $T^b$  (GLASSMAN *et al.*, 2014). O modelo para o coeficiente de taxa de reação aplicado em diversos mecanismos se utiliza da Equação 3.12. Por fim, a taxa de variação da concentração de uma espécie,  $\frac{d(M_i)}{dt}$  pode ser dada pela diferença entre a taxa de formação e a taxa de destruição desta espécie, como mostrado na Equação 3.13.

$$RR = A \cdot \exp(-E/RT) \quad (3.11)$$

$$RR = A \cdot T^b \exp(-E/RT) \quad (3.12)$$

$$\frac{d(M_i)}{dt} = [v_i'' - v_i'] k_r \prod_{j=1}^n (M_j)^{v_j'} \quad (3.13)$$

### 3.2.2 Mecanismos para a combustão do hidrogênio

Turns (2013) apresenta 20 reações elementares que são consideradas no sistema de reação  $H_2 - O_2$ , contando com oito espécies químicas, que são  $H_2$ ,  $O_2$ ,  $H_2O$ ,  $OH$ ,  $O$ ,  $H$ ,  $HO_2$  e  $H_2O_2$ . Dentre as etapas finalizadoras, a Equação 3.14 se mostra um dos mais importantes

passos na liberação de energia, assim como a oxidação do monóxido de carbono na oxidação de hidrocarbonetos (GLASSMAN *et al.*, 2014).



Westbrook e Dryer (1984) propuseram um método de elaboração de mecanismos de cinética química que observa as reações em cadeia como uma construção composta de diversos sub-mecanismos, de forma que etapas mais simples e gerais são descritas a priori e, de acordo com o aumento da complexidade do fenômeno analisado, mais espécies e reações são adicionadas ao sistema. Por exemplo, o GRI-MECH 3.0 desenvolvido por Smith *et al.* (2000) para a modelagem da combustão de metano é amplamente utilizado na validação de análises numéricas com metano e gás natural, sendo um mecanismo com um total de 325 reações e 53 espécies e contendo etapas de oxidação do hidrogênio, logo, se mostra um objeto interessante para, sob o escopo deste trabalho, ter seu comportamento analisado ao modelar um processo de combustão com espécies e reações presentes na cadeia complexa de reações que o estrutura. Além disso, mecanismos mais simples também são utilizados diretamente para a modelagem específica de um tipo de combustível sob certas condições, como o mecanismo de reação  $H_2 - O_2$  desenvolvido por Conaire *et al.* (2004), que conta com 21 reações e 10 espécies e foi desenvolvido para atuar a uma faixa de temperatura de 298 a 2700 K, pressões de 0,05 a 87 atm e uma faixa de fator de equivalência que varia de 0,2 a 6.

### 3.3 Método de Dinâmica dos Fluidos Computacional

Com o crescimento da capacidade computacional, o uso de métodos numéricos para solução de problemas complexos se tornou viável em computadores mais acessíveis, em contraste com os altos custos milionários de super computadores aplicados no período de 1960 e 1970 (MALISKA, 2023). A análise de sistemas utilizando a técnica *CFD* (do inglês, *Computational Fluid Dynamics*) permite a observação de diversos problemas recorrentes em uso industrial, como aerodinâmica veicular e aeronáutica, processos de combustão em fornalhas e motores de combustão interna (VERSTEEG; MALALASEKERA, 2007).

### 3.3.1 Equações de transporte

A abordagem *CFD* tem como estratégia a aplicação das equações de transporte em um espaço discretizado para solução de problemas como fluxo de espécies, transferência de calor e reações químicas. O método de discretização de volumes finitos, aplicado neste trabalho, consiste em dividir o espaço físico em diversos volumes de controle, denominados células, e resolver as integrais das equações de transporte de cada célula para todo o volume, transformando-as em um sistema algébrico que deve ser solucionado por meio de iterações (VERSTEEG; MALALASEKERA, 2007). Vale apontar que o conjunto total de células que compõe o volume de controle é chamado de malha.

Para um volume de controle, as equações de transporte mais básicas envolvidas em problemas de combustão são as de conservação de massa, quantidade de movimento e energia, apresentadas respectivamente nas equações 3.15, 3.16 e 3.17 utilizando a notação de Einstein, a qual o somatório dos termos para as três dimensões é contraído no índice  $i$ , já o índice  $j$  representa a equação que a equação se repete para as três componentes. Para as diversas espécies envolvidas em um processo de combustão, a equação de transporte é apresentada em 3.18, aplicando a Equação 3.13 como um termo de fonte/sumidouro (VERSTEEG; MALALASEKERA, 2007). Para uma variável  $\phi$  qualquer, a equação de transporte pode ser generalizada, como apresentado na Equação 3.19, a qual as variáveis  $\Gamma$  e  $S_\phi$  representam, respectivamente, os termos difusivo e fonte da propriedade  $\phi$ .

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i) = 0 \quad (3.15)$$

$$\frac{D}{Dt}(\rho u_j) = -\frac{\partial p}{\partial x_j} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_i} + F_j \quad (3.16)$$

$$\rho \frac{De}{Dt} = -\frac{\partial(k\nabla T)}{\partial x_i} + \dot{Q} - p \frac{\partial u_i}{\partial x_i} + \frac{\partial(u_j \tau_{ij})}{\partial x_i} \quad (3.17)$$

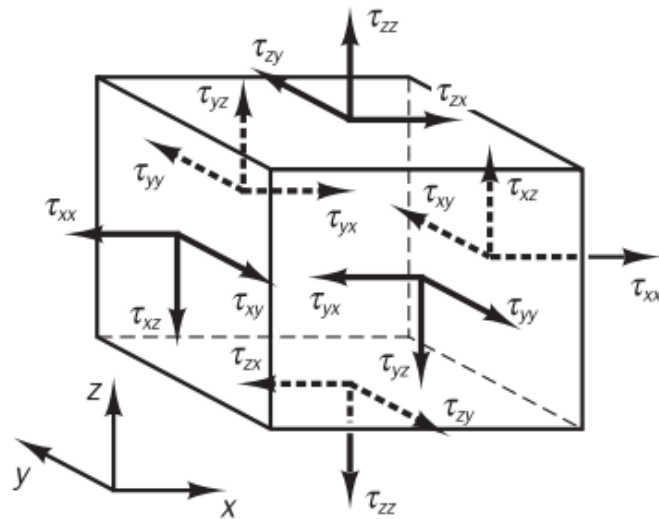
$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_j) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i Y_j) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \rho D_j \frac{\partial Y_j}{\partial x_i} \right) + \frac{d(M_j)}{dt} \quad (3.18)$$

$$\frac{\partial(\rho \phi)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho \phi u_i)}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \Gamma \frac{\partial(\phi)}{\partial x_i} \right) + S_\phi \quad (3.19)$$



Onde  $\rho$  é a densidade,  $u_j$  é a componente de velocidade em cada direção do sistema cartesiano,  $p$  é a pressão estática,  $\tau_{ij}$  é o tensor de tensões viscosas que agem no fluido,  $F_j$  é a componente de uma força de campo atuante na direção  $j$ ,  $e$  é a energia por unidade de massa,  $k$  é o fator de condutividade,  $T$  é a temperatura,  $\dot{Q}$  é o termo que representa uma fonte de calor e  $D_j$  o coeficiente de difusividade de cada espécie. As tensões viscosas da Equação 3.16 são mostradas na Figura 3. Para fluidos newtonianos, as tensões de cisalhamento  $\tau_{ij}$  são linearmente proporcionais às taxas de deformação do fluido, que também podem ser apresentadas por meio de um tensor  $S_{ij}$ . Para gases, esta relação é mostrada na equação 3.20, onde a constante de proporcionalidade,  $\mu$ , é a viscosidade dinâmica do fluido. O operador  $\delta_{ij}$  é o delta de Kronecker, que vale 0 para  $i \neq j$  e 1 para  $i = j$ . A aplicação desta relação na Equação 3.16 gera o conjunto conhecido como equações de Navier-Stokes.

Figura 3 – Componentes de tensão de uma célula fluida



Fonte: adaptado de Versteeg e Malalasekera (2007).

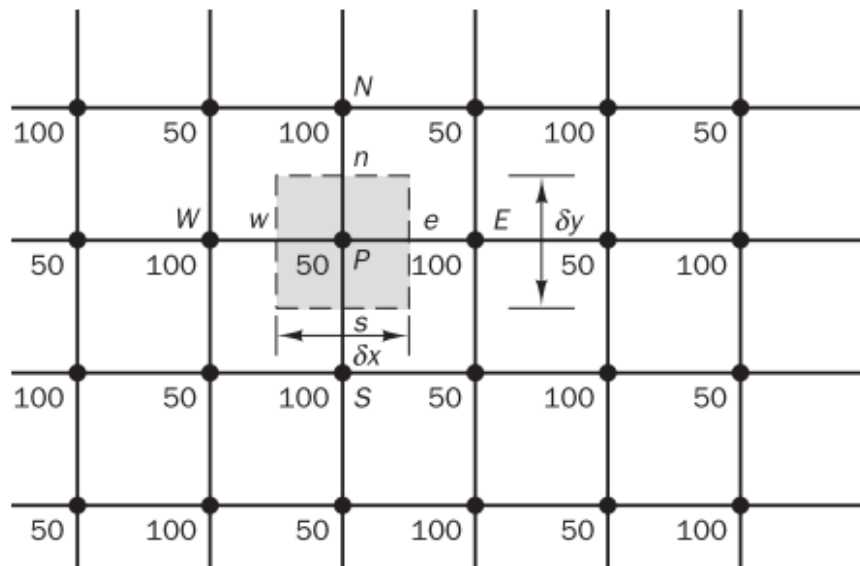
$$\tau_{ij} = \mu \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \delta_{ij} \mu \frac{2}{3} \frac{\partial u_i}{\partial x_i} \quad (3.20)$$

### 3.3.2 Discretização das equações

Ao dividir o domínio analisado em diversos volumes, as variáveis podem ser posicionadas nos vértices ou no centro das células, o local de alocação das propriedades deve ser definido de forma que as operações matemáticas não resultem em um comportamento que contrarie a física. A Figura 4 mostra uma situação clássica deste tipo de problema em uma região

2D discretizada: em um campo de pressão não uniforme onde a pressão alterna entre 100 e 50 *um* a cada nó, uma situação chamada de "tabuleiro de damas", com valores alocados nos vértices das células, os gradientes em cada nó são calculados como zero, o que seria o mesmo comportamento de um campo uniforme. Se a velocidade também for alocada nos nós, o diferencial de pressão não terá influência na equação de quantidade de movimento, estas características apresentam um comportamento incoerente com a física do problema (VERSTEEG; MALALASEKERA, 2007).

Figura 4 – Campo de pressão alternada

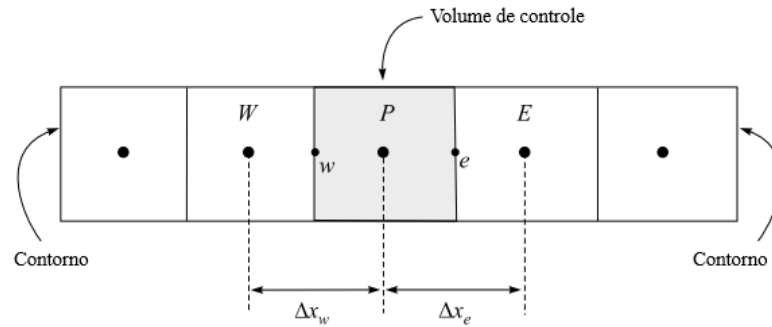


Fonte: adaptado de Versteeg e Malalasekera (2007).

Para resolver este tipo de problema, variáveis escalares são alocadas nos nós, enquanto os termos de que transportam informação, como a velocidade, são alocados nas faces das células (entre os nós). Para obter o valor de velocidade em um nó, estratégias de interpolação são aplicadas. No caso de um método de discretização que aloque as variáveis no centro da célula, os valores de velocidade, por exemplo, se localizados na face das células, também resolveriam o problema.

Quando os valores das propriedades forem solicitados entre pontos que guardam as propriedades, como a pressão na face de uma célula no método de distribuição centrada, a aplicação de funções de interpolação é necessária para calcular estes valores (MALISKA, 2023). Utilizando a Figura 5 como exemplo, o valor de um escalar  $\phi$  na face  $e$ , com sentido de fluxo de W para E, pode ser calculado por diversos métodos, as Equações 3.21, 3.22, 3.23 e 3.24 são, respectivamente, expressões para os métodos de diferenças centrais, *upwind* de primeira ordem, *upwind* de segunda ordem e o método *Quick*. O sufixo indica o valor da variável em cada ponto da malha, o vetor  $\vec{r}$  indica a direção do gradiente da equação.

Figura 5 – Sistema discretizado



Fonte: adaptado de Maliska (2023).

$$\phi_e = \frac{\phi_E + \phi_P}{2} \quad (3.21)$$

$$\phi_e = \phi_P, \phi_w = \phi_W \quad (3.22)$$

$$\phi_e = \phi_P + (\phi_P - \phi_W) \cdot \vec{r} \quad (3.23)$$

$$\phi_e = \frac{-1}{8} \phi_W + \frac{6}{8} \phi_P + \frac{3}{8} \phi_E \quad (3.24)$$

### 3.3.3 Algoritmos de solução

A forma integral da Equação 3.19 é apresentada na Equação 3.25. A discretização da equação de transporte da propriedade  $\phi$  na forma integral, em uma face  $f_c$  arbitrária de vetor área  $\vec{A}_{f_c}$  é dada em 3.26, onde  $n$  é o número de faces ao redor da célula em questão e o valor do termo da taxa de variação temporal é definido em métodos de discretização temporal quando um regime transiente é aplicado. Após a aplicação de um método de interpolação adequado, a solução de um sistema linear de equações que representa o problema físico analisado pode ser realizada por métodos como eliminação de Gauss ou eliminação LU. Porém, termos como  $\rho u_i u_i$  na equação de Navier-Stokes, por exemplo, são não lineares, o que exige métodos iterativos para chegar ao resultado. Para o caso analisado, que busca avaliar o comportamento da chama em estado permanente, ANSYS (2013) indica o algoritmo acoplado, por apresentar

uma implementação robusta e eficiente para estas condições. O algoritmo acoplado é um método denominado "baseado em pressão", pois soluciona a equação de quantidade de movimento e a manipula em conjunto com a equação de continuidade para obter uma equação para o gradiente de pressão. O esquema geral do algoritmo acoplado é apresentado na Figura 6.

$$\int_V \frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} dV + \int_V \frac{\partial(\rho\phi u_i)}{\partial x_i} dV = \int_V \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \Gamma \frac{\partial(\phi)}{\partial x_i} \right) dV + \int_V S_\phi dV \quad (3.25)$$

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} \cdot V + \sum_{f_c} \rho_{f_c} u_i \phi_{f_c} \cdot \vec{A}_{f_c} = \sum_{f_c} \Gamma_\phi \nabla(\phi_{f_c}) \cdot \vec{A}_{f_c} + S_\phi V \quad (3.26)$$

No processo de solução do sistema de equações, o valor de uma propriedade é atualizado com base na Equação 3.27, onde  $\alpha$  é chamado de fator de sub-relaxação, e é aplicado para controlar a taxa de variação da variável  $\phi$  a cada iteração, impedindo que ocorra divergência (ANSYS, 2013). Para fechar o cálculo do sistema, variáveis extras denominadas de residuais são adicionadas em cada equação, a medida que o valor dos resíduos tende para zero, a solução tende à convergência (VERSTEEG; MALALASEKERA, 2007).

Outra técnica de relaxação bastante útil para solucionar problemas em estado permanente, os quais apenas o resultado final é o foco, é a aplicação de um fluxo pseudo-transiente. Nesta abordagem, a taxa de variação temporal de uma propriedade é adicionada utilizando de um passo de "pseudo-tempo"  $\Delta t$ , como mostrado na Equação 3.28. De acordo com os resultados obtidos a cada iteração, o valor do passo de tempo aumenta se os residuais apresentarem queda nos valores, funcionando como um fator de sub-relaxação do algoritmo e permitindo que o escoamento em regime permanente seja atingido sem precisar dos custosos cálculos de passo de tempo de um regime transiente (VERSTEEG; MALALASEKERA, 2007).

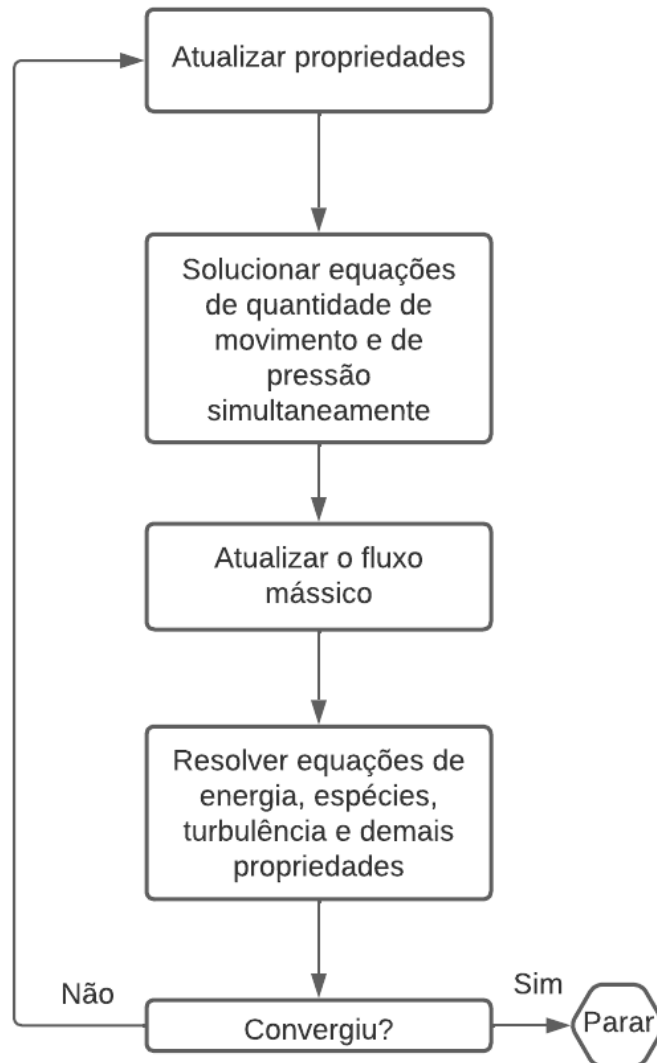
$$\phi = \phi_{anterior} + \alpha \Delta\phi \quad (3.27)$$

$$\frac{\phi_{atual} - \phi_{anterior}}{\Delta t} \rho \Delta V \quad (3.28)$$

### 3.3.4 Turbulência

O fenômeno de turbulência é caracterizado pela presença de turbilhões caóticos e anisotrópicos com flutuações em três dimensões. Este comportamento de alta movimentação é

Figura 6 – Algoritmo acoplado com base em pressão



Fonte: adaptado de ANSYS (2013).

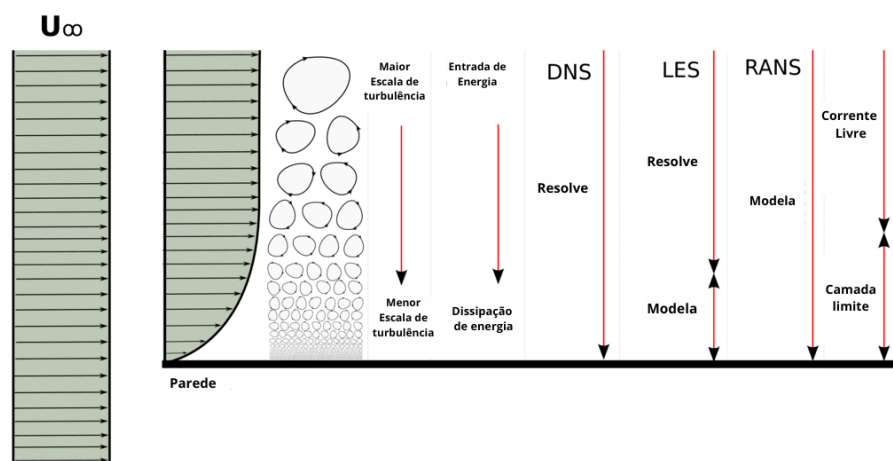
favorável para transporte de propriedades no fluxo como, por exemplo, a transferência de calor. Devido à conservação da quantidade de movimento angular, a energia se transporta no sentido da diminuição de escala de comprimento dos turbilhões até ser dissipada por efeitos viscosos (VERSTEEG; MALALASEKERA, 2007). Este aumento considerável que a turbulência causa nas taxas de mistura é o motivo de sua grande importância nas aplicações práticas de combustão, sistemas como turbinas estacionárias e motores de automóveis são beneficiados pelo aumento das taxas de reação resultante do comportamento turbulento (GLASSMAN *et al.*, 2014). De acordo com Versteeg e Malalasekera (2007), o número de Reynolds para a velocidade e o comprimento característicos dos menores turbilhões é próximo de 1, portanto, as forças viscosas atuam com mesma influência que as forças inerciais. Estas escalas características são chamadas de Escalas

de Kolmogorov. Nas menores escalas de turbulência, a energia é dissipada por tensões viscosas, sendo convertida em energia térmica interna.

### 3.3.5 Modelagem da Turbulência em CFD

Em geral, três abordagens de computação se aplicam para resolver problemas com escoamentos turbulentos, sendo elas *DNS* (do inglês, *Direct Numerical Simulation*), *LES* (do inglês, *Large Eddy Simulation*) e *RANS* (do inglês, *Reynolds Averaged Navier-Stokes*). Essencialmente, a escolha de cada estratégia de resolução dos problemas é realizada com base no comportamento de interesse que se busca analisar. A Figura 7 demonstra como cada método lida com as flutuações aleatórias existentes no fluxo turbulento, enquanto a Figura 8 demonstra a diferença entre os resultados dos três métodos para um escoamento turbulento. O método *DNS* apresenta uma solução mais fiel ao comportamento turbulento, porém ao custo computacional elevado exigido por uma malha que seja do tamanho da escala de Kolmogorov, o método *LES* resolve diretamente as maiores escalas de turbulência e modela as escalas de Kolmogorov. No contexto deste trabalho, que tem como objetivo avaliar o comportamento médio de valores de emissões e temperatura, a abordagem da decomposição de Reynolds, aplicada na estratégia *RANS* será utilizada.

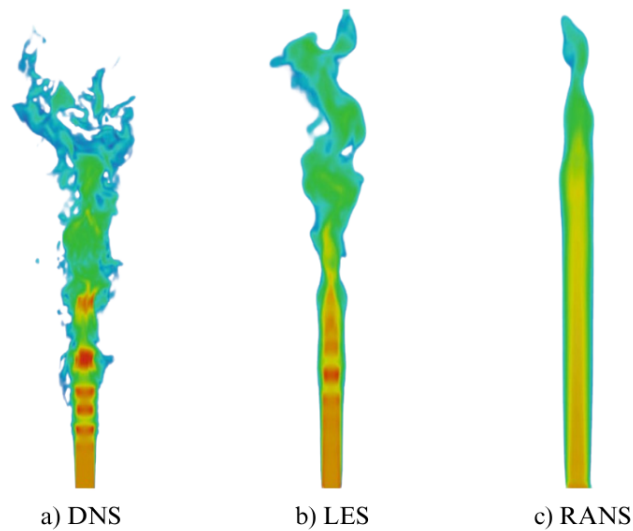
Figura 7 – Abordagens para solução de turbulência



Fonte: adaptado de Hami (2021).

A estratégia dos métodos *RANS* consiste em separar o sinal aleatório,  $u'$  do sinal médio  $\bar{U}$ , componentes da velocidade típica de um escoamento turbulento, como mostrado na Equação 3.29, resolvendo diretamente o fluxo médio e se utilizando de um modelo matemático para a solução dos termos flutuantes. O conceito deste procedimento é representado visualmente na

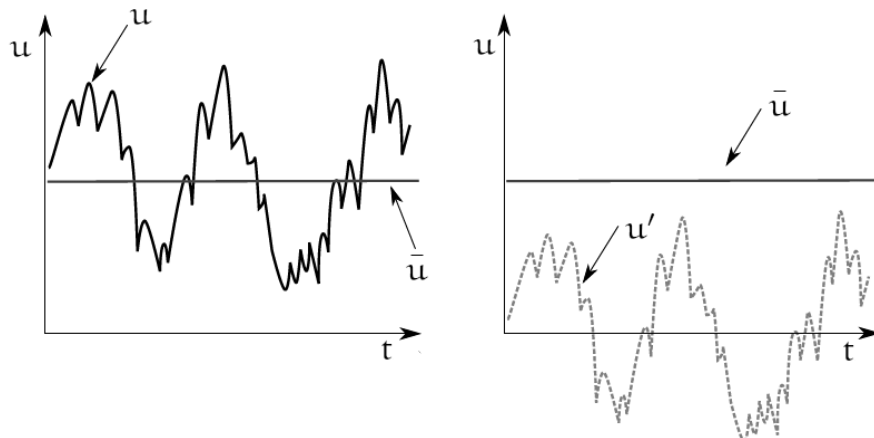
Figura 8 – Simulação de um fluxo turbulento utilizando a) *DNS*, b) *LES* e c) *RANS*



Fonte: adaptado de Rodriguez (2019).

Figura 9. Utilizando a notação de Einstein, a equação da quantidade de movimento é apresentada na Equação 3.30, onde  $\nu$  é a viscosidade dinâmica do fluido e o termo  $-\overline{\nu u_i' u_j'}$  é denominado tensões de Reynolds, e se relaciona às flutuações aleatórias do fluxo, portanto sendo o termo que é modelado nos métodos *RANS*. Devido à variação da densidade decorrente do processo de combustão, a média de Favre para uma propriedade  $\phi$ , mostrada na Equação 3.31, é utilizada em escoamentos reativos turbulentos, contornando o efeito das flutuações aleatórias da densidade, mas ainda considerando a influência das variações médias (VERSTEEG; MALALASEKERA, 2007).

Figura 9 – Sinal de velocidade em escoamento turbulento



Fonte: adaptado de Reggente (2014).

$$u_j = \bar{U}_j + u_j'; \quad \bar{u}' = 0. \quad (3.29)$$

$$u_i = \bar{U}_j \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho \bar{U}_i) = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial x_i} + \nu \frac{\partial^2 \bar{U}_i}{\partial x_i^2} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{-\nu u_i' u_j'}) \quad (3.30)$$

$$\tilde{\phi} = \frac{\overline{\rho \phi}}{\bar{\rho}} \quad (3.31)$$

### 3.3.6 Modelos RANS

Diversos modelos foram desenvolvidos para o cálculo das tensões de Reynolds. O modelo semi empírico  $k - \varepsilon$  padrão, proposto por Launder e Spalding (1972) expressa as tensões de Reynolds de acordo com a hipótese de Boussinesq, como mostrado na Equação 3.32, que assume isotropia dos fenômenos turbulentos e define também o conceito de energia cinética turbulenta, na Equação 3.33. A variável  $\mu_t$  é a viscosidade turbulenta do fluido, que é modelada seguindo a Equação 3.34, onde  $C_\mu$  é uma constante de proporcionalidade. A variável  $\varepsilon$  é a dissipação de energia cinética turbulenta, apresentada na Equação 3.35, onde  $l$  é o comprimento característico. As equações de transporte para as variáveis  $k$  e  $\varepsilon$  são apresentadas em 3.36 e 3.37, respectivamente. As constantes do modelo,  $C_\mu$ ,  $\sigma_k$ ,  $\sigma_\varepsilon$ ,  $C_{1\varepsilon}$  e  $C_{2\varepsilon}$  são apresentadas na Equação 3.38.

Este modelo alcançou grande popularidade pela aliança entre conformidade a vários fluxos de aplicação prática, principalmente em escoamentos completamente turbulentos e confinados, e o baixo custo computacional. Porém, uma das desvantagens do modelo padrão é a baixa performance em fluxos próximos à região de parede, em camadas de mistura e com gradientes adversos de pressão (VERSTEEG; MALALASEKERA, 2007).

$$\tilde{\tau}_{ij} = \mu_t \left( \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) - \delta_{ij} \frac{2}{3} \bar{\rho} k \quad (3.32)$$

$$k = \frac{1}{2} \overline{u_i'^2} \quad (3.33)$$



$$\mu_t = \rho C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (3.34)$$

$$\varepsilon = \frac{k^{3/2}}{l} \quad (3.35)$$

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho k \bar{u}_i) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[ \left( \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial(k)}{\partial x_i} \right] + 2\mu_t S_{ij} \cdot S_{ij} - \rho \varepsilon \quad (3.36)$$

$$\frac{\partial(\rho \varepsilon)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho \varepsilon \bar{u}_i) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[ \left( \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial(\varepsilon)}{\partial x_i} \right] + C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k} 2\mu_t S_{ij} \cdot S_{ij} - C_{2\varepsilon} \rho \frac{\varepsilon^2}{k} \quad (3.37)$$

$$C_\mu = 0,09 ; \sigma_k = 1,00 ; \sigma_\varepsilon = 1,30 ; C_{1\varepsilon} = 1,44 ; C_{2\varepsilon} = 1,92 \quad (3.38)$$

Para o escopo deste trabalho, que analisa um jato de combustível próximo ao número de Mach = 1 cercado por um fluxo secundário de baixa velocidade, o modelo  $k - \omega$  SST (do inglês, Shear Stress Transport) desenvolvido por Menter (1994), será aplicado em comparação com o modelo padrão por apresentar melhor desempenho nas regiões próximas a parede e em fluxos com gradientes de pressão adversos (VERSTEEG; MALALASEKERA, 2007). A estratégia do modelo consiste em aplicar o modelo  $k - \omega$  proposto por Wilcox *et al.* (1998) para as regiões próximas às paredes e o modelo  $k - \varepsilon$  padrão nas regiões completamente turbulentas, evitando o uso de funções de parede na solução de problemas de turbulência.

A variável  $\omega$  é a frequência de turbulência, definida por  $\omega = \varepsilon/k$ . As modificações deste modelo implicam em uma alteração no cálculo da viscosidade turbulenta, como mostrado na Equação 3.39. As equações de transporte para  $k$  e  $\omega$  no modelo SST são mostradas respectivamente em 3.40 e 3.41. O termo  $P_k$  expressa a geração de energia cinética turbulenta e é apresentado na Equação 3.42. As constantes do modelo têm seus valores apresentados na Equação 3.43.

Rao *et al.* (2020) realizaram uma investigação numérica comparando diversos modelos de turbulência na simulação computacional de um combustor anelar com fluxo supersônico, chegando à conclusão que o modelo  $k - \omega$  SST apresenta melhor acurácia para fluxos com trens

de choque e combustão na camada de mistura ar-oxidante. Lopez-Ruiz *et al.* (2023) encontraram resultados satisfatórios aplicando o modelo  $k - \omega$  SST na simulação computacional de uma chama de mistura  $H_2 - CH_4$  a diferentes concentrações.

$$\mu_t = \rho \frac{k}{\omega} \quad (3.39)$$

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho k \bar{u}_i) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial(k)}{\partial x_i} \right] + P_k - \beta^* \rho k \omega \quad (3.40)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho \omega)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho \omega u_i)}{\partial x_i} = & \frac{\partial}{\partial x_i} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_{\omega,1}} \right) \frac{\partial \omega}{\partial x_i} \right] + \gamma_2 \left( 2\rho S_{ij} \cdot S_{ij} - \frac{2}{3} \rho \omega \frac{u_i}{x_j} \delta_{ij} \right) \\ & - \beta_2 \rho \omega^2 + 2 \frac{\rho}{\sigma_{\omega,2} \omega} \frac{\partial k}{\partial x_k} \frac{\partial \omega}{\partial x_k} \end{aligned} \quad (3.41)$$

$$P_k = \left( 2\mu_t S_{ij} \cdot S_{ij} - \delta_{ij} \frac{2}{3} \rho k \frac{\partial u_i}{\partial x_i} \right) \quad (3.42)$$

$$\sigma_k = 1,0 \quad \sigma_{\omega,1} = 2,0; \quad \sigma_{\omega,2} = 1,17; \quad \gamma_2 = 0,553; \quad \beta_2 = 0,083; \quad \beta^* = 0,09 \quad (3.43)$$

### 3.3.7 Modelagem de combustão não pré-misturada

A aplicação da média de Favre encontra um problema quando aplicada na taxa de reação, Equação 3.12, termo fonte da equação de transporte das espécies químicas, já que a não linearidade deste componente resulta em uma série de outros fatores a serem modelados (VERSTEEG; MALALASEKERA, 2007). Para contornar este problema, diversos tipos de modelos foram desenvolvidos. Uma estratégia que apresenta bons resultados em chamas difusivas turbulentas é a de *flamelets* não-estacionários, que consiste em resolver numericamente o fluxo turbulento separadamente do problema químico (PITSCH *et al.*, 1998). As chamas turbulentas são modeladas como chamas finas deformadas pela turbulência, as *flamelets*.

Na parte do fluxo, a equação de transporte da fração de mistura  $f$  é solucionada, calculando a distribuição de  $f$  ao longo do volume de controle. Já na resolução do sistema químico, a abordagem da Função Densidade de Probabilidade (FDP) é amplamente utilizada para problemas envolvendo combustão não pré-misturada. Esta metodologia relaciona as flutuações das demais propriedades, como fração mássica de espécies químicas, velocidade e temperatura,

com a fração de mistura, apresentada na Equação 3.6. O valor de  $f$ , por sua vez, que varia ao longo do escoamento, é modelado para todo o volume de controle por métodos estocásticos. A função Beta, que apresenta boa aproximação com resultados experimentais, assume um formato para a distribuição da fração de mistura por meio de sua média  $\bar{f}$  e sua variância  $\bar{f}'^2$  de acordo com a Equação 3.44 (VERSTEEG; MALALASEKERA, 2007). Os termos  $\alpha_{PDF}$  e  $\beta_{PDF}$  são mostrados na Equação 3.45. A partir disto, um escalar  $\phi$  qualquer pode ter seu valor ponderado por densidade calculado de acordo com a Equação 3.46. O termo  $\tilde{p}(f)$  é a função probabilidade ponderada por densidade.

$$p(f) = \frac{f^{\alpha_{PDF}-1}(1-f)^{\beta_{PDF}-1}}{\int f^{\alpha_{PDF}-1}(1-f)^{\beta_{PDF}-1}df} \quad (3.44)$$

$$\alpha_{PDF} = \bar{f} \left[ \frac{f(1-\bar{f})}{\bar{f}'^2} - 1 \right] ; \quad \beta_{PDF} = (1-\bar{f}) \left[ \frac{f(1-\bar{f})}{\bar{f}'^2} - 1 \right] \quad (3.45)$$

$$\tilde{\phi} = \int_0^1 \phi(f)\tilde{p}(f)df \quad (3.46)$$

### 3.4 Malha

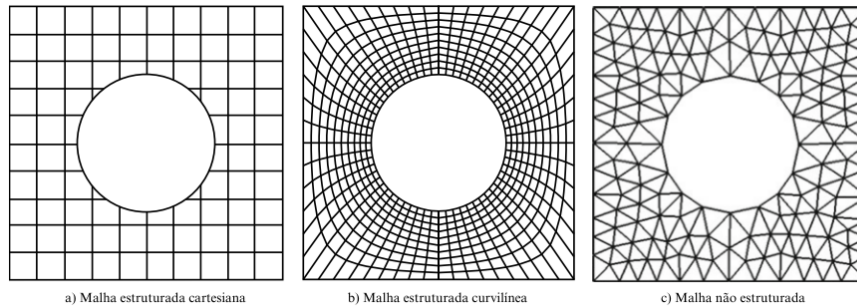
Além de uma definição apropriada das condições de contorno no modelo de um estudo em *CFD*, o custo computacional e a fidelidade dos resultados também dependem diretamente da qualidade da malha, de forma que aproximadamente 50% do tempo é dedicado ao estudo de malha em problemas que envolvem *CFD* (VERSTEEG; MALALASEKERA, 2007). Portanto, a discretização do sistema analisado deve receber a devida atenção e serão introduzidos a seguir os diferentes tipos de malha.

#### 3.4.1 Malhas estruturadas e não estruturadas

Maliska (2023) apresenta três tipos gerais de estratégia de discretização de um volume de controle, como exemplificado para o caso 2D de uma região com um furo na Figura 10. Quando o sistema de coordenadas utilizado para o posicionamento de cada volume de controle é global, uma malha estruturada é formada, a qual todos os volumes de controle terão o mesmo número de células vizinhas, como pode ser visto em 10 'a' e 'b', o sistema de coordenadas

pode ser ortogonal ou não. Já as malhas não estruturadas, mostrado em 'c', utilizam um sistema relativo de coordenadas, permitindo que cada volume de controle tenha um número diferente de células vizinhas.

Figura 10 – Tipos de malha



Fonte: adaptado de Maliska (2023).

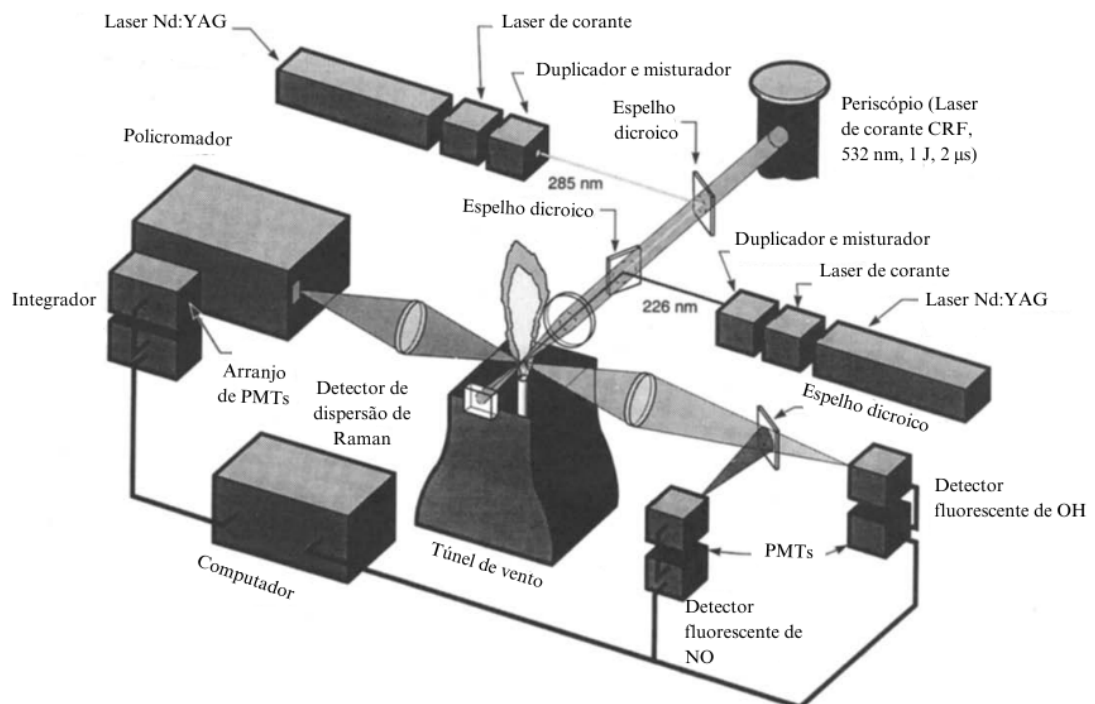
Apesar de serem de fácil organização, o que permite sua aplicação em *scripts* mais simples, as malhas estruturadas não conseguem sempre fornecer uma boa conformidade para com geometrias mais complexas. Em contraste, malhas não estruturadas proporcionam uma maior adaptação a geometrias mais complexas, como superfícies curvas e sinuosas, ao custo da dificuldade de ordenamento dos volumes de controle.

## 4 METODOLOGIA

### 4.1 Caso analisado

O presente estudo se referencia em dados obtidos por testes experimentais conduzidos por Barlow (2003) na Instalação de Pesquisa em Combustão, do Laboratório Nacional de Sandia. Demais dados sobre os experimentos são fornecidos em Barlow e Carter (1994) e Barlow e Carter (1996). O experimento consiste em medições utilizando fluorescência induzida por laser (*LIF*) sobre uma chama turbulenta não pré-misturada de gás Hidrogênio,  $H_2$ , inserido a alta velocidade e com um fluxo secundário de ar de baixa velocidade. O queimador foi posicionado no centro da saída vertical de um túnel de vento, a montagem e os métodos de medição podem ser vistos na Figura 11. As tabelas 1, 2 e 3 apresentam, respectivamente, os parâmetros geométricos, as condições de contorno e os erros de medição do experimento analisado.

Figura 11 – Esquema do aparato experimental



Fonte: adaptado de Barlow e Carter (1994).

Tabela 1 – Parâmetros geométricos do experimento

Parâmetro	Dimensão (mm)
Diâmetro do injetor de combustível (d)	3,75
Espessura de parede do tubo injetor	0,545
Comprimento do tubo injetor	-
Seção do túnel de vento	300x300

Fonte: Adaptado de Barlow (2003)

Tabela 2 – Condições de contorno do experimento

Parâmetro	Valor	Unidade
Velocidade de injeção do combustível	296	m/s
Velocidade de entrada do ar	1,0	m/s
Temperatura do combustível	295	K
Temperatura do ar	294	K
Fração molar de $H_2$ - combustível	1	-
Fração molar de $O_2$ - Ar	0,20425	-
Fração molar de $N_2$ - Ar	0,78425	-
Fração molar de $H_2O$ - Ar	0,0115	-

Fonte: Adaptado de Barlow (2003)

Tabela 3 – Estimativas de precisão e exatidão dos valores experimentais

Escalar	%rms	$\phi$	T(K)	Concentração( $cm^{-3}$ )	Incertezas sistemáticas
$N_2$	3,8	0,94	2350	2,1 e+18	$\pm 3-4\%$
$H_2O$	4,8	"	"	1,0e+18	$\pm 3-4\%$
OH	7,5	"	"	2,2e+16	$\pm 15\%$
T	2,5	"	"	NA	$\pm 3\%$
F	5,1	"	"	NA	$\pm 3-4\%$
NO	12,5	0,5	1550	2,0e+13	$\pm 15-20\%$

Fonte: Adaptado de Barlow (2003)

Dentre uma série de dados, o experimento realizado apresenta valores de temperatura e fração molar de  $O_2$ ,  $N_2$ ,  $H_2$ ,  $H_2O$  e  $OH$  em 7 pontos no eixo central do tubo, as medições iniciam a partir de  $22,5d$  e se distanciam em passos de  $22,5d$  até chegarem à posição de  $180d$ , que corresponde à altura de chama visível. Estes parâmetros serão os analisados para que a influência dos modelos de turbulência e de cinética química possa ser observada.

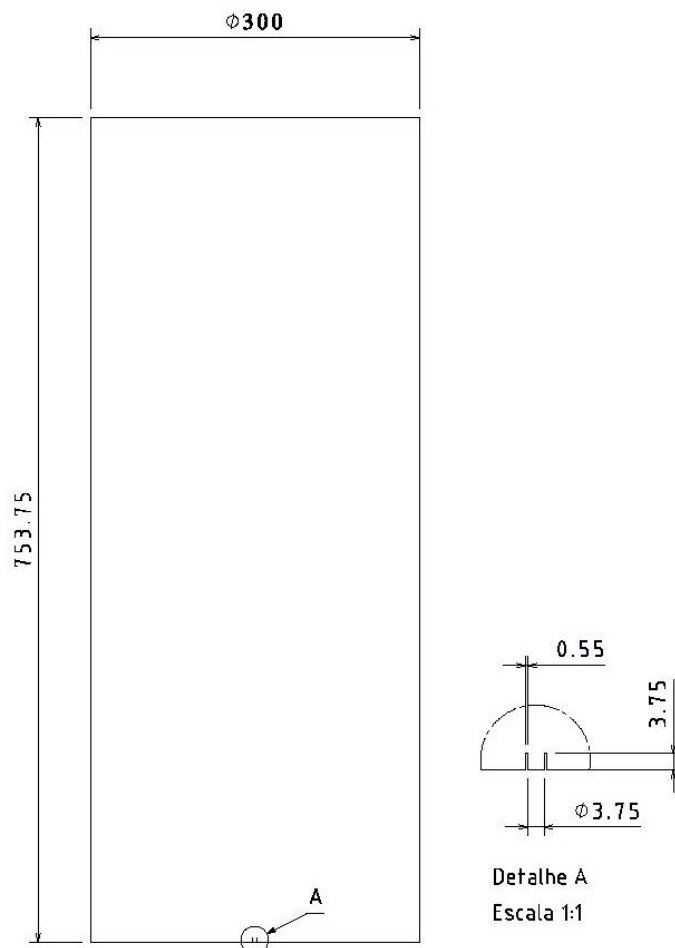
## 4.2 Modelagem do volume de controle computacional

Para chegar a todos os parâmetros necessários para a modelagem do volume de controle, foram realizadas considerações que envolveram a saída de ar secundário, o comprimento do tubo de injeção de combustível e a altura da chama visível. A fim de garantir maior acurácia da vazão de ar ao redor do jato de combustível e proporcionar uma distância das paredes à região de chama, mitigando sua influência e permitindo assim a simulação de uma queima em ambiente

não confinado, o diâmetro hidráulico da seção do túnel de vento foi o valor considerado.

O comprimento do tubo de injeção  $p$  foi escolhido de forma que a pequena zona de recirculação gerada pela presença do tubo fosse considerada (MANSOURIAN; KAMALI, 2017). A interpretação pode ser feita como um volume de controle que inicia a uma medida  $p$  abaixo do plano da seção do túnel de vento. A consideração para este parâmetro foi de  $p = d$ , de forma a ter equilíbrio entre uma geometria simples e que cumpra com os requisitos do modelo físico analisado. Por fim, para fornecer também uma altura do volume analisado que permitisse todo o desenvolvimento da chama e a medição em toda a sua extensão longitudinal, o valor de  $200d + p$  foi utilizado, por apresentar um distanciamento razoável entre a altura máxima de chama visível e o *outlet* do volume. A Figura 12 apresenta as medidas gerais do modelo.

Figura 12 – Medidas do modelo 3D desenvolvido



Fonte: Autor (2023).

### 4.3 Geração de malha

Para a realização deste trabalho, a licença do *software* comercial ANSYS foi cedida pelo Laboratório de Hidrogênio e Máquinas Térmicas da Universidade Federal do Ceará (LHMT). A malha foi gerada na plataforma ANSYS Meshing utilizando o método Multizone, que permite um equilíbrio entre a adequação à geometria, devido à possibilidade de deformação das células para adaptação aos contornos, e a precisão do modelo, já que a acurácia é aumentada com o alinhamento das linhas da malha com as linhas de corrente, mitigando a influência de problemas como difusão numérica, o que se torna possível na aplicação de células hexaédricas (FERZIGER *et al.*, 2019).

O estudo de independência de malha foi realizado utilizando células com tamanho médio de aresta de 10mm, 8mm, 7mm, 6mm, 3,5mm, 3mm, 2,5mm, e 2mm. Para manter um refinamento local mínimo em todas as simulações, a região do tubo de injeção de combustível teve um tamanho de aresta fixo de 0,5mm e a região de "parede" do volume de controle teve um refinamento por camadas, estratégia utilizada para proporcionar maior acurácia no cálculo da subcamada viscosa.

### 4.4 Métodos numéricos aplicados

O computador utilizado neste estudo foi disponibilizado pelo LHMT, suas configurações são apresentadas na Tabela 4.

Tabela 4 – Especificações do computador utilizado

Sistema operacional	Windows 11
Placa de vídeo	NVIDIA RTX A2000
Memória RAM utilizável	512 GB
Processador	Intel (R) Xeron (R) W-2255 CPU @ 3.70 GHz

Fonte: Autor (2023).

#### 4.4.1 Configurações analisadas

A plataforma ANSYS Fluent foi utilizada para a realização das simulações numéricas, todos os parâmetros apresentados na Tabela 2 foram aplicados para suas respectivas condições de contorno. Foram utilizados os dois modelos de turbulência apresentados na Seção 3.3.6 e os dois mecanismos de cinética química da Seção 3.2.2. A Tabela 5 apresenta os quatro casos



analisados neste trabalho.

Tabela 5 – Configurações de modelos de turbulência-cinética analisadas

Modelo de turbulência	Modelo de cinética química
k-ômega SST	GRI-Mech 3.0
k-ômega SST	Mecanismo reduzido de Conaire
k-epsilon padrão	GRI-Mech 3.0
k-epsilon padrão	Mecanismo reduzido de Conaire

Fonte: Autor (2023).

O algoritmo de solução de pressão e velocidade acoplados *Coupled* foi aplicado para o sistema de equações de quantidade de movimento no volume de controle. A alocação de propriedades no centro das células é a estratégia padrão utilizada pelo *Fluent*, o método de interpolação de *upwind* de segunda ordem foi aplicado para todas as variáveis. De acordo com os resultados apresentados por Pitsch *et al.* (1998), os efeitos de radiação podem ser negligenciados em uma chama difusiva de hidrogênio sem influenciar as predições do comportamento geral da chama. Portanto, a aplicação de um modelo de radiação foi negligenciada neste estudo. Espera-se, todavia, resultados superestimados nos valores de temperatura.

#### 4.4.2 Valores iniciais

Para a inicialização do algoritmo de solução, foi utilizado o recurso de inicialização híbrida, que funciona pela aplicação de métodos de interpolação dos valores fornecidos para gerar um campo de velocidade e um de pressão que forneçam uma transição suave entre as regiões de alta e baixa pressão. As demais variáveis são definidas por médias do domínio (ANSYS, 2013).

Após a realização da primeira simulação a atender a convergência, os resultados obtidos foram utilizados como condições iniciais dos cálculos subsequentes, a fim de alcançar o estado de convergência mais rapidamente. O passo de tempo característico foi calculado com base nos valores característicos de comprimento e velocidade do escoamento,  $L = 0,750m$  e  $U = 296m/s$ , seguindo a Equação 4.1. O valor resultante foi de  $\Delta t = 0,0025$ . Uma fração deste valor,  $\Delta t_i = 0,001$  foi aplicada para todas as simulações.

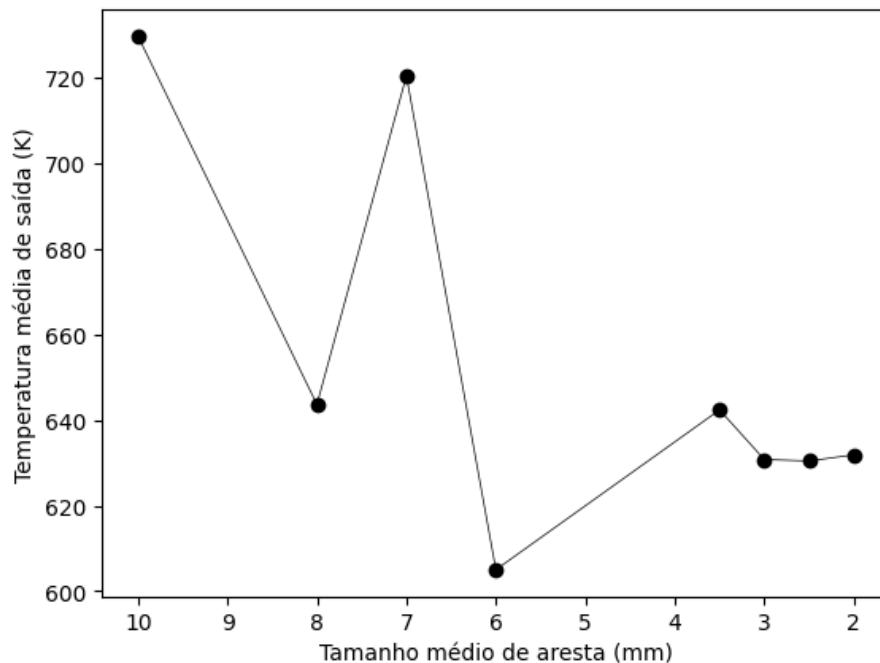
$$\Delta t = L/U. \tag{4.1}$$

## 5 RESULTADOS E DISCUSSÕES

### 5.1 Estudo de independência de malha

O valor de temperatura média na saída do volume de controle foi utilizado para realizar o estudo de independência de malha. A Figura 13 apresenta os valores obtidos para cada um dos tamanhos médios de aresta apresentados na seção 4.3. O parâmetro utilizado mostrou estabilidade a partir do valor de aresta de  $3\text{mm}$ , portanto, para atingir os resultados com acurácia e poupar custo computacional, o tamanho de malha de aresta médio utilizado foi de  $3\text{mm}$ .

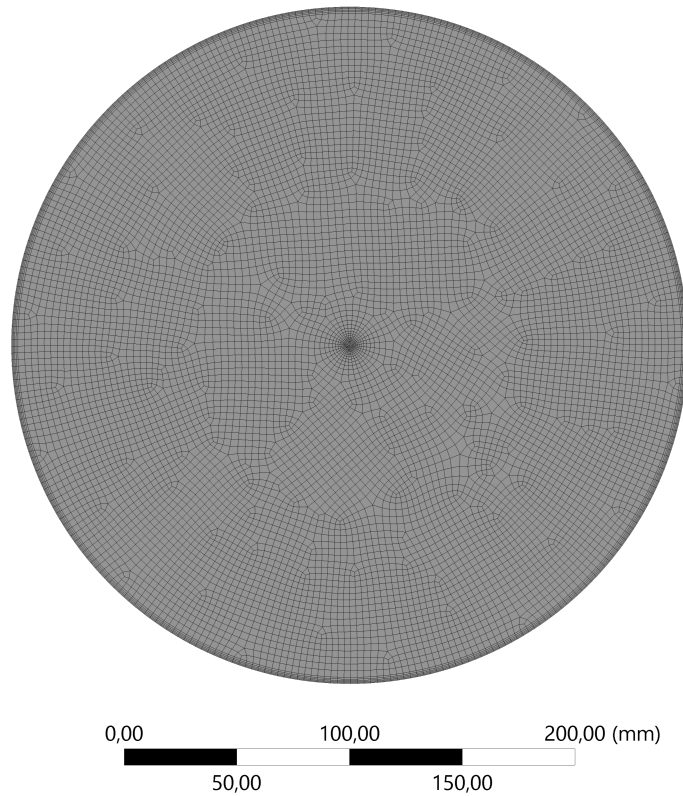
Figura 13 – Variação da temperatura média de saída em função do tamanho de aresta



Fonte: Autor (2023).

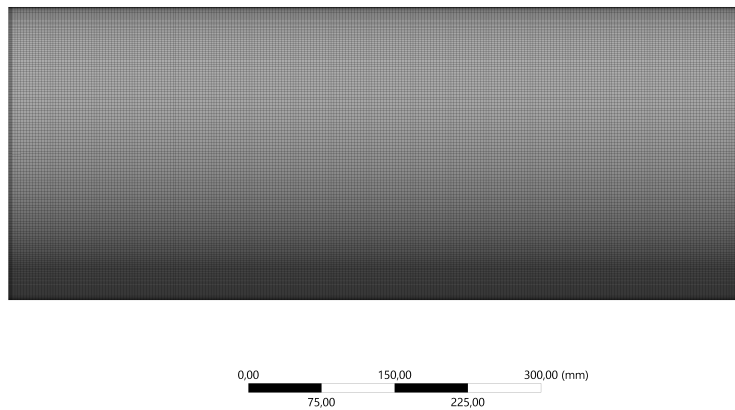
As figuras 14 e 15 mostram, respectivamente, as vistas frontal e lateral da malha utilizada para as análises deste trabalho. Na vista frontal, pode ser observada a característica de uma malha hexaédrica não cartesiana, formada por hexaedros conformados com a geometria, refinados na região do jato de combustível.

Figura 14 – Vista frontal da malha utilizada



Fonte: Autor (2023).

Figura 15 – Vista lateral da malha utilizada



Fonte: Autor (2023).

## 5.2 Comparação dos modelos de turbulência e cinética química

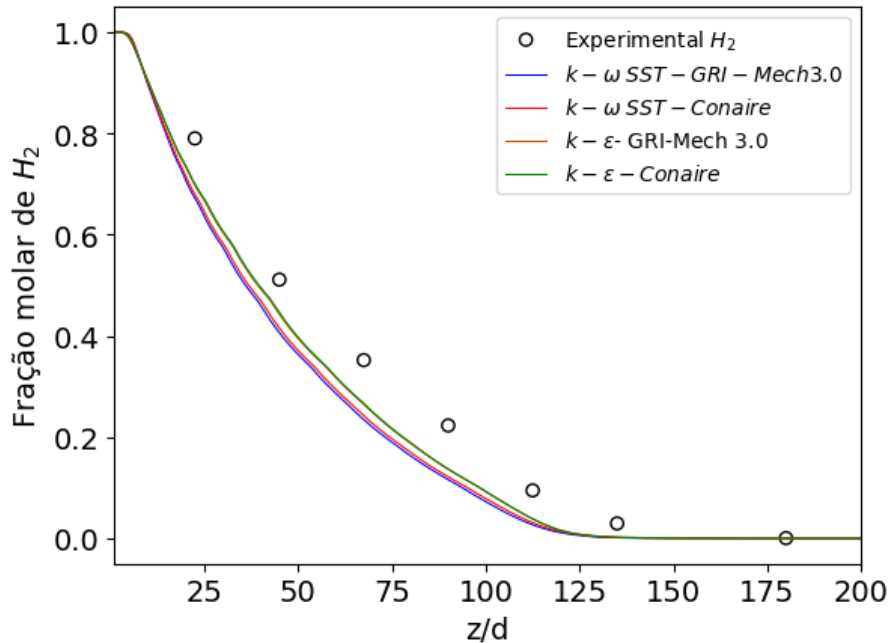
### 5.2.1 Comportamento da chama

As quatro configurações analisadas tiveram seus desempenhos comparados graficamente com os resultados experimentais dos perfis axiais para as frações molares de  $H_2$ ,  $H_2O$ ,  $O_2$ ,  $N_2$  e  $OH$  e de temperatura normalizada. De antemão, pode ser observado, em geral, que para o mesmo modelo de turbulência ambos mecanismos de cinética química apresentam valores próxi-

mos entre si, apesar das diferenças no número de reações envolvendo as espécies analisadas e nos valores de cada constante.

As configurações que utilizaram o modelo  $k - \varepsilon$  padrão tiveram uma melhor leitura da curva axial de fração molar de  $H_2$ , como pode ser visto na Figura 16. Em geral, todas as simulações superestimaram os valores de consumo de  $H_2$ .

Figura 16 – Fração molar de  $H_2$  ao longo da chama

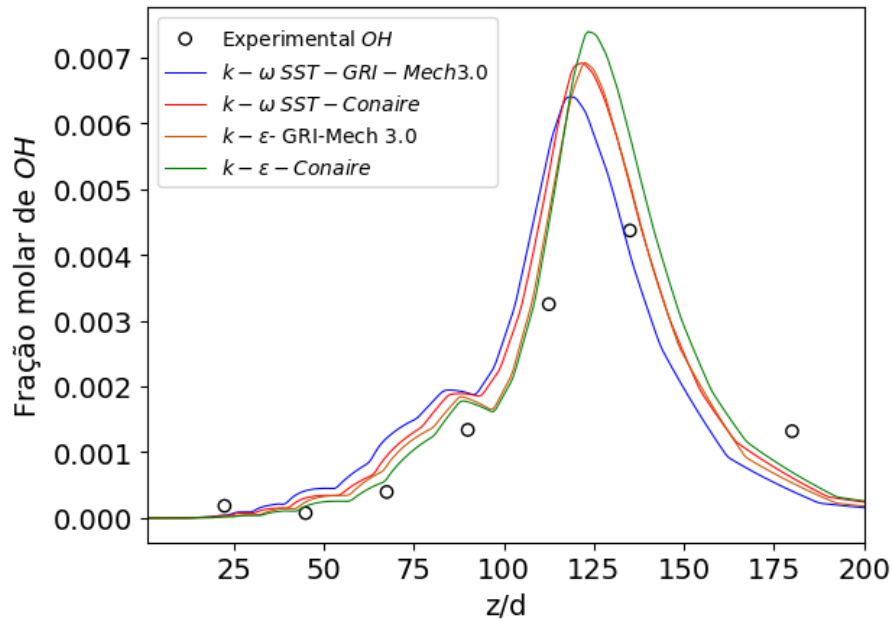


Fonte: Autor (2023).

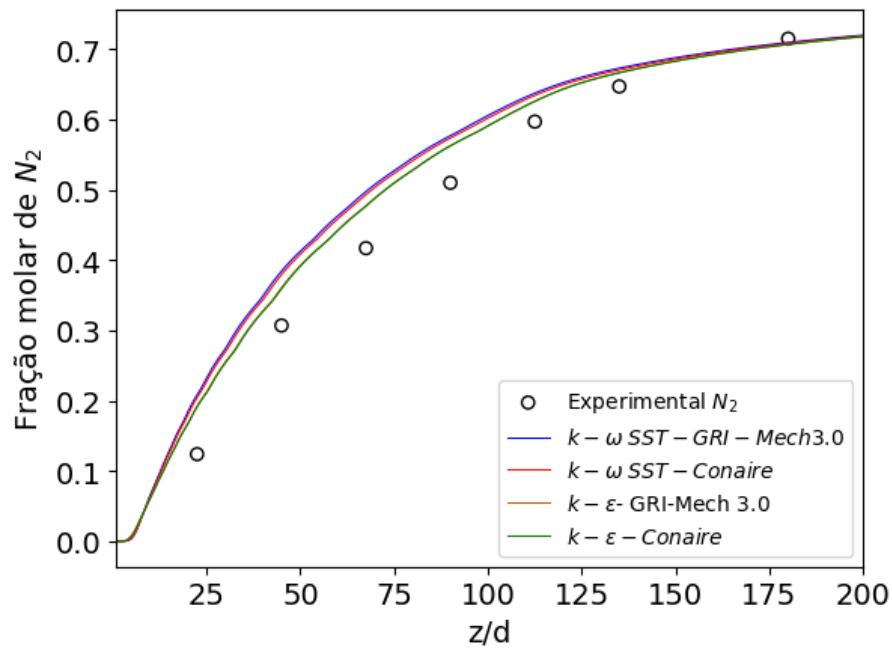
A maior variação entre os casos é vista no perfil na fração molar de  $OH$ , apresentado na Figura 17, onde todas as diferenças são mais evidentes. Novamente, o modelo  $k - \varepsilon$ , especialmente com o mecanismo de Conaire *et al.* (2004), apresentou melhor aproximação para este parâmetro. Ainda sobre esta curva, maior proximidade de resultados numéricos ocorreu entre as configurações  $k - \varepsilon$  padrão - GRI-Mech 3.0 e  $k - \omega SST$  com mecanismo reduzido.

A curva axial de fração molar de  $N_2$ , mostrada na Figura 18, também é melhor descrita pelo modelo  $k - \varepsilon$  padrão. A produção de  $N_2$  obtida pelas simulações, entretanto, também mostra resultados com valores acima do experimental em quase toda extensão da chama, com exceção do último ponto.

Como pode ser notado na Figura 19 todas as configurações falharam em descrever o comportamento da distribuição axial da fração molar de  $O_2$  na região de  $z/d = 22,5$ . Este maior distanciamento pode ter ocorrido por que os modelos de turbulência não foram capazes de captar o efeito de recirculação na área próxima à injeção de combustível ou pelo erro de medição

Figura 17 – Fração molar de  $OH$  ao longo da chama

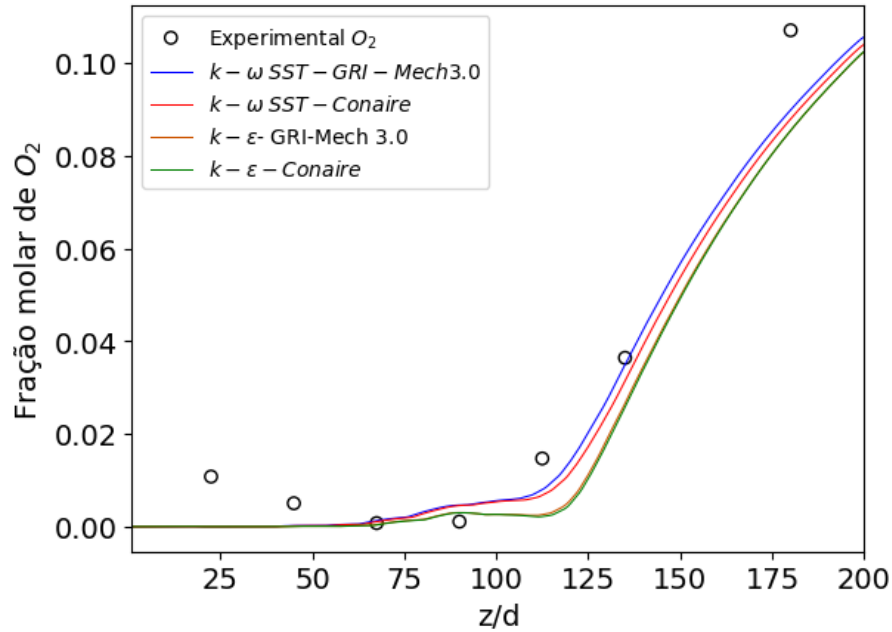
Fonte: Autor (2023).

Figura 18 – Fração molar de  $N_2$  ao longo da chama

Fonte: Autor (2023).

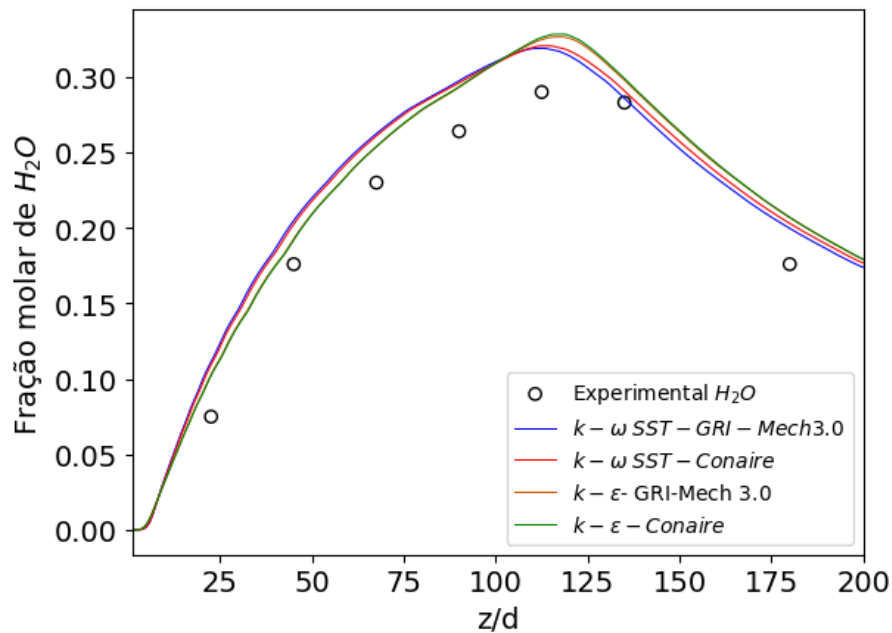
associado ao experimento. Neste caso, ainda, o melhor desempenho foi obtido pela curva  $k - \omega$  SST com o GRI-Mech 3.0.

A taxa de produção de  $H_2O$  está diretamente ligada com o aumento de temperatura, como apresentado na seção 3.2.2, o que resulta na semelhança entre os gráficos da fração molar de  $H_2O$ , e da temperatura normalizada, expostos nas figuras 20 e 21, respectivamente. Em ambos os perfis, as leituras das diferentes combinações aplicadas também se mostraram semelhantes. O

Figura 19 – Fração molar de  $O_2$  ao longo da chama

Fonte: Autor (2023).

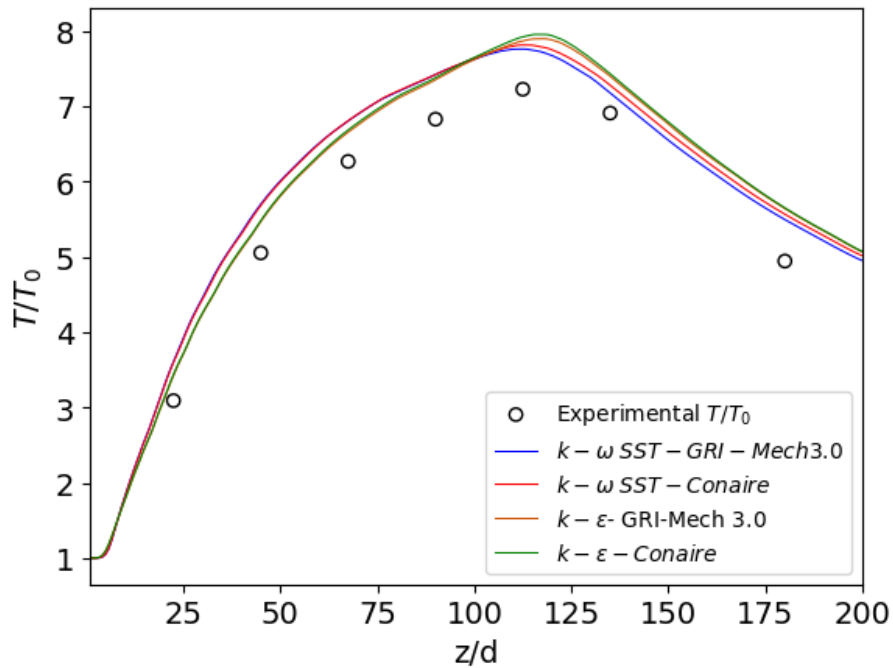
modelo de turbulência  $k - \epsilon$ , com baixa diferença entre os resultados dos mecanismos de cinética utilizados, descreveu com melhor aproximação dos dados experimentais até a região próxima ao pico de temperatura em  $z/d = 100$ . A partir deste ponto, o modelo  $k - \omega SST$  passou a ter melhor acurácia, sobretudo com o mecanismo GRI-Mech 3.0.

Figura 20 – Fração molar de  $H_2O$  ao longo da chama

Fonte: Autor (2023).

Por fim, vale ressaltar que a hipótese de desconsideração da radiação e o uso das

Figura 21 – Temperatura normalizada ao longo da chama



Fonte: Autor (2023).

das constantes dos modelos de turbulência com seus valores padrão podem ter influenciado a velocidade da combustão, gerando os resultados com valores superestimados de temperatura, produção de  $H_2O$  e consumo de  $H_2$ .

### 5.2.2 Desempenho computacional

A Tabela 6 apresenta o tempo que cada simulação levou para chegar à convergência. Todos os modelos, com exceção do  $k - \omega$  SST, levam pelo menos  $1h30min$ , com divergência máxima de 15 minutos entre os casos. Portanto, para o caso estudado, os três demais modelos são intercambiáveis.

Tabela 6 – Tempo necessário para convergência

Modelo utilizado	Tempo de simulação
$k - \omega$ SST -GRI Mech 3.0	1 h 44 min
$k - \omega$ SST - Conaire	2 h 48 min
$k - \epsilon$ -GRI Mech 3.0	1 h 33 min
$k - \epsilon$ - Conaire	1 h 48 min

Fonte: Autor (2023).

## 6 CONCLUSÃO

Em conclusão, o volume de controle modelado foi capaz de emular o sistema físico analisado com exatidão. Foi conduzido um estudo de independência de malha que chegou a um tamanho de aresta médio de  $3mm$ , proporcionando economia da capacidade computacional ao longo do trabalho em paralelo a acurácia dos resultados obtidos. Em relação a tais resultados, as quatro configurações analisadas apresentaram uma boa aproximação do caso real, os mecanismos de cinética química utilizados tiveram menor influência do que os modelos de turbulência. Dentre tais configurações, as que envolvem o modelo  $k - \omega$  SST apresentaram melhores resultados nas curvas de  $O_2$  em geral e nas curvas de  $H_2O$  e Temperatura normalizada a partir do ponto  $z/d = 100$ . Já as configurações envolvendo o modelo  $k - \epsilon$ , melhor aproximação foi obtida na descrição das curvas de  $N_2$ ,  $OH$ . Em relação à modelagem dos fenômenos químicos, a hipótese de utilizar um mecanismo mais complexo que envolva sub-etapas que compõem o fenômeno analisado, introduzida na seção 3.2.2, se mostrou válida tendo em vista o bom desempenho do GRI Mech 3.0. O mecanismo reduzido de Conaire *et al.* (2004) também se mostrou fiel aos resultados experimentais, não expressando ganho no quesito de exigência computacional. Ademais, todos os casos calcularam resultados superestimados para a temperatura da chama e para o consumo e produção de espécies, tal comportamento pode ser devido à desconsideração de um modelo de radiação, por uso não otimizado dos valores constantes de cada modelo de turbulência ou uma ação conjunta destes fatores.



## 7 SUGESTÕES DE TRABALHOS FUTUROS

Como exposto nas discussões realizadas no Capítulo 5, a ausência de um modelo de radiação e o uso de valores padrões para as constantes de cada modelo de turbulência podem ter participação nos resultados superestimados obtidos. Portanto, uma análise posterior pode ser realizada a fim de avaliar a participação dos modelos de radiação no problema em questão. Ademais, a otimização das constantes dos modelos em futuros trabalhos envolvendo este tema também é uma alternativa para alcançar uma descrição mais fidedigna dos fenômenos analisados.

Por fim, os métodos utilizados neste trabalho retornam bons resultados, os tornando aplicáveis na simulação de problemas práticos como queimadores industriais, amplamente aplicados em derretimento de vidro e na indústria siderúrgica em geral. Parâmetros como fluxo de oxidante com *swirl*, diferentes temperaturas e velocidades de injeção de reagentes também podem ser empregados e investigados a partir do discutido no vigente trabalho.

## REFERÊNCIAS

- ANSYS. Ansys fluent theory guide 15.0. ANSYS, Canonsburg, PA, v. 33, 2013.
- BARLOW, R. S. **Sandia H<sub>2</sub>/He Flame Data - Release 2.0**. 2003. Disponível em: <<http://www.ca.sandia.gov/TNF>>.
- BARLOW, R. S.; CARTER, C. D. **Raman/Rayleigh/LIF Measurements of Nitric Oxide Formation in Turbulent Hydrogen Jet Flames**. 1994. 261-280 p.
- BARLOW, R. S.; CARTER, C. D. **Relationships among Nitric Oxide, Temperature, and Mixture Fraction in Hydrogen Jet Flames**. 1996. 288-289 p.
- CONAIRE, M. O.; CURRAN, H. J.; SIMMIE, J. M.; PITZ, W. J.; WESTBROOK, C. K. **A Comprehensive Modeling Study of Hydrogen Oxidation**. 2004.
- EL-MAHALLAWY, F.; HABIK, E.-D. R. **FUNDAMENTALS AND TECHNOLOGY OF COMBUSTION**. [S.l.: s.n.], 2002.
- FERZIGER, J. H.; PERIĆ, M.; STREET, R. L. **Computational methods for fluid dynamics**. [S.l.]: springer, 2019.
- GLASSMAN, I.; YETTER, R. A.; GLUMAC, N. **Combustion**. [S.l.: s.n.], 2014. 773 p. ISBN 9780124079137.
- HAMI, K. Turbulence modeling a review for different used methods. **International Journal of Heat and Technology**, International Information and Engineering Technology Association, v. 39, p. 227–234, 2 2021. ISSN 03928764.
- IEA. World energy outlook 2023. In: IEA PARIS, FRANCE. [S.l.], 2023.
- LAUNDER, B. E. B. E.; SPALDING, D. B. D. B. **Lectures in mathematical models of turbulence / B. E. Launder and D. B. Spalding**. London: Academic Press, 1972.
- LOPEZ-RUIZ, G.; ALAVA, I.; BLANCO, J. Impact of h<sub>2</sub>/ch<sub>4</sub> blends on the flexibility of micromix burners applied to industrial combustion systems. **Energy**, v. 270, p. 126882, 5 2023. ISSN 03605442.
- MALISKA, C. R. **Fundamentals of Computational Fluid Dynamics: The Finite Volume Method**. 1. ed. [S.l.]: Springer Cham, 2023.
- MANSOURIAN, M.; KAMALI, R. Computational fluid dynamics analysis of a synthesis gas turbulent combustion in a round jet burner. **Acta Astronautica**, Elsevier, v. 134, p. 133–140, 2017.
- MENTER, F. R. Two-equation eddy-viscosity turbulence models for engineering applications. **AIAA Journal**, v. 32, p. 1598–1605, 8 1994. ISSN 0001-1452.
- OLIVEIRA, R. C. de. **Panorama do hidrogênio no Brasil**. [S.l.], 2022.
- PITSCH, H.; CHEN, M.; PETERS, N. Unsteady flamelet modeling of turbulent hydrogen-air diffusion flames. In: ELSEVIER. **Symposium (international) on combustion**. [S.l.], 1998. v. 27, n. 1, p. 1057–1064.

RAGHAVAN, V. **Combustion Technology**. [S.l.]: Springer International Publishing, 2022.

RAO, M. R.; RAO, G. A. P.; CHARYULU, B.; SINGH, H. Numerical studies and validation of combustor and annular isolator interactions of hydrocarbon based axisymmetric dual combustion ramjet. **Aerospace Science and Technology**, v. 106, p. 106185, 11 2020. ISSN 12709638.

REGGENTE, M. **Statistical gas distribution modelling for mobile robot applications**. Tese (Doutorado) — Örebro university, 2014.

RODRIGUEZ, S. **Applied Computational Fluid Dynamics and Turbulence Modeling: Practical Tools, Tips and Techniques**. [S.l.]: Springer Nature, 2019.

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.; LISSANSKI, V. V.; QIN, Z. **Gri-mech 3.0: An optimized detailed chemical reaction mechanism for methane combustion**. [S.l.], 2000. Acessado em: 07/10/2023. Disponível em: <<http://combustion.berkeley.edu/gri-mech/version30/text30.html>>.

URNS, S. R. **Introdução à combustão: conceitos e aplicações**. 3. ed. [S.l.: s.n.], 2013. ISBN 9788580552751.

VERSTEEG, H. K.; MALALASEKERA, W. **An Introduction to Computational Fluid Dynamics Second Edition**. [s.n.], 2007. Large eddy simulation pagina 112. Disponível em: <[www.pearsoned.co.uk/versteeg](http://www.pearsoned.co.uk/versteeg)>.

WESTBROOK, C. K.; DRYER, F. L. **CHEMICAL KINETIC MODELING OF HYDROCARBON COMBUSTION**. 1984. 1-57 p.

WILCOX, D. C. *et al.* **Turbulence modeling for CFD**. [S.l.]: DCW industries La Canada, CA, 1998. v. 2.