

FGM - Flamelet Generated Manifolds

PME 5411 – Fundamentos de Escoamentos Turbulentos Reativos

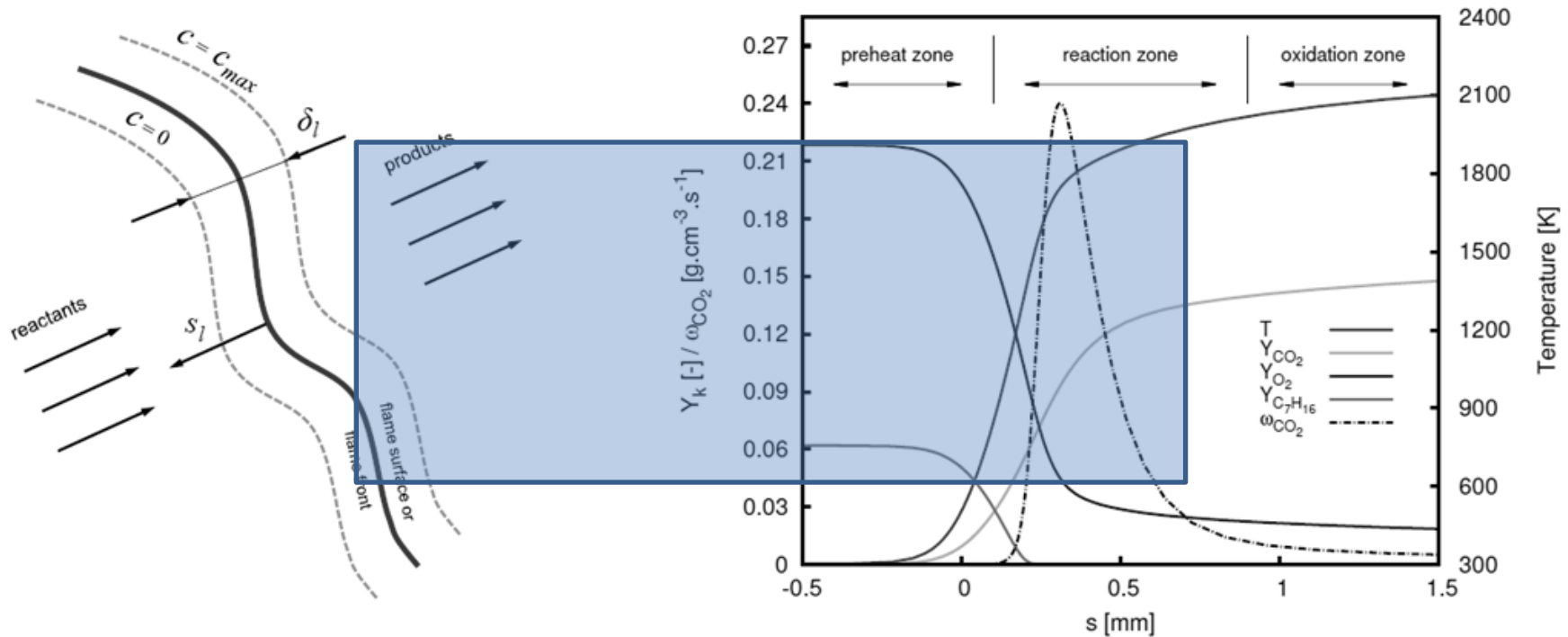
Prof. Dr.-Ing. Fernando Luiz Sacomano Filho

- A ideia principal por trás do método FGM consiste na redução dos mecanismos químicos pela construção de um espaço topológico matemático: uma variedade (no inglês *manifold*).
- Este conceito foi previamente introduzido pelo método ILDM (*Intrinsic Low Dimension Manifold*), que constrói um *manifold* por meio de uma análise de autovalor do Jacobiano local das taxas de reações químicas.
- Para obter este Jacobiano, os fluxos advectivos e difusivos de espécies químicas são desprezados.
- O FGM usa um conjunto de chamas unidimensionais, os flamelets, para construir os manifolds → isso permite a inclusão dos efeitos da advecção e difusão química no procedimento de redução
- Nesse sentido, o FGM fornece uma descrição mais abrangente da química com menos variáveis de controle em comparação com o ILDM.
- É válido destacar que, uma vez que as reações químicas se resumem à estrutura elementar das chamas unidimensionais, a aplicação do FGM a escoamentos turbulentos fica restrita ao regime de flamelet.

- Depois que um *manifold* é obtido, uma tabela de acesso rápido é construída sobre as variáveis de controle limitadas.
- A construção deste tipo de banco de dados é motivada pela facilidade de acesso durante a evolução da simulação.
- A tabela resultante é armazenada na memória do computador, o que pode ser uma tarefa restritiva quando muitas variáveis de controle são usadas.
- O número de variáveis de controle pode variar de acordo com o tipo de fenômeno a ser representado.
- Considerando a definição feita por Van Oijen (2002), dois tipos de variáveis de controle podem ser distinguidas:
 - variáveis que mudam por reações químicas (com base nas frações de massa das espécies) e
 - variáveis que são conservadas ao longo da reação (como Z , p e h - assumindo $Le = 1$).
- Tipicamente, pelo menos duas variáveis de controle são utilizadas - Z para representar a composição do fluido e uma variável de progresso da reação (Y_{pV}).
- Para representar as perdas de calor, a entalpia é introduzida como uma variável de controle e, como resultado, um *manifold* 3D é obtido.

- Note que, a composição da mistura de equilíbrio químico é completamente determinada pelos valores das variáveis conservadas, enquanto o processo de combustão do estado não queimado ao queimado é descrito pelas **variáveis de controle reativas**, que são referidas como **variáveis de progresso**.
- Para aplicação em códigos de simulação de chama, um *manifold* é parametrizado por variáveis de controle.
- As frações de massa das espécies ou combinações lineares delas podem ser usadas como variáveis de controle.
- Na verdade, qualquer combinação de espécies pode ser usada, desde que a parametrização da variedade leve a uma descrição única da composição da mistura pelas variáveis de controle.
- Para o *manifold* 1D (chama pré-misturada), Y_{CO_2} é uma variável de controle apropriada.

FGM – exemplo

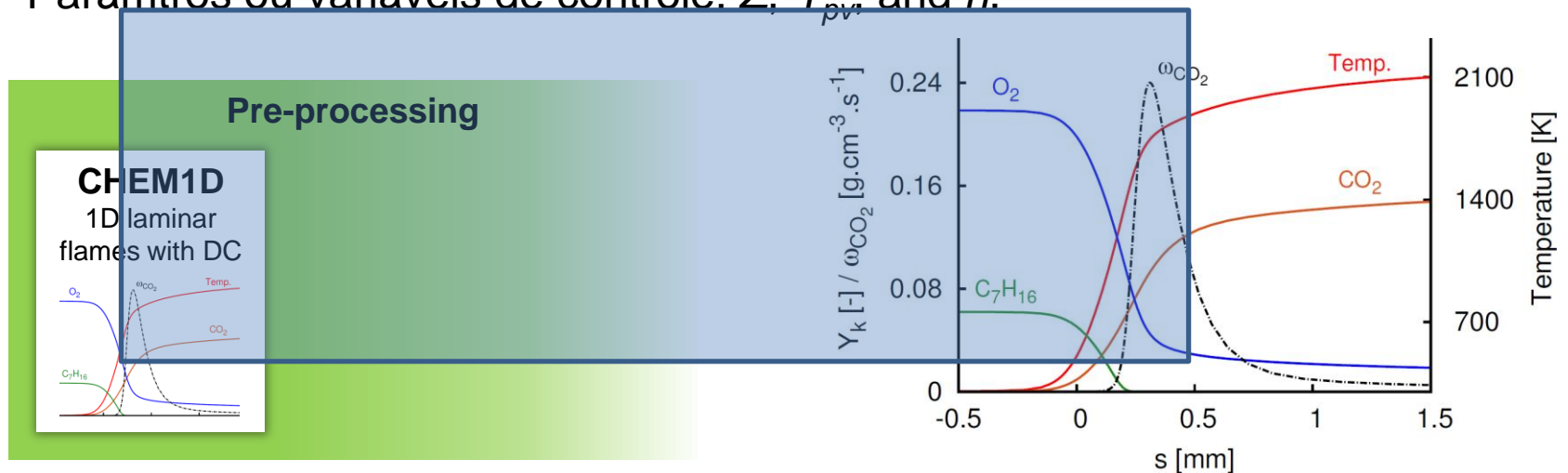


Sacomano Filho, F. L. (2017) PhD Thesis - © Copyright 2017 Shaker Verlag

- Em geral, uma ou mais das quantidades conservadas p , h e Z podem variar no espaço ou no tempo devido a outros processos além da reação química, por exemplo: mistura e resfriamento / aquecimento.
- Se as variações em uma variável conservada são esperadas como importantes no aplicativo, essa variável deve ser adicionada ao *manifold* como uma variável de controle adicional.

Química tabelada

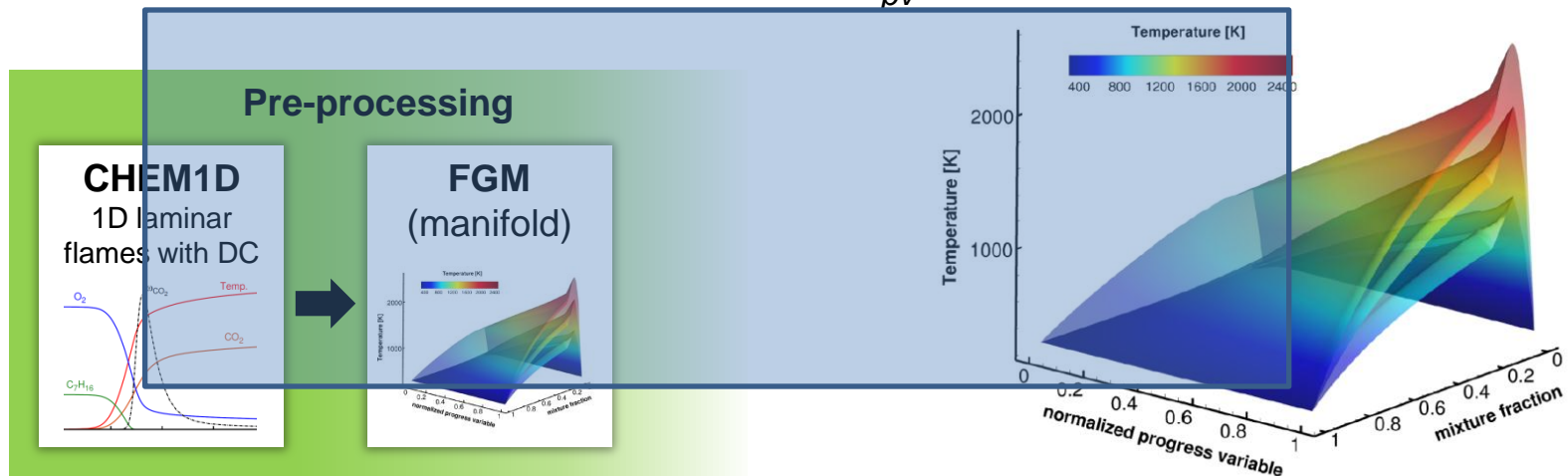
- Flamelet Generated Manifold (FGM)
- Representação de chamas 3D com um conjunto de chamas 1D
- Parâmetros ou variáveis de controle: Z , $Y_{p,v}$ and h .



Sacomano Filho, F. L. (2017) PhD Thesis - © Copyright 2017 Shaker Verlag

Química tabelada

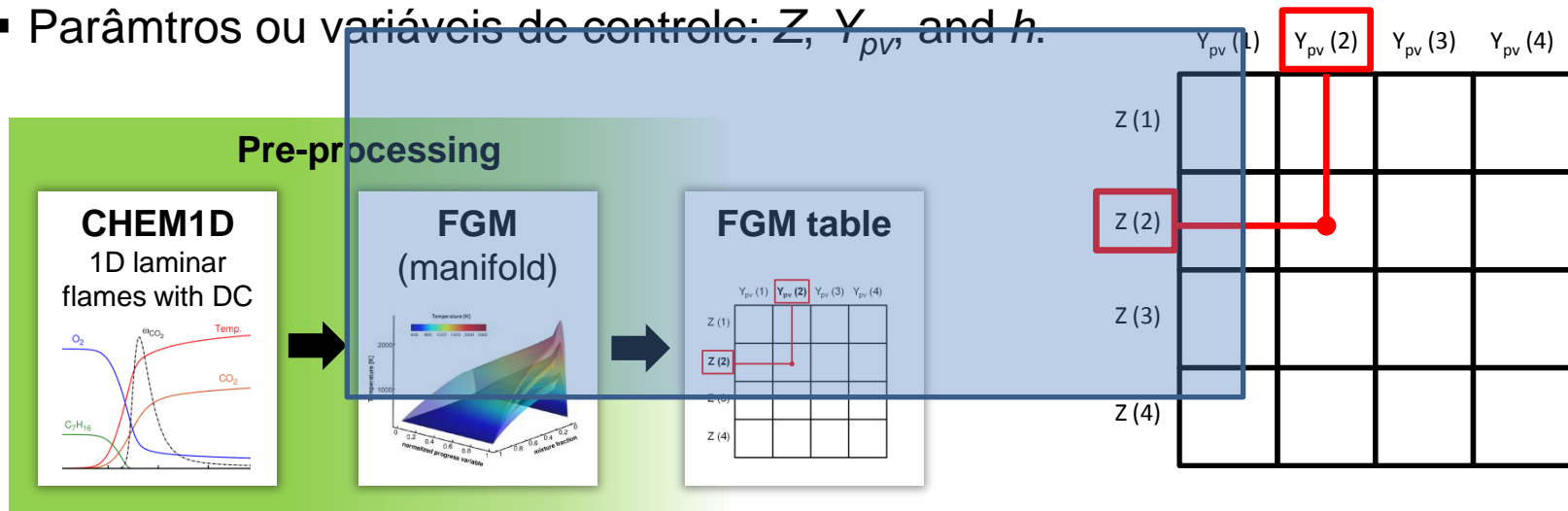
- Flamelet Generated Manifold (FGM)
- Representação de chamas 3D com um conjunto de chamas 1D
- Parâmetros ou variáveis de controle: Z , Y_{pV} , and h .



Sacomano Filho, F. L. (2017) PhD Thesis - © Copyright 2017 Shaker Verlag

Química tabelada

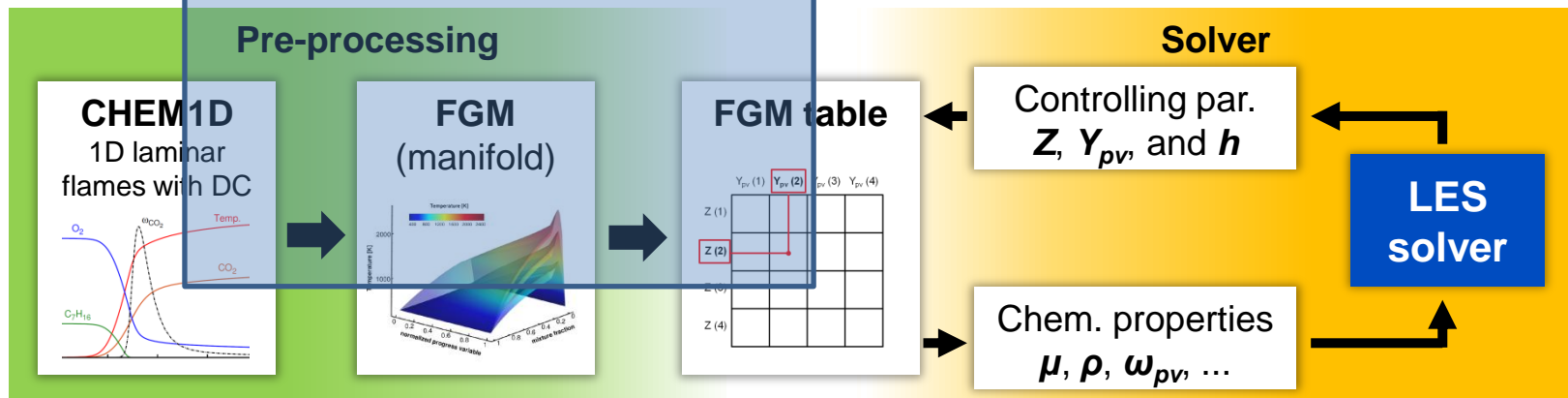
- Flamelet Generated Manifold (FGM)
- Representação de chamas 3D com um conjunto de chamas 1D
- Parâmetros ou variáveis de controle: Z , Y_{pv} , and h .



Sacomano Filho, F. L. (2017) PhD Thesis - © Copyright 2017 Shaker Verlag

Química tabelada

- Flamelet Generated Manifold (FGM)
- Representação de chamas 3D com um conjunto de chamas 1D
- Parâmetros ou variáveis de controle: Z , Y_{pv} , and h .



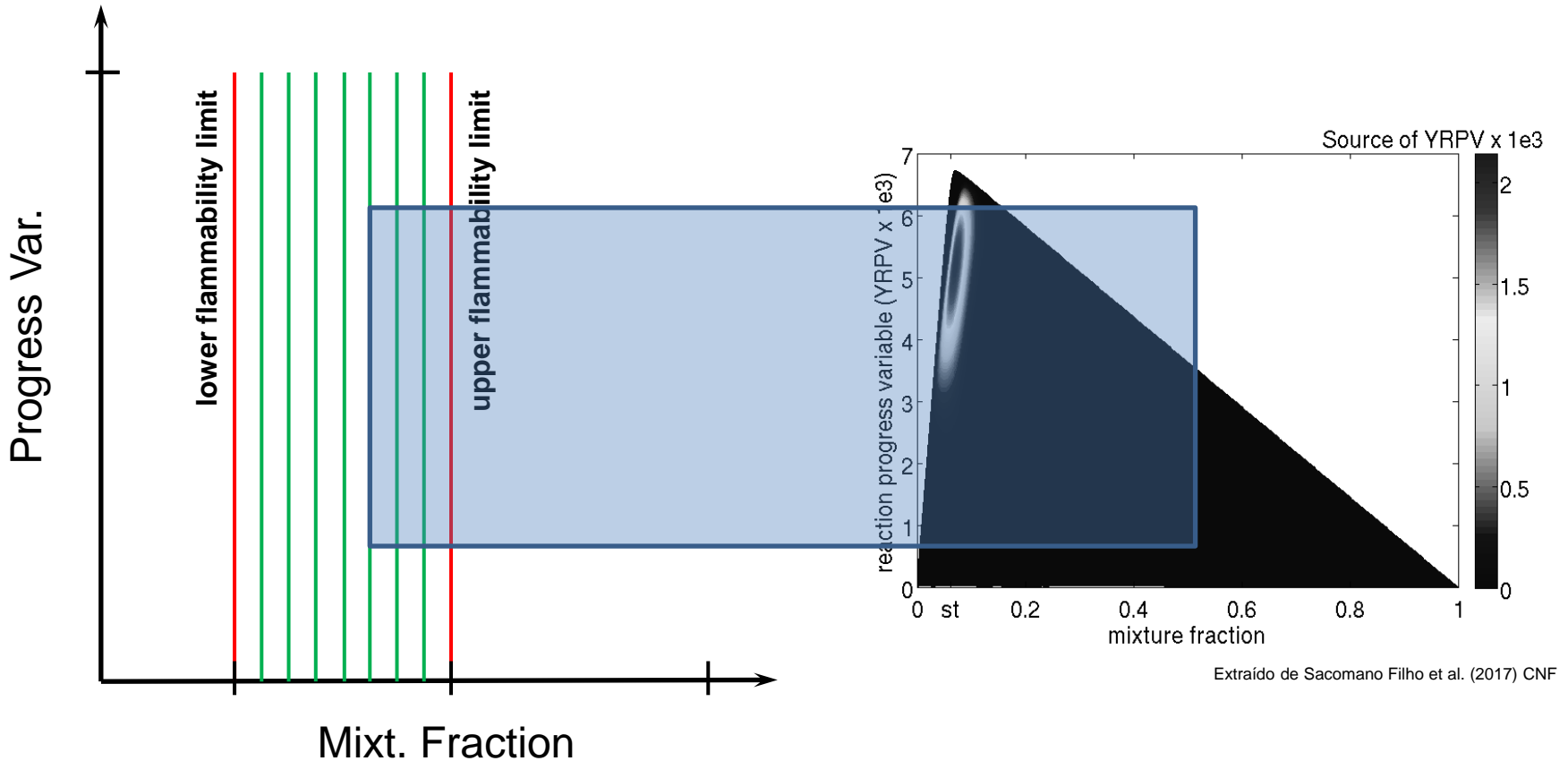
Sacomano Filho, F. L. (2017) PhD Thesis - © Copyright 2017 Shaker Verlag

FGM – construção

Chama pré-misturada

- Detailed n-heptane mechanism → 88 species and 387 reactions.

- Progress variable:
$$Y_{RPV} = \frac{Y_{CO_2}}{MW_{CO_2}} + \frac{Y_{H_2O}}{2 \cdot MW_{H_2O}} + \frac{Y_{CO}}{2 \cdot MW_{CO}}$$



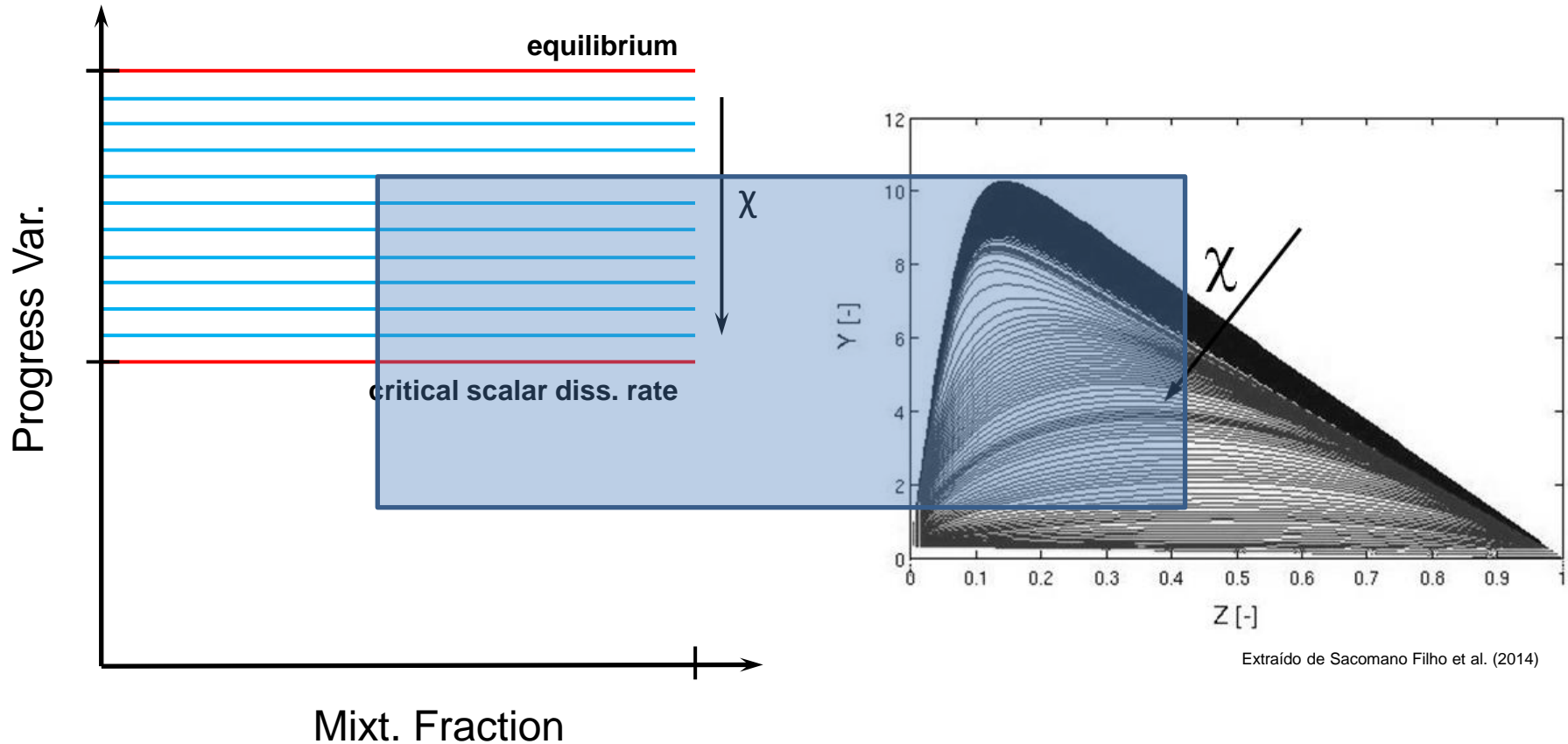
FGM – construção

Chama de difusão

- Detailed n-heptane mechanism → 88 species and 387 reactions.

- Progress variable:

$$Y_{RPV} = \frac{Y_{CO_2}}{MW_{CO_2}} + \frac{Y_{H_2O}}{MW_{H_2O}} + \frac{Y_{H_2}}{MW_{H_2}}$$

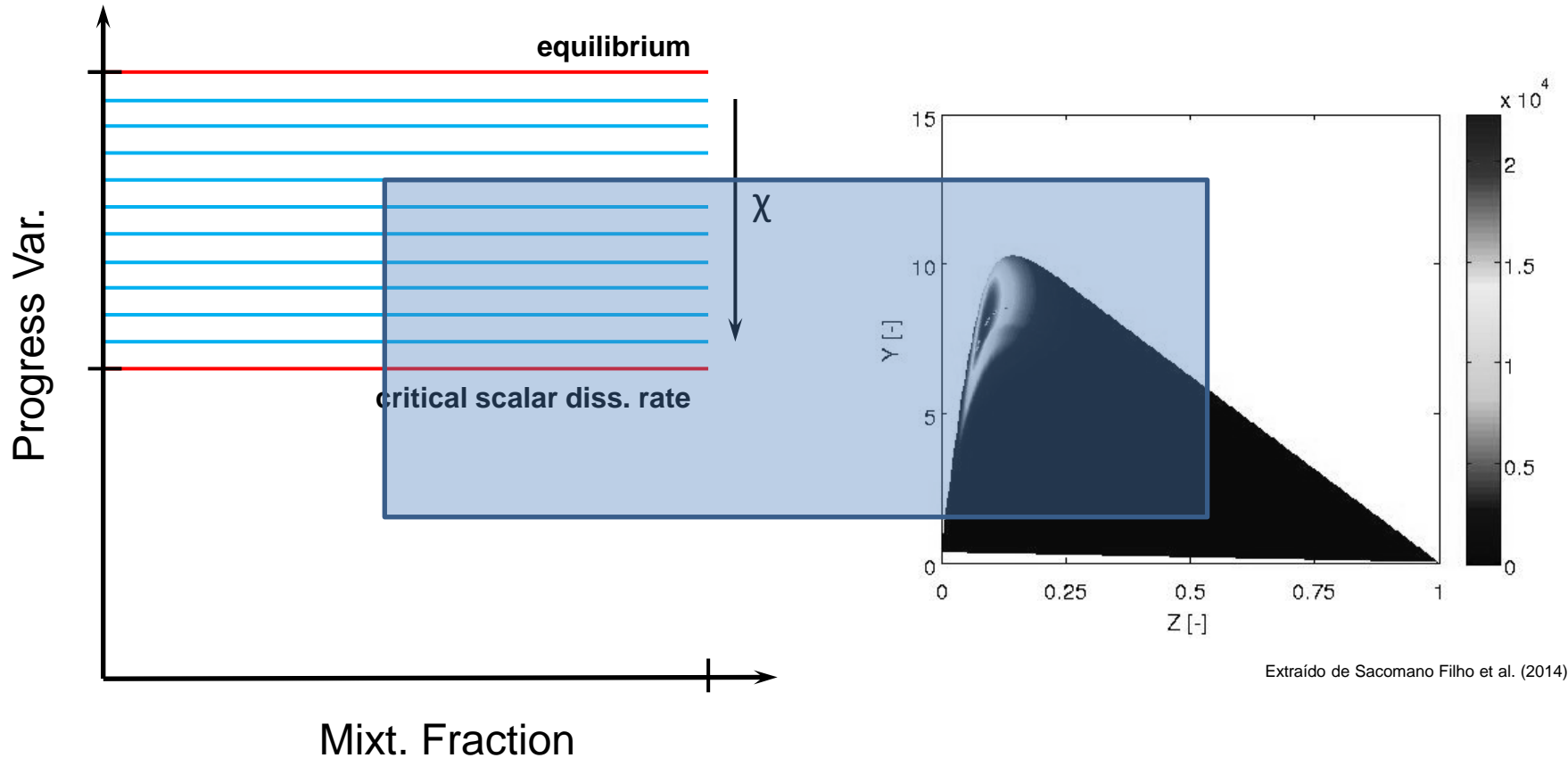


FGM – construção

Chama de difusão

- Detailed n-heptane mechanism → 88 species and 387 reactions.

- Progress variable:
$$Y_{RPV} = \frac{Y_{CO_2}}{MW_{CO_2}} + \frac{Y_{H_2O}}{MW_{H_2O}} + \frac{Y_{H_2}}{MW_{H_2}}$$



Extraído de Sacomano Filho et al. (2014)

Referências sugeridas

- J. A. Van Oijen. Flamelet-Generated Manifolds : Development and Application to Premixed Laminar Flames. PhD thesis, Technische Universiteit Eindhoven, 2002.
- F.L. Sacomano Filho, Novel Approach Toward the Consistent Simulation of Turbulent Spray Flames Using Tabulated Chemistry Phd thesis, Technische Universitaet Darmstadt, Darmstadt, Germany, 2017.
- J.A. van Oijen , A. Donini , R.J.M. Bastiaans , J.H.M. ten Thijsse Boonkcamp , L.P.H. de Goey , State-of-the-art in premixed combustion modeling using flamelet generated manifolds, Prog. Energy Combust. Sci. 57 (2016) 30–74 .
- M. Chrigui, J. D. Gounder, A. Sadiki, A. R. Masri, and J. Janicka. Partially premixed reacting acetone spray using LES and FGM tabulated chemistry. Combust. Flame, 159(8):2718–2741, 2012.
- F. L. Sacomano Filho, M. Chrigui, A. Sadiki & J. Janicka (2014) Les-Based Numerical Analysis of Droplet Vaporization Process in Lean Partially Premixed Turbulent Spray Flames, Combustion Science and Technology, 186:4-5, 435-452.
- Sacomano Filho, F.L.; Kuenne, G.; Chrigui, M.; Sadiki, A.; Janicka, J. A consistent Artificially Thickened Flame approach for spray combustion using LES and the FGM chemistry reduction method: Validation in Lean Partially Pre-Vaporized flames. Combust. Flame 2017, 184, 68–89.