



Ministério da
**Ciência, Tecnologia
e Inovação**



sid.inpe.br/mtc-m19/2013/01.31.16.43-TDI

SIMULAÇÃO DE GRANDES ESCALAS PARA CHAMAS REATIVAS NÃO PREMISTURADAS COM QUÍMICA DETALHADA

Nicolas Moises Cruz Salvador

Tese de Doutorado do Curso de Pós-Graduação em Engenharia e Tecnologia Espaciais/Combustão e Propulsão, orientada pelos Drs. Wladimir Mattos da Costa Dourado e Márcio Teixeira de Mendonça, aprovada em 07 de dezembro de 2012.

URL do documento original:

<<http://urlib.net/8JMKD3MGP7W/3DFEJDS>>

INPE
São José dos Campos
2012

PUBLICADO POR:

Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais - INPE

Gabinete do Diretor (GB)

Serviço de Informação e Documentação (SID)

Caixa Postal 515 - CEP 12.245-970

São José dos Campos - SP - Brasil

Tel.:(012) 3208-6923/6921

Fax: (012) 3208-6919

E-mail: pubtc@sid.inpe.br

CONSELHO DE EDITORAÇÃO E PRESERVAÇÃO DA PRODUÇÃO INTELLECTUAL DO INPE (RE/DIR-204):

Presidente:

Marciana Leite Ribeiro - Serviço de Informação e Documentação (SID)

Membros:

Dr. Antonio Fernando Bertachini de Almeida Prado - Coordenação Engenharia e Tecnologia Espacial (ETE)

Dr^a Inez Staciarini Batista - Coordenação Ciências Espaciais e Atmosféricas (CEA)

Dr. Gerald Jean Francis Banon - Coordenação Observação da Terra (OBT)

Dr. Germano de Souza Kienbaum - Centro de Tecnologias Especiais (CTE)

Dr. Manoel Alonso Gan - Centro de Previsão de Tempo e Estudos Climáticos (CPT)

Dr^a Maria do Carmo de Andrade Nono - Conselho de Pós-Graduação

Dr. Plínio Carlos Alvalá - Centro de Ciência do Sistema Terrestre (CST)

BIBLIOTECA DIGITAL:

Dr. Gerald Jean Francis Banon - Coordenação de Observação da Terra (OBT)

REVISÃO E NORMALIZAÇÃO DOCUMENTÁRIA:

Marciana Leite Ribeiro - Serviço de Informação e Documentação (SID)

Yolanda Ribeiro da Silva Souza - Serviço de Informação e Documentação (SID)

EDITORAÇÃO ELETRÔNICA:

Maria Tereza Smith de Brito - Serviço de Informação e Documentação (SID)

Luciana Manacero - Serviço de Informação e Documentação (SID)



Ministério da
**Ciência, Tecnologia
e Inovação**



sid.inpe.br/mtc-m19/2013/01.31.16.43-TDI

SIMULAÇÃO DE GRANDES ESCALAS PARA CHAMAS REATIVAS NÃO PREMISTURADAS COM QUÍMICA DETALHADA

Nicolas Moises Cruz Salvador

Tese de Doutorado do Curso de Pós-Graduação em Engenharia e Tecnologia Espaciais/Combustão e Propulsão, orientada pelos Drs. Wladimir Mattos da Costa Dourado e Márcio Teixeira de Mendonça, aprovada em 07 de dezembro de 2012.

URL do documento original:

<<http://urlib.net/8JMKD3MGP7W/3DFEJDS>>

INPE
São José dos Campos
2012

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP)

Salvador, Nicolas Moises Cruz.

Sa38s Simulação de grandes escalas para chamas reativas não premisturadas com química detalhada / Nicolas Moises Cruz Salvador. – São José dos Campos : INPE, 2012.

xxiv + 198 p. ; (sid.inpe.br/mtc-m19/2013/01.31.16.43-TDI)

Tese (Doutorado do Curso de Pós-Graduação em Engenharia e Tecnologia Espaciais/Combustão e Propulsão) – Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais, São José dos Campos, 2012.

Orientadores : Drs. Wladimir Mattos da Costa Dourado e Márcio Teixeira de Mendonça.

1. simulação de grandes escalas. 2. combustão turbulenta. 3. chamas de difusão. 4. cinético-química. 5 chamas pré-misturadas. I.Título.

CDU 544.452.42

Copyright © 2012 do MCT/INPE. Nenhuma parte desta publicação pode ser reproduzida, armazenada em um sistema de recuperação, ou transmitida sob qualquer forma ou por qualquer meio, eletrônico, mecânico, fotográfico, reprográfico, de microfilmagem ou outros, sem a permissão escrita do INPE, com exceção de qualquer material fornecido especificamente com o propósito de ser entrado e executado num sistema computacional, para o uso exclusivo do leitor da obra.

Copyright © 2012 by MCT/INPE. No part of this publication may be reproduced, stored in a retrieval system, or transmitted in any form or by any means, electronic, mechanical, photocopying, recording, microfilming, or otherwise, without written permission from INPE, with the exception of any material supplied specifically for the purpose of being entered and executed on a computer system, for exclusive use of the reader of the work.

Aprovado (a) pela Banca Examinadora
em cumprimento ao requisito exigido para
obtenção do Título de **Doutor(a)** em

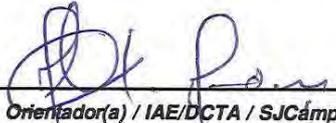
**Engenharia e Tecnologia
Espaciais/Combustão e Propulsão**

Dr. Wladimir Mattos da Costa Dourado



Presidente / Orientador(a) / IAE/DCTA / São José dos Campos -
SP

Dr. Marcio Teixeira de Mendonça



Orientador(a) / IAE/DCTA / SJCâmpos - SP

Dr. Fernando Fachini Filho



Membro da Banca / INPE / Cachoeira Paulista - SP

Dr. João Luiz Filgueiras de Azevedo



Convidado(a) / IAE/DCTA / São José dos Campos - SP

Dr. Ricardo Becht Flatschart



Convidado(a) / EMBRAER / São José dos Campos - SP

Este trabalho foi aprovado por:

maioria simples

unanimidade

Aluno (a): **Nicolas Moises Cruz Salvador**

São José dos Campos, 29 de Novembro de 2012

RESUMO

Muitos dispositivos na indústria aeroespacial trabalham com combustão turbulenta nos seus sistemas de propulsão. O conhecimento sobre este fenômeno é muito importante para explicar seu comportamento físico e químico. Neste contexto, o estudo de modelos que incluam transporte de escalares na zona de reação é importante para compreender e desenvolver máquinas mais eficientes. Ao utilizar dinâmica de fluidos computacional (CFD) em conjunto com os métodos experimentais é possível reduzir o custo e tempo de desenvolvimento destas máquinas. O objetivo principal deste trabalho é adaptar um modelo de combustão turbulenta para chamas difusivas não pré-misturadas, que utiliza a metodologia das equações médias de Reynolds, para um modelo que representa as grandezas turbulentas utilizando simulação de grandes escalas. O modelo foi implementado no código aberto OpenFoam sob o nome de reactingFoamLES. Tal modelo se baseia em taxa de reação finita, por conseguinte, ele resolve as taxas de reação para um número de espécies importantes e, por tanto, precisa de um mecanismo de cinética química. A estrutura numérica foi desenvolvida a partir de um modelo adaptado para o tratamento de combustão para chamas não pré-misturadas com química detalhada. O modelo empregado é o denominado reator parcialmente misturado ou em siglas em inglês *PartialStirredReator* (PaSR), que é usado em combustão não pré-misturada turbulenta, onde as escalas do tempo químico são separados do tempo turbulento. A validação da implementação SGE do modelo PaSR foi realizada comparando-se os resultados numéricos com resultados experimentais realizados no Laboratório Sandia, do *Sandia National Laboratories* para o queimador tipo jato livre, denominado Sidney Sandia. Preliminarmente, foram avaliados três modelos de turbulência presentes no código: o modelo de Smagorinsky, o modelo de uma equação e o modelo dinâmico de uma equação para escoamento turbulento reativo de chama pré-misturada. Essa simulação reproduz dados experimentais do escoamento num canal com obstáculo obtidos no laboratório de ENSMA, na França. Análises numéricas do escoamento inerte e reativo foram realizadas. Para o escoamento inerte o campo de velocidade e o comprimento da zona de recirculação foram comparados, assim como foi feita também uma análise dos espectros de energia obtidos numericamente. A análise do espectro de energia obtido mostra o decaimento de $-5/3$ presente na simulação em 3D e confirma que a malha é a adequada para capturar os efeitos de sub-malha com o modelo adotado. A simulação com escoamento reativo, considerando uma pré-mistura de Propano (C_3H_8) com ar para uma razão de equivalência igual a 0,65, mostra que os valores de velocidade e variável de avanço são bem próximos dos valores obtidos experimentalmente. Com a validação dos modelos de turbulência SGE presentes no OpenFoam, realizou-se a simulação para uma chama não pré-misturada do queimador SANDIA com o modelo de Smagorinsky para sub-malha. O experimento consiste em um queimador alimentado com mistura do combustível de CH_4/H_2 (1:1 em volume) e de ar como oxidante, que cofluem com uma velocidade de 118 m/s e 40 m/s, respectivamente. Os resultados numéricos foram comparados com os dados experimentais obtidos pela Universidade de Sydney e resultados do Workshop para chamas turbulentas TNF7,

que mostra resultados de simulações numéricas obtidas com modelos RANS e SGE de outros laboratórios. O mecanismo químico reduzido utilizado contém 34 espécies e 46 reações. O desempenho deste mecanismo cinético foi avaliado através da comparação do mecanismo reduzido POA com um mecanismo completo, denominado GRIMECH 3.0 para os escalares temperatura, H_2O , CO , CO_2 e OH . Essa comparação foi obtida na simulação unidimensional para chama contracorrente, com o código de tipo aberto denominado CANTERA. Os principais parâmetros comparados na simulação com PaSR foram: a temperatura, a fração de mistura, as concentrações de OH , CO , CO_2 e H_2O para 5 perfis radiais dentro da zona de recirculação e no início do jato livre. Os resultados numéricos mostram concordância com os resultados experimentais e com aqueles obtidos numericamente.

NON-PREMIXED DETAILED CHEMISTRY REACTIVE FLAME LARGE EDDY SIMULATION

ABSTRACT

Many devices in the space industry rely on turbulent combustion in their propulsive system. The knowledge about this phenomena is very important to explain their physical and chemical behavior. In this context, the study of models that include transport of scalars in the reaction zone is important for the understanding and development of more efficient machinery. By using computational fluid dynamics (CFD) in conjunction with experimental methods it is possible to reduce the cost and time of the machinery development procedure. The main goal of this work is to substitute a non-premixed RANS turbulent combustion model by a large eddy simulation non-premixed turbulent combustion model. The LES model was implemented on the open source CFD code OpenFoam and called reactingFoam. The model is based on finite reaction rate, therefore it solves ODEs for a number of important species and thus needs a chemical kinetic mechanism. The numerical structure was developed based on an Eddy Break-Up model (EBU), that allows the treatment of turbulent diffusion combustion. The chemical model in the solver is a Partial Stirred Reactor (PaSR), which is used in combustion of non premixed flames, where the chemical time scales and the spatial scales have a special treatment. The implementation was verified and validated by comparing numerical results with experimental results obtained at the University of Sidney and other numerical results presented at the Turbulent Flame Workshop TNF7 for the Bluff-body type burner developed by the Sandia National laboratory. First, simulations of pre-mixed turbulent flame in a channel with a flame holder were compared to experimental results obtained at The ENSMA laboratory in France. The objective of this preliminary test was to validate the large eddy simulation turbulent model with the combustion model called *XiFoam*. Both inert flow and reactive flow simulations were performed. In the inert flow, comparison with velocity profile and recirculation vortex zone in unsteady flow was performed, as well as an analysis of the energy spectrum obtained numerically. The spectrum was obtained in order to confirm if the mesh is adequate for the turbulence models adopted. The simulation with reacting flow considered a pre-mixture of propane (C_3H_8) with air such that the equivalence ratio was equal to 0.65, with a theoretical adiabatic flame temperature of 1800 K. The results show good agreement with the experimental data. After the validation of the LES model implemented on OpenFoam, test cases for turbulent diffusion flames were undertaken. Numerical results for the Sandia burner were compared to experimental results from the University of Sidney and other numerical results obtained with RANS and LES models available in the literature. The test case consists of a burner fed with fuel mixture of CH_4/H_2 (1:1 in volume) and coflow of air with a bulk jet velocity of 118 m/s and 40 m/s, respectively. The chemical mechanism used is a reduced one which contains 34 species and 46 reactions. The performance of this kinetic mechanism was evaluated comparing the laminar non-premixed flame velocity with the one obtained by GRIMECH 3.0. The laminar non-premixed flame velocity was given using the 1D flame solver CANTERA. The main parameters compared were Temperature, velocity, mixture fraction, concentration of OH, CO, CO_2 and H_2O

for 4 radial profiles within the recirculation zone. The results show good agreement with the experimental results and numerically obtained results with RANS.

LISTA DE FIGURAS

	<u>Pág.</u>
1.1	5
2.1	18
2.2	21
2.3	21
2.4	27
2.5	28
2.6	32
2.7	35
2.8	37
2.9	40
2.10	41
2.11	42
3.1	50
3.2	67
3.3	68
4.1	77
4.2	83
4.3	87

4.4	Parâmetro de discretização em volumes finitos.	97
4.5	Classe virtual hierárquica para modelos SGE. As linhas sólidas representam a herança hierárquica.	100
5.1	Esquema do canal com obstáculo de Sanquer.	107
5.2	Perfil de velocidade uniforme imposto e condições iniciais na entrada do canal.	107
5.3	Detalhe da malha computacional ao redor do obstáculo.	109
5.4	Evolução da componente longitudinal da velocidade U_x	109
5.5	Evolução da componente transversal da velocidade U_y	110
5.6	Campo de vorticidade instantânea para escoamento inerte em 0,25 segundos.	111
5.7	Isocontornos do campo de velocidade (a) instantâneo e (b) médio, para escoamento inerte.	111
5.8	Perfil de velocidade média U_x ao longo do eixo X , atrás do obstáculo.	113
5.9	Representação esquemática da distribuição de velocidade (SANQUER, 1998).	113
5.10	Espectros de energia das componentes da velocidade longitudinal para simulações 2D. (a) U_x , $X/Xr = 1.4$, $Y/h = 0$; (b) U_x , $X/Xr = 1.4$, $Y/h = 0.41$	115
5.11	Espectros de energia das componentes da velocidade transversal para simulações 2D. (c) U_y , $X/Xr = 1.4$, $Y/h = 0$; (d) U_y in $X/Xr = 1.4$, $Y/h = 0.41$	116
5.12	Espectros de energia das componentes da velocidade longitudinal para simulações em 3D em (a) U_x , $X/Xr = 1.4$, $Y/h = 0$; (b) U_x ; $X/Xr = 1.4$, $Y/h = 0.41$	117
5.13	Espectros de energia das componentes da velocidade transversal para simulações em 3D em (c) U_y , $X/Xr = 1.4$, $Y/h = 0$; (d) U_y , $X/Xr = 1.4$, $Y/h = 0.41$	118
5.14	Localização dos pontos A e B de medição dos parâmetros no canal.	119
5.15	Caso inerte. Perfis de velocidades longitudinais médias para os modelos de Smagorinsky, de uma equação e dinâmico de uma equação para U_x em $X/Xr = 0.8$	120
5.16	Caso inerte. Perfis de velocidades longitudinais médias para os modelos de Smagorinsky, de uma equação e dinâmico de uma equação para U_x $X/Xr = 1.4$	120
5.17	Caso inerte. Perfis de velocidades normais médias U_y para modelo de Smagorinsky, de uma equação e dinâmico de uma equação em $X/Xr = 0.8$	121

5.18	Caso inerte. Perfis de velocidades normais médias Uy para modelo de Smagorinsky de uma equação e dinâmico de uma equação para em $X/Xr = 1.4$	121
5.19	Ponto de ignição para escoamento reativo.	122
5.20	Isocontornos de pressão para o caso reativo.	123
5.21	Espectros de energia da componente da velocidade longitudinal para simulações em 3D em $X/Xr = 1$ e $Y=0$	124
5.22	Caso reativo. Perfis de velocidade longitudinal média para modelo de Smagorinsky, de uma equação e dinâmico de uma equação para Ux em $X/Xr = 0.8$	125
5.23	Caso reativo. Perfis de velocidade longitudinal média para modelo de Smagorinsky, de uma equação e dinâmico de uma equação para Ux $X/Xr = 1.4$	125
5.24	Caso reativo. Perfis de velocidade normal média para modelo de Smagorinsky, de uma equação e dinâmico de uma equação Uy em $X/Xr = 0.8$	126
5.25	Caso reativo. Perfis de velocidade normal média para modelo de Smagorinsky, de uma equação e dinâmico de uma equação para Uy em $X/Xr = 1.4$	126
5.26	Perfil da variável de avanço em $X/Xr = 0,35$	127
5.27	Perfil da variável de avanço em $X/Xr = 1,4$	127
5.28	Isocontornos da variável de avanço.	128
5.29	Vorticidade para o caso reativo.	128
5.30	Perfil de temperatura média em $X=0,35$ m.	129
5.31	Isocontornos da temperatura.	129
5.32	Esquema do queimador corpo rombudo SANDIA HM1.	131
5.33	Representação esquemática das zonas de recirculação e propagação do queimador corpo rombudo SANDIA HM1.	131
5.34	Espectro de energia cinética para o queimador SANDIA HM1. Espectros de energia das componentes da velocidade longitudinal para simulações em 3D em $X=40$ mm e $Y= 0$	133
5.35	Malha axi-simétrica para o experimento SANDIA corpo rombudo HM1.	134
5.36	Malha 3-D para o experimento SANDIA corpo rombudo HM1.	134
5.37	Perfis radiais de T, CO, CO_2 obtidos usando os mecanismos GRIMECH 3.0 completo e POA 36 espécies para uma chama contracorrente com o modelo CANTERA.	137
5.38	Comparação do perfil radial de H_2O e OH entre os mecanismos cinéticos GRIMECH 3.0 completo e POA 36 espécies para chama contracorrente, efetuados no CANTERA.	138
5.39	Localização de medições típicas para corpo rombudo.	139

5.40	Comparações de perfis de velocidade axial em a) $X = 10$ mm, b) $X = 20$ mm e c) $X = 30$ mm.	141
5.41	Comparações de perfis de velocidade axial em d) $X = 50$ mm e d) $X = 90$ mm (continuação).	142
5.42	Comparações de perfis de velocidade radial em a) $X = 10$ mm, b) $X = 20$ mm e c) $X = 30$ mm.	143
5.43	Comparações de perfis de velocidade radial em d) $X = 50$ mm e d) $X = 90$ mm.(continuação).	144
5.44	Campo vetorial da velocidade obtido com SGE no presente trabalho. . .	145
5.45	Campo vetorial da velocidade obtido com simulação RANS (MANGANI et al., 2007).	146
5.46	Isocontorno de temperatura instantânea a) $t = 20$ milissegundos e b) $t = 58$ milissegundos.	147
5.47	Comparações de perfis de temperatura radial em a) $X = 13$ mm, b) $X = 30$ mm e c) $X = 45$ mm.	149
5.48	Comparações de perfis de temperatura radial em d) $X = 65$ mm e d) $X = 90$ mm.(continuação).	150
5.49	Comparações de perfis de fração de mistura radial em a) $X = 13$ mm, b) $X = 30$ mm e c) $X = 45$ mm.	152
5.50	Comparações de perfis de fração de mistura radial em d) $X = 65$ mm e d) $X = 90$ mm.(continuação).	153
5.51	Campo de vorticidade na saída do queimador.	154
5.52	Concentração de H_2O médio na chama do queimador.	155
5.53	Comparações de perfis de fração mássica de H_2O radial em a) $X = 13$ mm, b) $X = 30$ mm e c) $X = 45$ mm.	156
5.54	Comparações de perfis de fração mássica de H_2O radial em d) $X = 65$ mm e d) $X = 90$ mm.(continuação).	157
5.55	Comparações de perfis de fração mássica de CO radial em a) $X = 13$ mm, b) $X = 30$ mm e c) $X = 45$ mm.	159
5.56	Comparações de perfis de fração mássica de CO radial em d) $X = 65$ mm e d) $X = 90$ mm.(continuação).	160
5.57	Comparações de perfis de fração mássica de CO_2 radial em a) $X = 13$ mm, b) $X = 30$ mm e c) $X = 45$ mm.	162
5.58	Comparações de perfis de fração mássica de CO_2 radial em d) $X = 65$ mm e d) $X = 90$ mm.(continuação).	163
5.59	Comparações de perfis de fração mássica de OH radial em a) $X = 13$ mm, b) $X = 30$ mm e c) $X = 45$ mm.	165
5.60	Comparações de perfis de fração mássica de OH radial em d) $X = 65$ mm e d) $X = 90$ mm.(continuação).	166

LISTA DE TABELAS

	<u>Pág.</u>
2.1 Relações para química infinitamente rápida incluindo número de Lewis diferente de 1.	25
3.1 Modelos de chama não pré-misturadas	66
4.1 Esquemas numéricos para o código reactingFoamles.	97
5.1 Comparação de resultados numéricos entre SGE, RANS e resultados experimentais.	112
5.2 Condições de contorno de entrada para o experimento do queimador corpo rombudo.	134
5.3 Modelos de simulação utilizados para comparar com resultados numéricos do modelo PaSR.	138
B.1 Descrição de entradas termofísicas.	191

LISTA DE SÍMBOLOS

a	–	coeficientes da matriz A
a'	–	coeficiente de função harmônica
A	–	constante pre-exponencial de Arrhenius
A	–	matriz sparsa
\mathbf{B}	–	tensor das tensões de sub-malha
b	–	variável de regressão
C	–	concentração molar
C_1	–	coeficiente do modelo de Deardorff
C_2	–	coeficiente do modelo de Deardorff
c	–	variável de avanço
C_k	–	constante do modelo dinâmico de uma equação
C_p	–	calor específico a pressão constante
$\overline{C_p}$	–	calor específico médio da mistura a pressão constante
C_r	–	número de Courant
C_v	–	calor específico a volume constante
C_{mix}	–	constante de tempo da mistura turbulenta
\mathcal{D}	–	coeficiente de difusão de espécies
\mathcal{D}_{sgs}	–	coeficiente de difusão de sub-malha
\mathbf{D}	–	parte simétrica do tensor das tensões
D	–	domínio computacional
Da	–	número de Damkhöler
Da^*	–	número de Damkhöler crítico
D_B	–	diâmetro do injetor
D_m	–	difusividade molar
D_i	–	difusividade mássica
D_T	–	difusividade térmica
E	–	energia total em massa
e	–	energia interna
E_a	–	energia de ativação de Arrhenius
E_k	–	espectro de energia cinética
F	–	fluxo de massa, combustível
F_i	–	força de volume na direção i
f	–	face comum entre dois volumes
f_m	–	termo fonte de espécies
f_{mix}	–	razão de mistura
f_q	–	frequência de emissão de vórtices
f_s	–	razão de mistura estequiométrica
G_f	–	função de filtro
\mathcal{G}	–	parâmetro de geração de enrugamento
H_i	–	fluxo de entalpia

h	– entalpia específica
h_{\perp}	– elemento do tensor métrico
\mathbf{I}	– tensor identidade
\mathcal{J}	– Jacobiano de transformação
K	– condutividade térmica
k	– energia cinética turbulenta, fração mássica da célula material do PaSR
k^*	– fração mássica da mistura que reage na célula material do PaSR
Ka	– número de Karlovitz
Ka_r	– número de Karlovitz para espessura de reação
k_2	– segundo coeficiente de viscosidade
L_{ij}	– identidade de Germano
Le	– número de Lewis
l	– função indicadora
l_d	– espessura da zona difusiva
l_t	– comprimento da escala integral turbulenta
l_r	– espessura característica da zona de reação para chamas não pré-misturadas
Ma	– número de Mach
\mathcal{P}	– função de Jayatilleke
P	– produto de uma reação química
p	– pressão
Pr	– número de Prandtl
P_k	– taxa de produção de energia cinética turbulenta
Pr_{\ominus}	– número de Prandtl turbulento
\mathbf{Q}	– propriedade do escoamento para equação de transporte, vetor fonte
QR	– calor liberado pela reação química
Q	– calor liberado pela combustão, vetor fonte
q_i	– vetor de fluxo de calor
q^{sgs}	– fluxo de calor de sub-malha
O_x	– oxidante
S	– tensor da tensões
St	– número de Strouhal
\mathcal{R}	– parâmetro de remoção de enrugamento
R	– constante do gás perfeito
Ra	– número de Rayleigh
Re	– número de Reynolds
R_u	– constante universal dos gases
Re_f	– número de Reynolds de chama
Re_T	– número de Reynolds turbulento
Re_{η}	– número de Reynolds na escala de Kolmogorov
R_i	– número de Richardson

R_u	– constante universal do gases
s	– coeficiente estequiométrico em massa
\mathbf{S}	– tensor das tensões viscosas, notação tensorial
s_L	– velocidade de propagação da chama laminar
S_t	– número de Strouhal
T	– temperatura
T_A	– temperatura de ativação
T_s	– constante de temperatura da lei de Southerland
T_{ij}	– tensor viscoso filtrado
\mathbf{U}	– vetor velocidade
U_{axe}	– velocidade na entrada do canal
U_t	– velocidade efetiva de superfície de chama
U_x	– componente longitudinal da velocidade
U_y	– componente transversal da velocidade
\bar{v}	– velocidade média característica
u	– vetor velocidade em notação indicial
u	– componente normal da velocidade para o método SIMPLE e PISO da pressão
u'	– componente da velocidade de flutuação
u'_r	– velocidade de rotação dos movimentos maiores de turbulência
u'_f	– velocidade de flutuação dos gases frescos
u_{rms}	– velocidade média quadrada
V	– volume da célula material
v_a	– velocidade avanço da interface relativa ao escoamento
v	– componente transversal da velocidade para o método SIMPLE e PISO da pressão
$V_{i,m}$	– velocidade de difusão da espécie m
W	– massa molar
\mathbf{x}	– vetor posição
X, Y, Z	– coordenadas cartesianas usadas nas simulações para o canal com obstáculo e jato livre.
x	– coordenadas cartesianas em notação indicial
X_m	– fração molar
X_r	– comprimento da zona de recirculação
Y	– fração mássica
Z	– fração de mistura
z'	– intensidade da turbulência na sub-malha

Símbolos Gregos

α	– coeficiente de difusão térmica
α_1	– constante e coeficiente ≥ 1 para l_d

α_2	–	coeficiente ≤ 1 para χ_{st}
α_p	–	fator de sub-relaxação
β	–	expoente de temperatura de Arrhenius
δ_l	–	espessura de chama laminar
δ_l	–	comprimento de célula
δ_r	–	espessura de zona de reação de chama laminar pré-misturada
δ_R	–	zona de reação de chama laminar pré-misturada
δ_H	–	zona de pré aquecimento de chama laminar pré-misturada
δ_Y	–	variações da fração mássica
δ_{ij}	–	função delta de Kronecker
δX	–	variação da grade na direção X
δY	–	variação da grade na direção Y
Δ	–	tamanho da grade
η	–	coordenada paralela a superfície de chama
η_k	–	micro-escala de Kolmogorov
ϵ	–	dissipação de energia cinética turbulenta
ζ	–	coordenada normal a superfície de chama
$\nabla \cdot \Gamma \nabla \phi$	–	função laplaciano (Gamma, phi)
ρ	–	densidade
μ	–	viscosidade dinâmica laminar
μ_0	–	viscosidade de referencia
μ_t	–	viscosidade dinâmica turbulenta
ν	–	coeficiente molar
ν_{mk}	–	coeficientes estequiométricos
ν_t	–	viscosidade turbulenta
ξ	–	taxa de formação de espécies para a reação na célula do PaSR
Φ	–	relaçã do número de Lewis
Φ_{ij}	–	fluxo convectivo de massa
ϕ	–	razão de equivalência
ϕ	–	$= \rho \mathbf{U}$
ϕ'	–	coeficiente de função harmônica
ψ	–	variável dependente
ψ	–	variável de Schwab-Zeldovitch
Ψ	–	fator de compressibilidade
Σ	–	superfície de chama por unidade de volume
σ_B	–	coeficiente do modelo de Deardorff
σ_i	–	viscosidade de trabalho
σ_s	–	tensor das deformações relacionado a \tilde{U}_t , modelo Xi
σ_t	–	tensor das deformações relacionado a \tilde{U}_s , modelo Xi
τ_c	–	tempo químico
τ_k	–	tempo de Kolmogorov
τ_{mix}	–	tempo de mistura turbulenta

τ_t	– tempo turbulento da escala integral
τ_x	– tempo característico de difusão
τ_{ij}	– tensor das tensões viscosas, notação indicial
Θ	– função de Heaviside
Θ_{ij}	– fluxo difusivo de massa
κ	– fator de liberação de calor
Υ_{ij}	– correlação de temperaturas de espécies
χ	– taxa de dissipação escalar
Ξ	– superfície de chama por unidade de superfície resolvida na direção média de propagação.
$\dot{\omega}$	– taxa de reação química das espécies

Símbolos Matemáticos

tr	– traço
\times	– produto vetorial de dois vetores
\otimes	– produto tensorial de dois tensores
∇	– laplaciano

Sobrescritos

sgs	– sub-malha
'	– flutuação, correção
*	– campo suposto
0	– formação, referencia
+	– sub-camada viscosa e camada logarítmica
n	– ene-ésimo termo

Subscritos

b	– queimado
LFA	– assumindo flamelet laminar
E	– centro da grade avançada na direção X
e	– face da grade avançada na direção X
ext	– extinção
eq	– equilíbrio
F	– combustível
I	– interface
i	– i-ésima
i	– ignição
k	– Kolmogorov
m	– espécie m

- N – centro da grade avançada na direção Y
- n – ene-ésimo termo
- n – face da grade avançada na direção Y
- nb – valores corrigidos
- O – oxidante
- P – produto de uma reação química
- q – queima
- \perp – derivada no plano estequiométrico
- P – centro da grade centrada das coordenadas X, Y
- S – centro da grade atrasada na direção Y
- s – face da grade atrasada na direção Y
- st – condição estequiométrica
- T – temperatura, total, turbulento
- t – turbulento
- u – não queimado
- ub – deslizamento
- W – centro da grade atrasada na direção X
- w – face da grade atrasada na direção X
- 0 – combustível ou oxidante puro

SUMÁRIO

	<u>Pág.</u>
1 INTRODUÇÃO	1
1.1 Combustão Turbulenta	2
1.2 Modelos de Turbulência	4
1.2.1 Simulação Numérica Direta	6
1.2.2 Equações Com Médias de Reynolds	6
1.2.3 Simulação de Grandes Escalas	8
1.2.3.1 SGE com combustão	9
1.3 Modelo Numérico	14
1.4 Objetivos	14
1.5 Estrutura da Tese	15
2 DESCRIÇÃO DOS ASPECTOS FÍSICOS DO PROBLEMA ESTUDADO	17
2.1 Introdução	17
2.2 Chamas de Pré-mistura	17
2.2.1 Estrutura da Chama Laminar de Pré-mistura	18
2.3 Chama Não Pré-misturada	20
2.4 Análise Direta Para Chamas de Difusão Turbulentas	29
2.5 Escalas e Diagramas Para Combustão Turbulenta	30
2.5.1 Introdução	30
2.5.2 O Conceito de Flamelet	31
2.5.3 Diagramas de Chamas de Combustão Pré-misturadas	33
2.5.4 Regimes de Combustão	34
2.5.5 Diagramas de Chamas de Combustão Não Pré-misturadas	38
2.5.6 Conclusões	43
3 FORMULAÇÃO	45
3.1 Formulação para o Filtro SGE	47
3.2 Formulação para Chama Pré-misturada	48
3.2.1 Definições Preliminares	49
3.2.2 Equação da Continuidade Filtrada	54
3.2.3 Equação da Quantidade de Movimento e Energia	55
3.2.4 Modelo de Sub-malha Para Chama Pré-Misturada	56

3.2.4.1	Modelo para b em sub-malha	57
3.2.4.2	Modelo SGS de sub-malha para Ξ	58
3.3	Formulação Para Chama Não Pré-misturada	62
3.3.1	Fechamento das Equações em SGE Para Sub-malha	64
3.3.2	Modelo de Sub-malha Não Pré-misturado	66
3.3.2.1	O conceito do reator parcialmente misturado	67
4	MODELOS MATEMÁTICOS	73
4.1	O Código OpenFoam	73
4.1.1	Introdução a C++	73
4.1.2	O Modelo Numérico	75
4.2	Implementação	78
4.2.1	Implementação do Campo Tensorial	79
4.2.2	Implementação de Classes Equações Diferenciais Parciais	80
4.2.3	Topologia de Malha e Condições de Contorno	82
4.2.3.1	Condição de contorno cíclica	82
4.2.3.2	Condição de contorno sintética	83
4.3	Metodologia Para o Tratamento da Pressão Para uma Faixa Ampla de Número de Mach	84
4.3.1	Acoplamento Pressão Velocidade	85
4.3.2	Problemas Associados à Formulação Baseada na Densidade	86
4.3.3	Método Semi-implícito Para Pressão	87
4.3.4	Grade Colocalizada: Interpolação Rhie-Chow	92
4.3.5	Efeitos de Compressibilidade	94
4.3.6	Configuração dos Esquemas Numéricos	96
4.3.6.1	Termo laplaciano	98
4.3.6.2	Termo convectivo	98
4.3.6.3	Divergente	98
4.3.6.4	Gradiente	99
4.4	Modelo de Turbulência	99
4.4.1	Modelos para Simulação de Grande Escalas	100
4.4.1.1	Modelo de Smagorinsky	102
4.4.1.2	Modelo de uma equação	102
4.4.1.3	Modelo dinâmico de uma equação	103
5	ANÁLISE E RESULTADOS	105
5.1	Simulação Com o Modelo Pré-misturado XiFoam	105
5.1.1	Condições de Contorno e Iniciais	106

5.1.2	Resultados Para Chama Pré-misturada	109
5.1.2.1	Escoamento inerte	110
5.1.2.2	Escoamento reativo	122
5.2	Modelo PaSR Não Pré-misturado	130
5.2.1	Condições de Contorno e Iniciais	130
5.2.2	Os Mecanismos da Química Detalhada	134
5.2.3	Análise do Mecanismo Reduzido	135
5.2.4	Resultados Numéricos	137
5.2.4.1	Distribuição de velocidade	140
5.2.4.2	Distribuição de temperatura	146
5.2.4.3	Fração de mistura de CH_4	151
5.2.4.4	Fração mássica de H_2O	154
5.2.4.5	Fração mássica de CO	158
5.2.4.6	Fração mássica de CO_2	161
5.2.4.7	Fração mássica de OH	164
6	CONCLUSÕES E TRABALHOS FUTUROS	167
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	171
	ANEXO A - MECANISMO REDUZIDO POA	189
	ANEXO B - PROPRIEDADES TERMO-FÍSICAS	191
	ANEXO C - ARQUIVO CONTROL-DICT	195
	ANEXO D - BIBLIOTECAS SGE IMPLEMENTADAS NO REAC- TINGFOAM	197

1 INTRODUÇÃO

Em anos recentes, máquinas e motores do setor aeroespacial, tais como turbinas e motores de foguetes a combustível líquido e sólido, tem se beneficiado da modelagem numérica de dinâmica de fluidos, (ou em inglês *Computational Fluid Dynamics*–CFD). Por tanto, melhoras nos modelos de combustão e turbulência foram feitas e a metodologia que utiliza equações com médias de Reynolds do inglês *Reynolds Average Navier – Stokes Equations* (RANS), foram atualizadas. Modelos de combustão incluíram os efeitos da química complexa ou detalhada (LIBBY; WILLIAMS, 1994). Com a melhora dos sistemas computacionais, a metodologia de simulação de grandes escalas (SGE), que resolve as equações filtradas das grandes escalas da turbulência e modela as pequenas escalas, tornou-se uma ferramenta cada vez mais utilizada. No entanto, o método SGE requer grande refinamento de malha.

Simular chamas não pré-misturadas com química detalhada é um dos objetivos deste trabalho. Precisa-se então desenvolver um modelo que permita simular combustão turbulenta para chamas não pré-misturadas, sendo SGE a metodologia escolhida para levar a cabo esta tarefa.

Como explicado, nos últimos anos, a abordagem SGE tem se consolidado como uma alternativa ao uso da abordagem RANS. Ela proporciona uma representação mais realista do escoamento, devido ao cálculo explícito das grandes escalas energéticas que dependem da topologia do escoamento. São modelados unicamente os efeitos das escalas menores, que são mais isotrópicas. Ao resolver a maior parte das escalas, o método SGE, da mesma forma que a simulação numérica direta (SND), proporciona uma solução tridimensional e dependente do tempo para as equações de transporte, capturando efeitos do escoamento turbulento que são impossíveis de capturar com a metodologia RANS.

Dado que reações de combustão ocorrem nas escalas menores do escoamento, a cinética química e suas interações com a turbulência têm de ser modeladas. Usualmente, recorre-se a hipóteses validadas e adaptadas de modelos RANS. Conceitualmente, o tratamento da combustão com química detalhada em RANS e SGE são quase idênticos. Está é a razão para adaptarmos um modelo de combustão para chamas não pré-misturadas com química detalhada, desenvolvida com a metodologia RANS e presente num código do tipo aberto denominado OpenFOAM, para uma metodologia SGE. Deve-se levar em conta, também, que a metodologia SND ainda é cara para os padrões computacionais atuais.

1.1 Combustão Turbulenta

Nesta seção aborda-se a importância do fenômeno da combustão turbulenta, assim como pontos importantes da teoria de combustão. Também destaca-se a importância das técnicas numéricas e o desenvolvimento das simulações com modelos de grandes escalas (SGE).

A turbulência é um fenômeno que está longe de ser totalmente compreendido e é provavelmente o problema mais significativo não resolvido na física clássica. Em motores, caldeiras, fornos, e na maioria das aplicações relacionadas ao setor aeroespacial, o número de Reynolds característico do escoamento é suficientemente elevado tal que o processo de combustão ocorre em um campo de escoamento turbulento. Os efeitos da turbulência são geralmente vantajosos para a eficiência da combustão, uma vez que aumentam a mistura das espécies químicas e o calor gerado (PETERS, 2000). Mas efeitos adversos sobre a combustão podem também ocorrer se o nível de turbulência é suficientemente elevada para provocar a extinção da chama. Este fato se deve a duas razões principais: em primeiro lugar, a turbulência aumenta os processos de mistura e transporte e, portanto, melhora a combustão; em segundo a combustão libera calor e como resultado, gera instabilidade no escoamento, que provoca instabilidade de chama.

Foi em 1941 que Kolmogorov propôs que as forças externas de geração de energia cinética turbulenta atuam apenas nas escalas maiores do escoamento, enquanto as forças de atrito viscoso agem apenas nas menores escalas. Isso faz com que, no limite de grandes números de Reynolds, haja a existência de um intervalo intermediário de escalas, o subdomínio inercial. Neste, a energia seria conservada, sendo apenas transferida das escalas maiores para as menores segundo uma taxa constante. Esta cascata de energia foi concebida a partir de um raciocínio baseado exclusivamente em análise dimensional (FRISCH, 1996). É assim que surge a chamada hipótese de cascata, que constitui a base para o fechamento de modelos de turbulência. Kolmogorov também propôs que os escoamentos turbulentos são estatisticamente homogêneos e isotrópicos no subdomínio inercial.

A combustão é outro fenômeno complexo que está associado a processos reativos exotérmicos, com transferência de calor e difusão de espécies químicas. A combustão envolve a queima de combustível e oxidante para produzir calor. O estudo da combustão tem um marco de referência importante a partir da criação do *Combustion Institute* em 1954, originando pesquisas orientadas ao campo de propulsores aeronáuticos e motores de combustão interna. Pesquisas na linha de eficiência de com-

bustão, conservação da energia, geração de poluentes e o papel que a combustão desempenha nas mudanças climáticas também têm sido conduzidas mais recentemente.

O estudo da combustão turbulenta tenta explicar um fenômeno que é pouco compreendido ainda. Teorias para combustão e combustão turbulenta foram desenvolvidas nos últimos 30 anos e as mais relevantes incluem a teoria de Chapman-Jouguet (JOUGET, 1917; WILLIAMS, 1985), a teoria da combustão de chama laminar (determinada a partir do conceito de velocidade de chama laminar s_L em regime permanente de Frank-Kamenetsky e Semenov (KUO, 2004; ZEL'DOVICH; SEMENOV, 1940)) e a teoria para chamas de difusão laminar de Burke-Schumann (BURKE; SCHUMMAN, 1928). Todas elas utilizam métodos analíticos para determinar os limites da energia de ativação nas propriedades da chama para problemas bem definidos. Essas propriedades incluem a ignição, a propagação da frente de chama, as instabilidades, a acústica, a espessura de chama laminar, a temperatura de ignição, etc. Mas as aproximações analíticas sempre são limitadas por simplificações no comportamento físico e nas faixas dos números adimensionais do problema, tais como o de Lewis, Prandtl e Schmidt. Experimentos simplificados são usados também para entender as propriedades fundamentais da combustão em chamas laminares, tais como as interações entre chama e vórtices (ROBERTS; DRISCOLL, 1991; MUELLER et al., 1998). Esses experimentos são acompanhados por simulações numéricas de chamas laminares com química complexa que utilizam modelos de transporte de espécies com perdas de calor por radiação (SMOOKE et al., 1989).

Em Julho de 1996, antes do Vigésimo Sexto Simpósio do Instituto de Combustão, foi levado a cabo o primeiro Workshop em turbulência de chamas não pré-misturadas, ou em inglês *International Workshop on Measurement and computation of Turbulent Nonpremixed Flames* (TNF) em Nápoles (TNF, 2011). O workshop teve o propósito de identificar e registrar dados experimentais referentes à chamas de combustão turbulentas não pré-misturadas, assim como gerar diretrizes para comparações de resultados e colaboração entre grupos de pesquisa. Foi estabelecida então uma rede de trabalho e se estipulou uma série de experimentos de referência padrão, dentre eles o de combustão com química de complexidade cinética, através de uma gama de modos de combustão. Outro ponto importante para a comunidade foi a compreensão das capacidades e limitações dos modelos de combustão. Surgem assim trabalhos relacionados a jatos turbulentos em que são apresentados dados experimentais e cálculos computacionais, como o de Pfuderer (PFUDERER et al., 1997). No

terceiro Workshop TNF foram mostrados experimentos padrão com jatos, conduzidos por Wolfgang Meier do DLR da Alemanha, o experimento com o queimador piloto denominado Bluff-Body, o experimento do queimador denominado Flame D, conduzido por Robert Barlow, o experimento do queimador piloto Delft com gás natural conduzido por Tim Peeters e o experimento do queimador Sydney Sandia com CH₄ e H₂ como combustível, conduzido por Assad Masri.

Uma série de experimentos foram realizados e apresentados nos workshops posteriores do TNF. Esses experimentos foram agrupados em 4 grandes grupos: Jatos de chama simples; jatos de chama piloto; chamas com obstáculos e chamas com turbilhões. Comparações experimentais e numéricas utilizando técnicas RANS e SGE também foram apresentadas. Os dados de todos esses trabalhos encontram-se disponíveis na internet (TNF, 2011).

1.2 Modelos de Turbulência

O fenômeno da turbulência pode ser descrito pelas seguintes características (MALALASEKERA; VERSTEEG, 1995), (KUNDU; COHEN, 2004):

- Flutuações. A velocidade pode ser decomposta em duas partes, uma parte média e uma parte flutuante.
- Vorticidade. A turbulência é caracterizada por altos níveis de vorticidade formando estruturas na forma de turbilhões. Grandes turbilhões têm tamanho da ordem do comprimento característico do escoamento.
- Aleatoriedade. As variações nas propriedades do fluido, que não são formados de ruído branco, são aleatórias, isto permite um espectro de energia específica continua.
- Movimento de auto sustentabilidade. Novos turbilhões substituem aqueles perdidos por dissipação viscosa. Energia cinética é passada de grandes vórtices para os pequenos na denominada cascata de energia. A energia das grandes escalas é repassada as pequenas escalas que a dissipam em forma de calor. A faixa de escalas entre esses extremos é denominada faixa inercial.
- Difusividade. Mistura muito grande do escoamento a nível macroscópico, caracterizado por ter uma rápida taxa de difusão de quantidade de movimento e calor.

- Não linearidade. Escoamentos turbulentos são altamente não lineares. A não linearidade faz com que os parâmetros relevantes como o número de Reynolds Re , o número de Rayleigh Ra e o inverso do número de Richardson Ri excedam valores críticos, provocando mudanças na topologia do escoamento. A não linearidade está associada ao estiramento dos vórtices. Este é um processo chave pelo qual o escoamento se mantém tridimensional.
- Dissipação. Os mecanismos de estiramento dos vórtices transferem energia e vorticidade, incrementando as escalas menores e dissipando a energia pela viscosidade. Escoamentos turbulentos requerem o fornecimento contínuo de energia para compensar a perda por viscosidade.

As características descritas acima estão associadas à dificuldade de solução das equações de Navier-Stokes. Na atualidade, calcular exatamente o campo de escoamento turbulento a partir das equações de Navier-Stokes ainda tem custo computacional proibitivo. No entanto, a necessidade de simplificações no tratamento de turbulência resultou ao longo dos anos em vários tipos de modelos, cada um deles resolvendo intervalos diferentes das escalas da turbulência.

Dentre estas abordagens, destacam-se a denominada simulação numérica direta (SND), as equações com médias de Reynolds RANS (Reynolds Averaged Navier-Stokes) e a simulação de grandes escalas (SGE). Em SND, que resulta ser uma simulação numérica direta das equações, não existe modelo para a turbulência; porém, se tem a captação do que ocorre na chama a um alto custo computacional. RANS e SGE são níveis de formulação que utilizam modelos de turbulência. Todas as abordagens são mostradas na fig. 1.1 e brevemente apresentadas aqui.

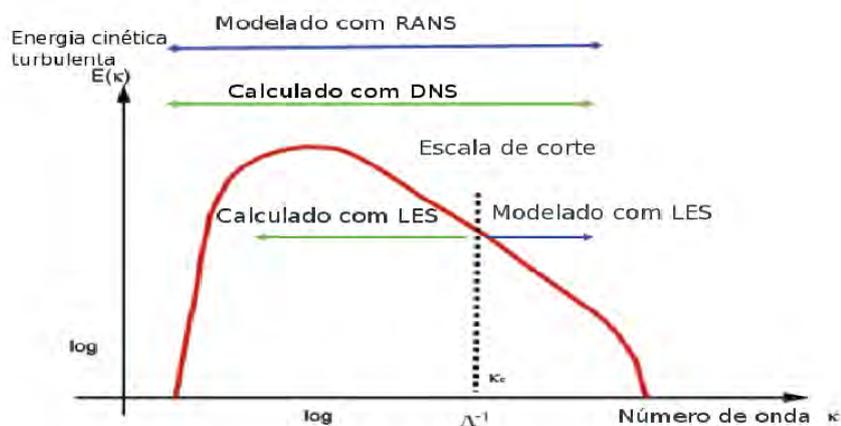


Figura 1.1 - Abordagens e métodos para resolver as escalas turbulentas.

1.2.1 Simulação Numérica Direta

Na abordagem SND não são incluídos modelos. As equações de Navier-Stokes são calculadas na sua forma mais geral, o que significa que o espectro completo de frequências envolvidas e todas as escalas de comprimento são resolvidas. Isto envolve a solução das equações de conservação para escalas físicas menores (escalas de Kolmogorov). O tamanho de malha requerido para simular toda a faixa das escalas da turbulência, ainda para casos envolvendo geometria simples, pode ser estimada proporcionalmente a $Re_T^{9/4}$, onde Re_T é o número de Reynolds turbulento. Para muitas aplicações práticas geralmente o número de Reynolds é grande, fazendo que os requerimentos computacionais para SND sejam enormes e caros. Para escoamentos reativos e com geometria complexa SND é menos factível. Deve ser observado que esta abordagem só é viável no momento atual para escoamentos com baixo número de Reynolds, principalmente devido as limitações computacionais. Também se utiliza SND na resolução da estrutura interna da chama (POINSOT; VEYNANTE, 1997), sendo utilizado principalmente como teste de validação para outras abordagens ou como uma ajuda na compreensão física da turbulência.

1.2.2 Equações Com Médias de Reynolds

Na técnica RANS as variáveis são calculadas para seus valores médios. As equações do balanço para as quantidades médias de Reynolds ou Favre são obtidas pela média das equações instantâneas. As equações de Navier-Stokes são calculadas para um período grande o suficiente para conter também a oscilação de frequência mais baixa. O comportamento não estacionário dos escoamentos turbulentos é completamente negligenciado e a turbulência se torna um fenômeno estacionário, simplesmente considerando os efeitos das flutuações no escoamento médio. No estado da arte, simulações RANS são o padrão para os escoamentos envolvendo transferência de calor de interesse industrial. A facilidade de implementação, aliada a uma resolução razoável do escoamento médio, fazem com que o método RANS seja um modelo de complexidade média. Acredita-se que esta abordagem ainda será praticada a médio prazo.

As equações médias requerem regras de fechamento que são fornecidas por modelos de turbulência em concordância com a dinâmica do escoamento. Para resolver combustão é necessário, também, agregar um modelo de combustão turbulenta que descreva a conversão de espécies químicas e a liberação de calor. Os modelos para a viscosidade turbulenta que são usados com mais frequência são os modelos $k-\epsilon$ e seus derivados, com cálculo das tensões de Reynolds mediante a hipótese de Boussinesq

(BOERSMA; LELE, 1999).

O modelo $k - \epsilon$ proposto por Jones e Launder (1972) assume que a turbulência é isotrópica, mas nos escoamentos usuais frequentemente apresentam-se características não isotrópicas. As desvantagens deste modelo são que as equações do balanço para k e ϵ podem ser obtidas, mas exigem o modelamento de alguns termos para serem resolvidas (FERZIGER; PERIC, 2002). Leis algébricas são utilizadas para prever os campos de escoamentos na vizinhança das paredes. O modelo $k - \epsilon$ deve ser modificado para escoamentos compressíveis.

O modelo $k - \epsilon$ de baixo Reynolds compartilha a mesma estrutura básica do modelo $k - \epsilon$ padrão, diferenciando-se unicamente na introdução de uma função denominada de amortecimento. Essa função é introduzida para reproduzir o efeito da viscosidade molecular atuando nos tensores turbulentos. Para manter concordância com o modelo $k - \epsilon$ padrão nas zonas de altos números de Reynolds, ele deve tender ao modelo padrão na camada logarítmica, com turbulência totalmente desenvolvida. Uma segunda função de amortecimento é introduzida no termo fonte da equação de dissipação de energia cinética turbulenta. Esta função cumpre o papel de incorporar os efeitos dos baixos números de Reynolds no termo fonte. A terceira função introduzida na mesma equação usualmente tem influência nas magnitudes dos valores de pico ou nas paredes. O modelo de Abe et al. (1994) denominado AKN utiliza duas aproximações para representar a função de amortecimento e calcula o número de Reynolds turbulento por meio de uma função de dissipação turbulenta. Outro modelo proposto por Chien (1982), incorpora a mesma função de amortecimento como uma função de parede. Outros modelos similares foram propostos por Cheng et al. (1996), Hwang e Lin (1998) e Lam e Bremhorst (1981).

Os modelos do tipo $k - \omega$ são baseados na proposta original de Kolmogorov de 1942. Em geral, eles usam a mesma equação para k mas desenvolvem uma segunda equação para o parâmetro ω , que representa a taxa de dissipação de energia por unidade de volume. O valor recíproco de ω serve como uma escala local de tempo turbulento e o comprimento da escala é obtida por $k^{0.5}/\omega$. Na época em que foi proposto, não foi possível implementá-lo computacionalmente por falta de sistemas computacionais adequados. Somente na década de setenta Saffman formulou um modelo $k - \omega$ capaz de reproduzir efeitos de gradientes de pressão adversa. Wilcox (1998) integrou o modelo proposto originalmente na sub-camada viscosa.

1.2.3 Simulação de Grandes Escalas

O modelo de fechamento da viscosidade turbulenta proposta por Smagorinsky (SMAGORINSKY, 1963) relaciona as incógnitas das escalas de sub-malha (SGS) com as taxas de deformação do escoamento filtrado. Mudanças significativas têm sido feitas para fazer desta metodologia uma ferramenta preditiva mais precisa em análise de escoamentos turbulentos.

A ideia desta técnica é calcular explicitamente as grandes estruturas do campo do escoamento, tipicamente as estruturas maiores que o tamanho da malha computacional. São modelados apenas os efeitos das pequenas escalas (VEYNANTE; VERVISCH, 2002). Em outras palavras, equações filtradas resolvem as grandes escalas e se modelam as escalas abaixo de um comprimento de corte e da sub-faixa viscosa de dissipação. A escala de corte se encontra geralmente no subdomínio inercial (DAVISON, 2006).

A derivação das equações para as simulações em grandes escalas são obtidas pela filtragem das equações do balanço instantâneo. A qualidade do cálculo e a precisão dos resultados estão diretamente relacionados ao modelo físico de sub-malha usado (FERZIGER; PERIC, 2002).

Nos últimos anos, avanços significativos têm acontecido no desenvolvimento da parte modelada dos fenômenos turbulentos. Estes avanços são baseados na observação de que as micro-escalas turbulentas têm um comportamento isotrópico. Assim, a noção de que um comportamento global das pequenas escalas pode ser aproximado por um modelo de turbulência é vista por muitos como uma possível solução na parte modelada da turbulência (GUERMOND *et al.*, 2004).

A quantidade de possíveis modelos SGE é tão grande quanto a quantidade de modelos RANS e uma comparação de diferentes modelos é feita por Fureby *et al.* (FUREBY *et al.*, 1997). Esses modelos usam a hipóteses de Boussinesq, no qual o efeito não resolvido da turbulência sobre as grandes escalas é modelado usando uma aproximação do tensor viscoso. Entre os mais usados temos o modelo de Smagorinsky e modelo de uma equação (SMAGORINSKY, 1963), (SCHUMANN, 1975).

Um problema de grande importância ainda presente nos modelos de turbulência é sua fraca aproximação para o termo fonte na equação de fechamento para as flutuações de sub-malha na equação de conservação de espécies. Schumann (1989) foi um dos primeiros a aplicar SGE para escoamento reativo incompressível, mas a sua hipótese

simplifica os efeitos das flutuações em escalares (concentração e temperatura) para a taxa de reação. A importância de tais flutuações é conhecida em RANS e é natural acreditar que também são de importância em SGE.

Entre os termos a modelar têm-se as tensões de Reynolds não resolvidas, os fluxos de espécies e de entalpia não resolvidos, os fluxos difusivos laminares filtrados para espécies e entalpia e a taxa de reação química filtrada. Na solução das partes não resolvidas (sub-malha) geralmente são usados o modelo de turbulência de Smagorinsky (SMAGORINSKY, 1963) e o modelo dinâmico de Germano (GERMANO, 1986a; GERMANO, 1986b; GERMANO et al., 1991). O modelo de Smagorinsky é um dos mais antigos e populares, pela sua fácil formulação. Esses modelos baseados na hipótese de Boussinesq adicionam ao tensor das tensões o termo da viscosidade turbulenta que depende de uma escala de comprimento (escala integral).

O uso de filtros, amplamente aceito na literatura para resolver SGE, tornou-se um paradoxo quando Germano (GERMANO, 1986a; GERMANO, 1986b) conseguiu demonstrar que existem filtros tais que o fechamento exato é possível. Isto é, o tensor das tensões de Reynolds, presente a nível de sub-malha no modelo de Smagorinsky, pode ser expresso exatamente em termos apenas da velocidade filtrada. Porém, o procedimento completo não conduz a ganhos, já que os dois conjuntos de solução são isomórficos. Com a identidade proposta pelo modelo se conseguem 5 equações independentes para uma incógnita. O que significa redundância nas equações para representar uma solução nas equações filtradas de Navier-Stokes. Na prática, o valor da incógnita, que é a constante do modelo, pode ser determinado usando procedimentos de otimização (GHOSAL et al., 1995).

1.2.3.1 SGE com combustão

O estudo de modelos com SGE para chama de pré-mistura é um área de pesquisa muito ativa. Esses modelos têm sido aplicados em um grande número de estudos em combustores para prognóstico de emissões (EGGENSPIELER; MENON, 2005), estudos de combustão pré-misturada (CHAKRAVARTHY; MENON, 2000; SANKARAN; MENON, 2004), de combustão não pré-misturada (MENON; CALHOON, 1996; CALHOON et al., 1995), de instabilidades de combustão (ANGELBERGER et al., 2000; STONE; MENON, 2003; SHINJO et al., 2003) e em motores de combustão (DIMARE et al., 2004).

A aproximação SGE é baseada em várias formas de interpretar computacionalmente a frente de chama. Em combustão pré-misturada, o escoamento consiste de regiões de reagentes ou gases não queimados e regiões de gases queimados, ou produtos. A

extensão da combustão dos gases pode ser descrita em termos de uma variável que distingue entre estas duas regiões. Essa variável é denominada variável de avanço. Entre os modelos que usam este tipo de aproximação se tem a aproximação de chama delgada proposto por [Butler e O'Rourke \(1977\)](#). Neste método, a frente de chama é artificialmente adelgada ao multiplicar a difusividade térmica e molecular por um fator F e reduzir a taxa de reação pelo mesmo fator. A mais conhecida aproximação SGE de pré-mistura é a da equação- g ([IM et al., 1997](#)). A função- g é construída para ter um valor igual a zero na região de interface entre os gases frescos e queimados. Nesta aproximação g não se tem significado físico, sendo unicamente usado por conveniência computacional com uma equação de transporte. Detalhes do modelo podem ser encontrados em [Peters \(2000\)](#). [Park e Ko \(2011\)](#) usam esta aproximação para simulações com obstáculos para escoamentos confinados.

Outros métodos para simular combustão em regime de pré-mistura são os que vinculam a variável de avanço da frente de chama. Muitos desses métodos são baseados na forma de acompanhamento da frente de chama, que em combustão de pré-mistura separa a região de gases queimados e frescos. Uma variável de avanço é definida para determinar o movimento da frente de chama desde a região queimada até a região não queimada e que substitui a avaliação da química detalhada por propriedades geométricas da superfície da chama. Os efeitos de estiramento e curvatura da superfície de chama são descritos por [Vervisch et al. \(1995\)](#). Esta técnica inicialmente desenvolvidas em RANS ([CANDEL; POINSOT, 1990](#); [CANT et al., 1990](#)), ([MARBEL; BROADWELL, 1977](#); [POPE, 1988](#)) são baseadas em um modelo de *flamelet* laminar. O modelo estabelece uma frente de chama laminar propagando-se localmente mas, que, ao mesmo tempo, está sendo enrugada por conta da interação com a turbulência. A velocidade da chama pode ser modelada em termos da velocidade de chama laminar, que é uma quantidade conhecida, e pelo grau de enrugamento da chama, determinado por um parâmetro obtido em função de suas relações geométricas denominadas Σ . O sistema é determinado em termos da equação de transporte para a variável de avanço e Σ ([BOGER et al., 1988](#); [HAWKES; CANT, 2000](#)).

Modelos de densidade de superfície de chama (FSD) são baseados em parâmetros geométricos da frente de chama que avaliam a variável de avanço. Neste caso, os modelos flamelet consideram uma chama laminar enrugada localmente pela turbulência. A quantidade de enrugamento é medida como a superfície de chama por unidade de volume Σ ([BOGER; VEYNANTE, 2000](#)). Equações de transporte são necessárias para resolver a variável de avanço e para o enrugamento. Estas equações descrevem

a evolução da chama a partir do enrugamento que incrementa a taxa de queima.

Existem alternativas menos complexas que a equação de transporte para Σ que são baseadas em modelos algébricos (MANICKAM et al., 2012; AKULA et al., 2006) e modelos de similaridade (KNIKKER et al., 2002). Esses modelos são menos precisos que o método da equação de transporte e também de menor custo computacional. Muitos pesquisadores têm usado a metodologia RANS com o objetivo de simular escoamento reativo para configurações com retentores de chama, mas discrepâncias importantes foram observadas nos resultados para escoamentos complexos com obstáculos circulares (SAGHAFIAN et al., 2003; FRENDI et al., 2004) e com obstáculos triangulares (BAI; FUCHS, 1994; DOURADO, 2003; ERIKSSON, 2007). Esses autores reportam diferenças nos resultados encontrados para a velocidade turbulenta, para a distribuição da viscosidade turbulenta e para a escala integral. Essas diferenças afetam o cálculo da difusão da frente de chama, a qual é sobrestimada. Os efeitos de instabilidade de Kelvin-Helmholtz atrás do obstáculo não são bem capturados e o comprimento da zona de recirculação, assim como a velocidade de chama turbulenta não são recuperados.

Muitos estudos experimentais sobre retentores de chama em escoamento confinado foram efetuados por pesquisadores nas décadas passadas. Cheng (1984), Cheng et al. (1989), Cheng e Shepherd (1991) conduziram uma série de medições focando principalmente os aspectos da interação entre chama e turbulência. Utilizando técnicas de medição a laser eles avaliaram o espectro de frequência para a variável de avanço e para as componentes de velocidade. Os resultados foram comparados a valores teóricos obtidos por Bray-Libby-Moss. As medições mostraram que as distribuições espectrais e as frequências energéticas das componentes da velocidade normal e tangencial da chama turbulenta corrugada estão correlacionadas com o espectro da variável de avanço, mostrando que tais frequências estão acopladas apesar que suas escalas espaciais não serem as mesmas.

Outros conjuntos de estudos experimentais foram conduzidos por Sjunnesson et al. (1992), Sjunnesson et al. (1991a), Sjunnesson et al. (1991b) na Volvo (Suécia). O experimento Volvo consiste de um retentor triangular com uma taxa de bloqueio de 33% e um número de Reynolds baseado na velocidade de entrada de 204.000. O número de Strouhal (St) observado é igual a 0,417. O número de Damköhler é 10 e o número de Karlovitz 4. A chama resultante para esta condição é uma chama enrugada espessa, segundo o diagrama de Borghi (BORGHI; DESTRIAU, 1998).

No experimento de Sanquer (1998), a taxa de bloqueio também corresponde a 33%,

mas o número de Reynolds é de 6690, muito menor que o do experimento Volvo. O número de Strouhal é igual a 0,276. Além disso, as características da emissão de vórtices e as escalas turbulentas (integral e de Kolmogorov) também foram significativamente diferentes. Os resultados de Sanquer serão discutidos e comparados às simulações numéricas realizadas neste trabalho e apresentadas no cap. 5. Especificamente, a presente simulação corresponde ao experimento de Sanquer que cai no diagrama de Borghi para $Da < 1$ e $Ka > 1$, ou seja, na região de chama enrugada delgada.

A relação entre as estruturas das grandes escalas e a combustão foi analisada em detalhe por Kiel et al. (2007). Eles usaram velocimetria laser Doppler e encontraram que os grandes vórtices são os principais responsáveis por conduzir à extinção da chama. A dinâmica dos vórtices - e não a geometria - é o mecanismo dominante na extinção de chama em retentores. Em condições estequiométricas, a estabilidade de chama em retentores de chama quadrados e v- gutters são dependentes da camada cisalhante. A estabilidade de chama atrás de retentores cilíndricos são dependentes tanto da camada cisalhante quanto dos grandes vórtices. Esses resultados confirmam que a chama perto da extinção não é dominada por pequenos vórtices turbulentos, mas por grandes vórtices do tipo Von Karman.

Chaudhuri et al. (2011), usando velocimetria de imagens de partículas (PIV) e imagens de OH com fluorescência induzida por laser plano (PLIF), estudaram a extinção de chama para retentores triangulares em escoamentos confinados em combustores. Eles concluíram que, para uma razão de equivalência pobre, a combustão é mais eficiente. Chaudhuri et al. (2011) concluíram que decrescendo a razão de equivalência muda-se a forma da chama por causa da redução da velocidade de chama. No entanto, a chama fica instável. Neste caso, a frente de chama alonga a emissão de vórtices de Kelvin Helmholtz na camada cisalhante. Este fenômeno pode ser observado através da distribuição de OH na chama. Para chamas queimando a taxas próximas da razão estequiométrica, a ocorrência de grandes sinais de OH foram claramente observados. Isso é consequência de uma condição de combustão mais estável. Das observações de Chaudhuri et al. (2011) se estabelece que o radical OH é a variável mais adequada para identificar a posição da frente de chama e a sua espessura. No experimento, a borda da chama está enrugada como consequência dos vórtices de Kelvin Helmholtz na camada cisalhante, onde pequenos vórtices penetram na espessura da frente de chama.

Vários pesquisadores usam SGE para análises de escoamentos reativos com reten-

tores de chama. Porumbel (2006), Akula et al. (2006), Ge et al. (2007), Park e Ko (2011), Manickam et al. (2012) simularam o experimento Volvo (SJUNNESSON et al., 1991b; SJUNNESSON et al., 1992). Porumbel (PORUMBEL, 2006) realizou uma simulação SGE do experimento Volvo baseada no modelo *Linear Eddy Mixing* (LEM). Nela, observou-se uma forte dependência dos parâmetros das simulações com o modelo de turbulência e com as condições de contorno (VEYNANTE, 2006).

De um modo similar à variável Σ , Weller (1993), Weller et al. (1998) e Tabor e Weller (2004), propuseram um modelo baseado na densidade de enrugamento Ξ , que define a área da chama por unidade de área resolvida na direção média de propagação. Weller (1993) originalmente desenvolveu o modelo na metodologia RANS e posteriormente Tabor e Weller (2004) adaptaram o método para SGE. A vantagem de usar Ξ está na forma simples de modelar os termos de transporte, como é discutido em Weller (1993), Weller et al. (1998) e Tabor e Weller (2004).

Os modelos SGE de combustão para chamas não pré-misturadas usualmente assumem que o tempo das escalas turbulentas são maiores do que o tempo das escalas químicas. Então, admite-se que os escoamentos reativos são em geral controlados por processos turbulentos e moleculares. Kerstein propôs o modelo de grandes escalas linear, denominado em inglês *Linear Eddy Model* (LEM) (KERSTEIN et al., 1988; KERSTEIN, 1989). Este modelo está baseado em uma descrição estocástica unidimensional dos processos de mistura turbulentos. Os processos de difusão molecular e químicos são descritos também por uma equação de balanço unidimensional. Isso leva a um alto custo computacional, pois em cada célula material se requer fazer esses cálculos. Um outro modelo baseado em LEM é o denominado modelo de micro-mistura dinâmico proposto por Réveillon e Vervisch (1998). Este modelo é capaz de resolver simultaneamente as grandes escalas não estacionárias e as de difusão das espécies químicas de sub-malha. O cálculo para estimar a micro-mistura é feito a partir de um escalar de propriedades conhecidas nas grandes escalas resolvidas. Esse escalar serve para relacionar a parte difusiva da sub-malha para diferentes tamanhos de filtro.

O modelo reator parcialmente misturado, denominado em inglês *Partially Stirred Reactor* (PaSR), proposto por Karlsson (1995) é um método alternativo para cálculo de combustão turbulenta, pois inclui os efeitos da cinética química detalhada e da micro-mistura num passo só. Ele sintetiza ambos os efeitos, com ganho no tempo químico da combustão, o que reduz, também, custos computacionais.

O modelo função de densidade probabilística, ou em inglês *probability Density*

Function (PDF), foi inicialmente proposto por Gao e O'Brien (1993) e desenvolvido depois por outros autores (COOK; RILEY, 1994; COOK; RILEY, 1992). Este modelo usa um filtro de Favre para escalares como a fração em massa das espécies e temperatura, introduzindo uma função delta de Dirac no filtro e obtendo na simplificação a função de densidade provável. Este modelo PDF é resolvido por suposição (COOK; RILEY, 1994; COOK; RILEY, 1992) e por um modelo dinâmico similar ao proposto por Germano (RÉVEILLON; VERVISCH, 1997). Ele pode ser resolvido também a partir de uma equação de transporte (GAO; O'BRIEN, 1993), mas este método ainda não está o suficientemente testada (RÉVEILLON; VERVISCH, 1997).

O emprego da técnica SGE tem crescido como uma ferramenta no estudo da combustão em fase gasosa nos últimos anos (KAWAI; LELE, 2008; KEMPF, 2008; VICQUELIN et al., 2008) e é válido também para a simulação da combustão em spray (WATANABE et al., 2007; LEDERLIN; PITSCH, 2008). Esses processos de combustão que abrangem duas fases físicas são muito complexos. Na primeira etapa, tem-se a dispersão das gotículas líquidas de combustível e depois a evaporação na fase gasosa, onde acontecem as reações químicas. Os mecanismos que regem estes processos não são ainda completamente compreendidos. Os trabalhos de Steiner e Bushe (1998), Pitsch e Steiner (2000), Liu et al. (2003), Saxena e Williams (2007), Kawai e Lele (2008), Vicquelin et al. (2008) permitem uma melhor compreensão das chamas difusivas e mostram dados experimentais e numéricos.

1.3 Modelo Numérico

O código usado para este trabalho é o Open Source Field Operation and Manipulation (OPENFOAM). Ele foi desenvolvido em C++ e se mantém aberto para seu uso e manipulação pela comunidade de CFD. O código é desenvolvido em C++, orientado a objetos. O código apresenta a metodologia de grandes escalas para resolver combustão de pré-mistura com um modelo denominado *Xi*. Esse modelo de combustão é baseado no conceito de aproximação de variável de avanço ou modelo de chama de densidade de superfície. Para o caso não pré-misturado, o código tem implementado um modelo do tipo reator parcialmente misturado que é denominado *reactingfoam*. O código está unicamente desenvolvido em metodologia de médias de Reynolds até a versão 2.0 do OpenFoam.

1.4 Objetivos

O objetivo deste trabalho é adaptar um modelo de combustão turbulenta de chamas difusivas, ou não pré-misturadas, baseado na abordagem RANS implementada agora

na abordagem SGE. A ideia consiste em fazer uma simulação numérica destas chamas a partir de um modelo de combustão baseado em uma aproximação de mistura turbulenta compressível do tipo PaSR com simulação de grandes escalas.

Preliminarmente serão avaliados os modelo de turbulência de Smagorinsky e modelos dinâmicos de sub-malha presentes no código OpenFoam, para observar se o desempenho do modelo é correto. Para a combustão é usado um modelo baseado na superfície de enrugamento Ξ desenvolvido por Tabor e Weller (2004). Esses modelos são aplicados em uma simulação de chama pré-misturada turbulenta, que pertence a faixa de chama enrugada delgada. Comparações com resultados experimentais obtidos por Sanquer (1998) serão realizados, sendo inédito o uso da metodologia SGE para este experimento.

O queimador piloto de SANDIA é conhecido por ser um dispositivo de chama de características complexas, mas fácil de implementar numericamente. O queimador é um modelo que reproduz chamas de difusão presente em muitos dispositivos de propulsão, porém de um alto grau de complexidade. Para validar o modelo reator parcialmente misturado é realizada a simulação do queimador piloto SANDIA (TNF, 2011), mas com o código desenvolvido para SGE usando o modelo de turbulência previamente avaliado. Resultados numéricos são comparados aos experimentais disponibilizados pelo TNF (TNF, 2011) e pela universidade de Sidney (SYDNEY UNIVERSITY OF, 2010). Outros resultados numéricos obtidos por outras fontes são também comparados para verificar se o código implementado neste estudo é adequado.

1.5 Estrutura da Tese

Uma descrição física dos tipos de chama, tanto de pré-mistura como não pré-misturada é desenvolvida no capítulo 2. A formulação matemática vem em seguida, detalhando a interação entre turbulência e combustão, mas principalmente desenvolvendo o modelo PaSR, que permite simular química detalhada em regime turbulento. No capítulo 4 se mostram as implementações do modelo matemático com SGE para combustão de chama de não pré-misturada, os modelos de turbulência de sub-malha, a discretização das equações e uma metodologia para o tratamento da pressão. No capítulo 5, comparações, entre dados experimentais análises e resultados de simulados, são feitas avaliando o modelo tanto para chamas de pré-mistura como para não pré-misturadas. Os dados experimentais de chamas difusivas foram obtidos do laboratório da universidade de SIDNEY. As conclusões e estudos futuros que podem ser desenvolvidos a partir deste trabalho são mostrados no capítulo 6.

2 DESCRIÇÃO DOS ASPECTOS FÍSICOS DO PROBLEMA ESTUDADO

2.1 Introdução

Neste capítulo serão objetos de estudos os aspectos referentes à classificação dos tipos de chama existentes na literatura. Chamas podem ser classificadas dependendo da forma como os reagentes são introduzidos na zona de combustão. Dois tipos podem ser identificados: as chamas de pré-mistura e as não pré-misturadas. Na combustão de chamas de pré-mistura, combustível e oxidante são perfeitamente misturados molecularmente antes de entrar na zona de reação. Nesta zona, a taxa de reação é máxima. Estabilidade de chama, extinção e avanço da chama em direção a alimentação são problemas que podem ocorrer neste tipo de chama. Em combustão não pré-misturada, os reagentes são introduzidos separadamente na câmara de combustão e a mistura dos reagentes é controlada basicamente por difusão molecular e transporte turbulento no caso de escoamento turbulento, limitando a taxa de reação.

No presente trabalho, será objeto de estudo tanto chamas pré-misturadas quanto as não pré-misturadas. Contudo, o foco principal do trabalho está em chamas não pré-misturadas.

2.2 Chamas de Pré-mistura

A chama de pré-mistura é caracterizada pela situação onde combustível e o oxidante são pré-misturados antes de atingirem a frente de chama. A mistura, dos reagentes e considerada homogênea e, por tanto, assume-se que não existe gradiente de concentração de reagentes. Como descrito em Zel'dovich et al. (1985), dois modos de propagação das ondas de reação podem ocorrer. No primeiro modo, a velocidade de propagação da onda de reação é supersônica e no segundo modo é subsônica. O primeiro, conhecido como onda de detonação, é causado pela rápida compressão dos reagentes, provocada por uma onda de choque que aquece a mistura rapidamente, fazendo com que a reação possa ocorrer. No segundo modo, a onda de reação química se propaga como uma onda de deflagração. Esta velocidade está associada à condutividade térmica e difusão moleculares e, por consequência a velocidade de propagação é à velocidade do som.

A chama laminar de pré-mistura num escoamento turbulento para números de Damköhler, (Da) bem elevados é simplesmente deformada, estirada e convectada. Nesta condição, a chama pré-misturada pode ser caracterizada como um conjunto

de chamas laminares infinitamente finas, estiradas e transportadas pelo escoamento. Por consequência, a caracterização e conhecimento das propriedades da chama laminar são bastante importantes na construção destes modelos.

2.2.1 Estrutura da Chama Laminar de Pré-mistura

Uma maneira de descrever a física da chama laminar de pré-mistura é dada pela teoria de Mallard e Le Chatelier (KUO, 2004). Ela descreve as zonas que compõem a chama laminar. A Fig. 2.1 mostra um diagrama de uma chama laminar. Nela são mostradas duas zonas diferentes, a zona I com espessura δ_H , ou zona de pré-aquecimento, onde os reagentes são aquecidos pelos gases queimados por meio de condução de calor e convecção até a temperatura de ignição. Esta zona é caracterizada por um equilíbrio difusão-convecção. A zona II é aquela onde as reações químicas ocorrem, convertendo entalpia química em entalpia sensível. Ela tem uma espessura δ_R bastante estreita, em comparação com a primeira zona. Esta região se caracteriza por estar em equilíbrio de difusão química.

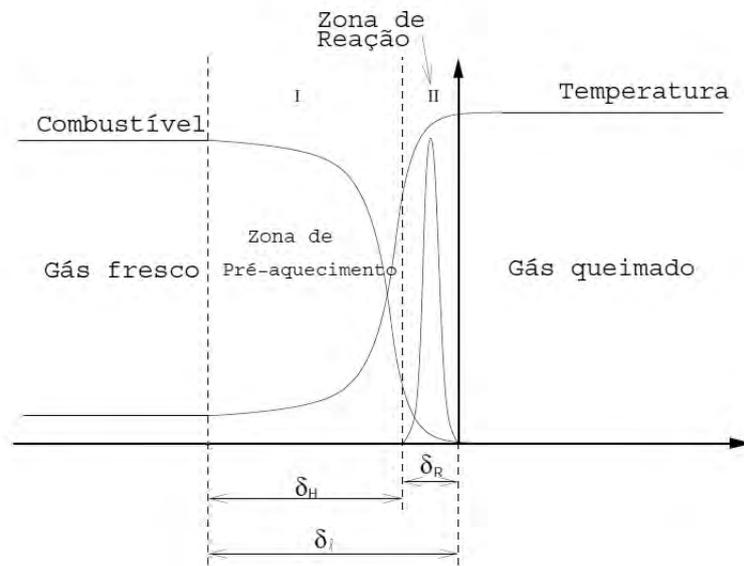


Figura 2.1 - Estrutura genérica de uma chama pré-misturada.

Fonte: Adaptada de Dourado (2003).

Entre os diversos modelos de chama laminar, aquele baseado na formulação assintótica apresentado por Zel'dovich e Frank-Kamenetsky (ZEL'DOVICH et al., 1985; KUO, 2004) tem uma abordagem simplificada, os principais mecanismos físicos que

influenciam sua propagação e a sua estrutura são de fácil compreensão. Esta formulação considera que a reação é simplificada na forma de uma única reação global e irreversível, expressa por



onde QR representa o calor liberado pela reação química, F é o combustível, ν o coeficiente molar, O_x representa o oxidante e P os produtos. Outras hipóteses são necessárias a fim de se desenvolver o modelo de Zel'dovich e Frank-Kamenetsky para uma chama laminar, conforme exposto em [Zel'dovich et al. \(1985\)](#), [Kuo \(2004\)](#) e [Williams \(1985\)](#). Estas hipóteses são:

- A pressão é constante;
- A consideração adotada para a reação global dada na Eq. (2.2) permite supor que o número de moles não varia durante a reação;
- O calor específico a pressão constante, C_p , e o coeficiente de difusão térmica, $\alpha = K/(\rho C_p)$, podem ser considerados constantes, onde K é a condutividade térmica e ρ a densidade;
- O número de Lewis, Le , é a razão entre a difusão térmica pela difusão molecular. Considera-se neste modelo, que a difusão térmica, α , é igual a difusão de espécies, \mathcal{D} , i.e., $K/C_p = \rho \mathcal{D}$, tal que o número de Lewis, dado pela relação

$$Le = \frac{\alpha}{\mathcal{D}}, \quad (2.3)$$

seja unitário, o que é uma aproximação bastante usual e conveniente para análise teórica de combustão. Em muitos sistemas, inclusive de misturas de hidrocarbonetos com ar, esta aproximação é válida. Tal aproximação implica na redução no número de equações diferenciais, reduzindo de duas (equação de energia e de conservação de espécie) para uma, substituindo uma delas por uma equação algébrica;

- A chama é unidimensional e estacionária;

- Os reagentes estão homogeneamente pré-misturados;
- Os efeitos de transferência de calor, de Soret, de Dufour e forças externas são desprezíveis;
- A difusão causada por gradientes de pressão é desprezível;
- A mistura é um gás perfeito;
- O coeficiente de viscosidade efetivo ($\frac{4}{3}\mu + k_2$) é igual a razão da condutividade térmica pelo calor específico médio (K/C_p), onde k_2 é o segundo coeficiente de viscosidade;
- O gás é uma mistura binária no qual ocorre a reação unimolecular
Reagente \rightarrow *Produto*;
- A dependência da condutividade térmica com a temperatura é dada por $KT^{\alpha_1-1} = \text{constante}$, onde α_1 é uma constante (WILLIAMS, 1985).

2.3 Chama Não Pré-misturada

A chama não pré-misturada compreende duas zonas: uma onde se encontra o combustível e o oxidante, separados lado a lado; a outra é a zona de reação, onde o calor é gerado. A zona de reação se encontra entre o combustível e o oxidante. A região de queima é controlada pela difusão dos reagentes na direção da zona de reação, como se pode ver na Fig. 2.2.

Numa chama não pré-misturada do tipo contracorrente, como mostrada na Fig. 2.3, a quantidade de calor transportada da zona de reação é exatamente equilibrada pelo calor gerado pela combustão. Na figura, Z é a fração de mistura.

Uma chama de difusão estacionária plana, com uma determinada, espessura pode ser vista nas vizinhanças do ponto de estagnação. Ao se incrementar a velocidade do jato ocorre a extinção quando os fluxos de calor que deixam a zona de reação são maiores do que a produção de calor químico. A estrutura de uma chama de difusão, ademais, depende das razões entre os tempos característicos representativos da difusão molecular e químico (LIÑAN, 1974).

Algumas das considerações importantes que se deve levar em conta para chamas laminares de difusão, são:

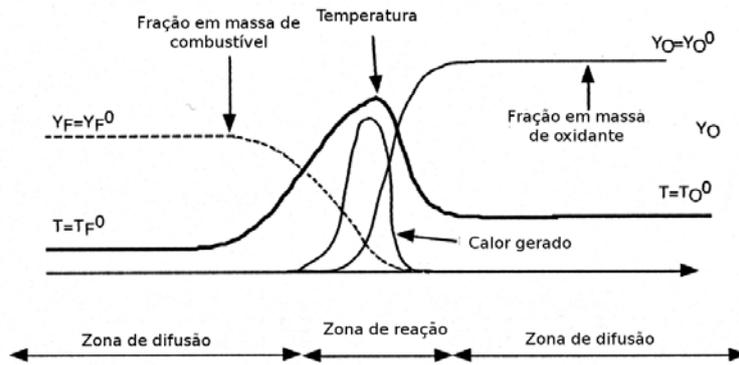


Figura 2.2 - Estrutura genérica de uma chama laminar de difusão, Y_O e Y_F são, respectivamente, a fração mássica de oxidante e combustível respectivamente, T_O e T_F correspondem às temperaturas do oxidante e ao combustível respectivamente. Fonte: Adaptada de Veynante e Vervisch (2002).

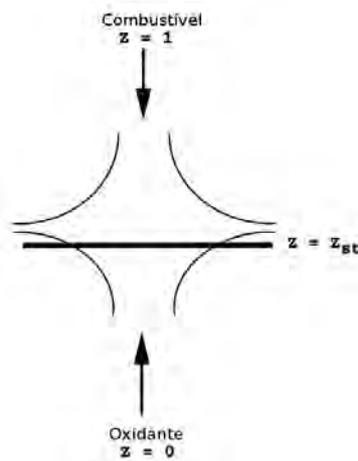


Figura 2.3 - Estrutura genérica de uma chama de contracorrente de difusão.

- Longe de cada lado da chama, o gás é demasiado rico ou demasiado pobre para queimar. As reações químicas ocorrem apenas nas regiões limitadas, onde o combustível e o oxidante são misturados de forma adequada. As condições mais favoráveis ocorrem onde combustível e oxidante estão em proporções estequiométricas: a chama de difusão normalmente fica ao longo dos pontos, onde se produz uma mistura estequiométrica.
- Chamas como aquela mostrada na Fig. 2.2 são estáveis apenas quando um esforço é aplicado à chama, ou seja, quando os fluxos de combustível e oxidante são empurrados um contra o outro a uma dada velocidade.

- Chamas de difusão não apresentam uma velocidade de referência, ao contrário das pré-misturadas. As chamas não são capazes de se propagar na direção do combustível por causa da falta de oxidante e por falta de combustível na corrente do oxidante, o que faz a propagação impossível. A falta de propagação indica que a zona de reação não se move de forma significativa, em relação ao campo de escoamento.
- As chamas de difusão não têm uma espessura de referência, ou seja, não são constantes e dependem das propriedades locais do escoamento.

Se consideramos uma reação química irreversível de um passo só, entre combustível e oxidante, temos:



Onde s é o coeficiente estequiométrico em massa.

$$s = \frac{\text{massa}_{\text{oxidante}}}{\text{massa}_{\text{combustível}}} = \frac{\nu_O W_O}{\nu_F W_F}, \quad (2.5)$$

Onde ν_O e ν_F representam, respectivamente, os coeficientes molares do oxidante e do combustível e W massa molar. Em termos da fração mássica, esta reação química pode ser escrita como:

$$\nu_P \delta Y_P = \nu_F \delta Y_F + \nu_O \delta Y_O. \quad (2.6)$$

Onde δY_F , δY_O e δY_P são as variações da fração mássica do combustível, oxidante e produtos, ν_i é o coeficiente estequiométrico molar da espécie i e W_i a massa molar das espécies.

As equações para fração mássica e temperatura são necessárias para determinar as propriedades da chama:

$$\frac{\partial \rho Y_F}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U} Y_F) = \nabla \cdot (\rho \mathcal{D}_F \nabla Y_F) - \nu_F W_F \dot{\omega},$$

$$\frac{\partial \rho Y_O}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U} Y_O) = \nabla \cdot (\rho \mathcal{D}_O \nabla Y_O) - \nu_O W_O \dot{\omega}, \quad (2.7)$$

$$\frac{\partial \rho T}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U} T) = \nabla \cdot \left(\frac{\lambda}{C_p} \nabla T \right) - \nu_F W_O \left(\frac{Q}{C_p} \right) \dot{\omega}.$$

Nestas equações acima a difusão molecular é expressa usando a lei de Fick. As taxas de reação química do combustível e do oxidante são respectivamente $\dot{\omega}_F = \nu_F W_F \dot{\omega}$ e $\dot{\omega}_O = \nu_O W_O \dot{\omega}$. A quantidade de calor gerado pela combustão de uma unidade de massa de combustível será aqui denotado como Q .

A estrutura interna das chamas de difusão é apresentada através da definição do grau de mistura entre combustível e oxidante. Primeiro, assume-se que as difusividades moleculares do combustível e do oxidante são iguais (ou seja, $\mathcal{D}_F = \mathcal{D}_O = \mathcal{D}$). Combinando as equações de transporte para Y_F e Y_O , um escalar conservado $\psi(Y_F, Y_O) = Y_F - Y_O/s$ é introduzido. A variável ψ não é influenciada pela reação química e é denominada variável de Shvab-Zel'dovich e a variável $s = (\nu_O W_O / \nu_F W_F)$ é o denominado coeficiente estequiométrico de massa. A fração de mistura Z é definida então pela normalização de ψ , usando valores do combustível e oxidante na corrente. Z assume valores de zero (no oxidante) a um (no combustível),

$$Z = \frac{\phi \frac{Y_F}{Y_{F,0}} - \frac{Y_O}{Y_{O,0}} + 1}{\phi + 1}, \quad (2.8)$$

onde $Y_{F,0}$ é a fração mássica de combustível e $Y_{O,0}$ é a fração mássica do oxidante (no caso do ar $Y_{O,0} \approx 0,230$). A razão de equivalência, ϕ é definida por:

$$\phi = \frac{s Y_{F,0}}{Y_{O,0}}. \quad (2.9)$$

A equação do balanço para a fração de mistura fica da seguinte forma:

$$\frac{\partial \rho Z}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U} Z) = \nabla \cdot (\rho D \nabla Z). \quad (2.10)$$

As outras variáveis de Shvab-Zel'dovich $\psi(Y_F, T)$ e $\psi(Y_O, T)$, denominadas escalares conservados, podem ser calculadas ao se combinar as variáveis (Y_F, T) e (Y_O, T) . A

fração de mistura e os escalares conservados são linearmente relacionados e podem ser dados por:

$$Y_O(\mathbf{x}, t) = \underbrace{Y_{O,0}(1 - Z(\mathbf{x}, t))}_{\text{Mistura}} + \underbrace{\frac{\nu_O W_O}{\nu_F W_F} \left(\frac{C_p}{Q} \right) [Z(\mathbf{x}, t)(T_{F,0} - T_{O,0}) + (T_{O,0} - T(\mathbf{x}, t))]}_{\text{Combustão}}, \quad (2.11)$$

$$Y_F(\mathbf{x}, t) = \underbrace{Y_{F,0}Z(\mathbf{x}, t)}_{\text{Mistura}} + \underbrace{\frac{C_p}{Q} [Z(\mathbf{x}, t)(T_{F,0} - T_{O,0}) + (T_{O,0} - T(\mathbf{x}, t))]}_{\text{Combustão}}. \quad (2.12)$$

Onde $T_{O,0}$ e $T_{F,0}$ correspondem às temperaturas do combustível e do oxidante na corrente, respectivamente. Utilizando-se as expressões acima, a chama de difusão é totalmente determinada quando a fração de mistura Z e qualquer um dos parâmetros T , Y_F , Y_O é conhecido.

Para coeficientes de difusão diferentes de combustível e oxidante, as relações para os escalares conservados ainda podem ser usadas. Para tanto, uma fração de mistura adicional Z_L deveria ser introduzida. Ela deve satisfazer a equação de quantidade de movimento:

$$Z_L = \frac{\Phi \frac{Y_F}{Y_{F,0}} - \frac{Y_O}{Y_{O,0}} + 1}{\Phi + 1}, \quad (2.13)$$

Onde $\Phi = (Le_O/Le_F)\phi$ é a relação do número de Lewis entre combustível e oxidante, dividido pela razão de equivalência.

A equação de transporte de Z com esta aproximação fica:

$$\rho \frac{DZ}{Dt} = \frac{1}{\mathcal{L}} \nabla \cdot \left(\frac{\lambda}{C_p} \nabla Z_L \right), \quad (2.14)$$

onde

$$\mathcal{L} = Le_O(1 + \phi)/(1 + \Phi). \quad (2.15)$$

Sendo Le o número de Lewis. A relação entre Z e Z_L é dada na tabela 2.1. Quando $Le_O = Le_F$, resulta $Z_L = Z$ sendo que, em experimentos ou em simulações que têm química complexa, a fração de mistura é definida da fração de massa do número atômico (BARLOW et al., 2000). Na tabela 2.1, $Z_{st} = 1/(1 + \phi)$ e $Z_{Lst} = 1/(1 + \Phi)$. O subscrito 0 indica quantidades medidas do combustível ou oxidante puro, e T_f é a temperatura de chama.

Tabela 2.1 - Relações para química infinitamente rápida incluindo número de Lewis diferente de 1.

Lado do Oxidante $Z < Z_{st}$ e $Z_L < Z_{Lst}$	lado do combustível $Z < Z_{st}$ e $Z_L < Z_{Lst}$
$Z = Z_L(1 + \Phi)/(1 + \phi)$	$Z = (\phi(Z_L(1 + \Phi) - 1)/\Phi + 1)/(1 + \phi)$
$Y_F = 0$	$Y_O = 0$
$Y_O = Y_{O,0}(1 - Z(1 + \phi))$	$Y_F = Y_{F,0}(Z(1 + \phi) - 1)/\phi$
$T = (T_f - T_{O,0})Z(\phi + 1) + T_{O,0}$	$T = (T_{F,0} - T_f)(Z(\phi + 1) - 1)/\phi + T_f$

As equações do balanço de fração mássica e temperatura podem ser reorganizadas de um modo diferente, onde Z passaria a ser uma coordenada (WILLIAMS, 1985). Com esta nova coordenada e com o número de Lewis igual a 1, a Eq. (2.10) de transporte de espécies em um sistema de coordenadas ortogonais à superfície de mistura estequiométrica ficaria:

$$\rho \frac{\partial Y_i}{\partial t} + \rho U_{\perp} \cdot \nabla_{\perp} Y_i = \rho \chi \frac{\partial^2 Y_i}{\partial Z^2} + \nabla_{\perp} \cdot (\rho D \nabla_{\perp} Y_i) - \rho D \nabla_{\perp} (\ln |\nabla Z|) \cdot \nabla_{\perp} Y_i + \dot{\omega}_i \quad (2.16)$$

Onde o subíndice \perp representa a derivada no plano estequiométrico e χ é a taxa de dissipação escalar da fração de mistura Z , Eq. (2.17), que tem a dimensão da inversa do tempo e pode ser interpretada como a inversa do tempo característico de difusão (PETERS, 2000):

$$\chi = D \left(\frac{\partial Z}{\partial x_j} \frac{\partial Z}{\partial x_j} \right) = D |\nabla Z|^2 \quad (2.17)$$

A medida da inversa do tempo característico de difusão é $\tau_{\chi} = \chi^{-1}$. Este tempo mede o gradiente de Z e o fluxo molecular das espécies próximo da chama. Ademais, ele dá uma estimativa da espessura da camada de mistura $\sqrt{D/\chi}$.

Quando as curvaturas das iso-superfícies Z não são muito grandes, os gradientes medidos ao longo das iso-superfícies estequiométricas ficam tão pequenos quanto aqueles na direção perpendicular à direção estequiométrica, podendo ser desprezados. Então, a equação do balanço para a fração mássica se reduz a:

$$\rho \frac{\partial Y_i}{\partial t} = \rho \chi \frac{\partial^2 Y_i}{\partial Z^2} + \dot{\omega}_i. \quad (2.18)$$

Desprezando-se efeitos não estacionários, a derivada temporal é eliminada e, com Lewis igual a 1, a estrutura da chama pode ser totalmente descrita por:

$$\rho \chi \frac{\partial^2 Y_i}{\partial Z^2} + \dot{\omega}_i = 0 \quad \text{e} \quad \rho \chi \frac{\partial^2 T_i}{\partial Z^2} + \dot{\omega}_T = 0. \quad (2.19)$$

A equação acima mostra que a taxa de reação para as espécies químicas é diretamente proporcional à segunda derivada da função $T(Z, \chi)$. Levando em consideração essa hipótese, a chama de difusão é completamente determinada como uma função da fração de mistura Z e da taxa de dissipação escalar χ (ou ∇Z):

$$Y_i = Y_i(Z, \chi), \quad T = T(Z, \chi). \quad (2.20)$$

Expressões para $\chi(Z, T)$ e soluções completas para várias chamas laminares podem ser achadas a partir de desenvolvimentos assintóticos (LIÑAN, 1974; CUENOT; POINSOT, 1996) ou resolvendo a equação 2.17. Uma representação da solução é mostrada na Fig. 2.4.

A combustão difusiva é limitada por dois regimes, um correspondente à mistura dos reagentes e o segundo correspondente à química infinitamente rápida (Fig. 2.4). Quando a química é infinitamente rápida, a temperatura depende da mistura através de Z , mas não da razão de mistura χ (BURKE; SCHUMMAN, 1928). Então, existem relações de descontinuidade para Z e Z_L , para a fração mássica de espécies e para a temperatura. Estas relações estão resumidas na tabela 2.1. A Eq. (2.12) proporciona a máxima temperatura de chama T_F , quando $Y_F = Y_O = 0$ e $Z = Z_{st} = 1/(1 + \phi)$.

$$T_F = \frac{T_{F,0} + T_{O,0}\phi + Y_{F,0} \frac{Q}{C_p}}{1 + \phi}. \quad (2.21)$$

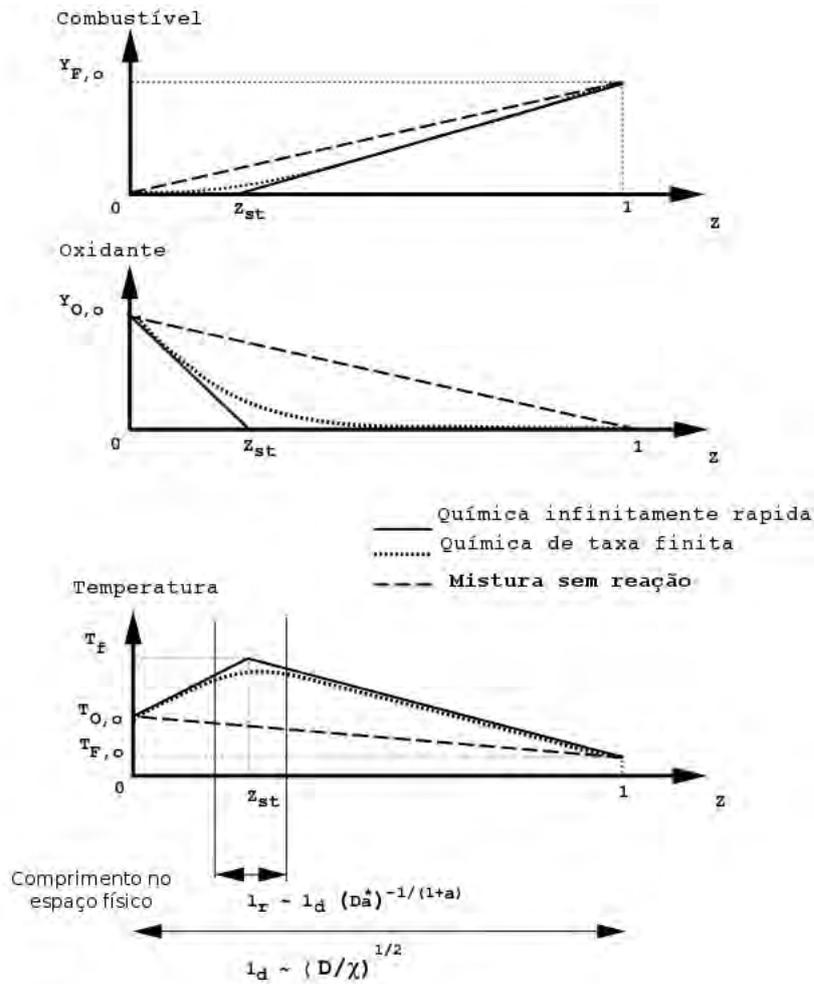


Figura 2.4 - Estrutura interior de chamas não pré-misturadas. A espessura da zona difusiva l_d é estimada a partir da taxa de dissipação escalar χ na superfície estequiométrica onde a espessura característica da zona de reação l_r depende de l_d e o número de Damköhler.

Fonte: Adaptada de Veynante e Vervisch (2002).

Para muitos sistemas de combustão, a hipótese de química infinitamente rápida não pode ser usada de maneira indiscriminada, por exemplo, quando se tem problemas de ignição devido a mistura inadequada entre combustível e oxidante, na vizinhança da linha estequiométrica em chamas de difusão e, em geral quando existem fortes gradientes de velocidade. A descrição da chama não pré-misturada com química infinitamente rápida até o limite de extinção, é de grande importância para a combustão turbulenta. A chama não pré-misturada de contracorrente, esquematizada na Fig. 2.3, tem uma configuração genérica bem estabelecida que ajuda a entender a estrutura da extinção da chama. Esses fenômenos de extinção têm sido teoricamente descritos, utilizando-se um desenvolvimento assintótico, (LIÑAN, 1974; CUENOT;

POINSOT, 1996; KIM; WILLIAMS, 1997). Um tempo difusivo τ_χ :

$$\tau_\chi \approx \chi_{st}^{-1} = (D |\nabla Z|^2)_{Z=Z_{st}}^{-1}, \quad (2.22)$$

e um tempo químico τ_c servem para determinar o número de Damköhler

$$Da^* = (\tau_\chi/\tau_c) \approx (\tau_c \chi_{st})^{-1}. \quad (2.23)$$

A taxa de queima responde a uma variação de Da^* , o que leva à denominada curva “S”, que é mostrada na Fig. 2.5 (WILLIAMS, 1985). Inicialmente, tem-se uma situação onde a química é infinitamente rápida, decrescendo Da^* (incrementando χ), fazendo com que a razão de queima e o transporte através da superfície estequiométrica sejam muito grandes. Isto se produz até que a química não possa se manter com um grande fluxo de calor deixando a taxa de queima. Então ocorre a extinção. O valor do Damköhler, no ponto de extinção Da_q^* , pode ser estimado quantificando a vazão de combustível pela superfície estequiométrica.

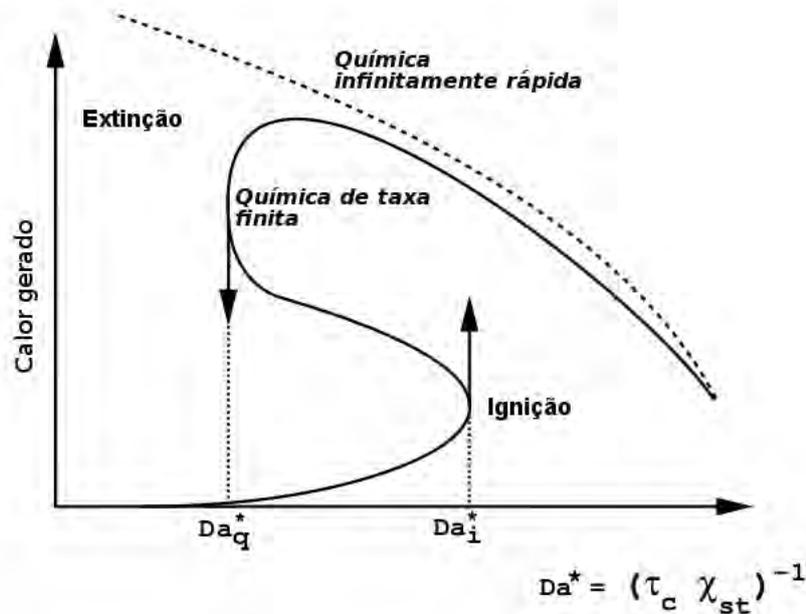


Figura 2.5 - Resposta de calor gerado para uma chama de difusão unidimensional versus número de Damköhler.

Fonte: Adaptada de Veynante e Vervisch (2002).

Existem dois casos limites importantes para modelar combustão turbulenta não pré-misturada: a mistura pura sem combustão ($Da^* \rightarrow 0$) e aquela com química infinitamente rápida ($Da^* \rightarrow \infty$). Estes casos delimitam os domínios onde as chamas podem se desenvolver para planos (Z, Y_F) , (Z, Y_O) e (Z, T) , como mostrado na Fig. 2.4. Ademais, em uma dada localização dentro da chama de difusão, deslocando-se pela superfície estequiométrica normal, $T(Z)$ pode ser construído e caracterizado o regime de combustão (química rápida ou lenta conforme a Fig. 2.4). Muitos modelos de combustão turbulenta são baseados nesta descrição de chama de difusão. Quando o escoamento é turbulento, $T(Z)$ é substituído pela temperatura média calculada para um determinado valor de Z , por exemplo para um determinado estado na mistura entre combustível e oxidante.

2.4 Análise Direta Para Chamas de Difusão Turbulentas

Uma primeira aproximação para descrever a combustão turbulenta se discute nesta seção. O simples formalismo, baseado na expansão em série de Taylor, ilustra a grande dificuldade do caráter não linear das fontes químicas.

Consideremos a Eq. (2.4) onde a taxa de reação em massa do combustível $\dot{\omega}_F$ é expressa pela lei de Arrhenius, como:

$$\dot{\omega}_F = -A\rho^2 T^\beta Y_F Y_O \exp\left(-\frac{T_A}{T}\right), \quad (2.24)$$

sendo A uma constante, T_A a temperatura de ativação e β um parâmetro empírico determinado mediante tabelas (TURNES, 2006). Como a taxa de reação é altamente não linear, a taxa de reação média $\overline{\dot{\omega}_F}$ não pode ser facilmente expressa como uma função das frações mássicas médias \tilde{Y}_F e \tilde{Y}_O , da densidade média $\tilde{\rho}$ e da temperatura média \tilde{T} . A primeira ideia simples é expandir a expressão em série de Taylor:

$$\exp\left(-\frac{T_A}{T}\right) = \exp\left(-\frac{T_A}{\tilde{T}}\right) \left(1 + \sum_{n=1}^{+\infty} P_n \frac{T''^n}{\tilde{T}^n}\right), \quad (2.25)$$

$$T^\beta = \tilde{T}^\beta \left(1 + \sum_{n=1}^{+\infty} Q_n \frac{T''^n}{\tilde{T}^n}\right). \quad (2.26)$$

Onde P_n e Q_n são dados por:

$$P_n = \sum_{k=1}^n \frac{(n+1)!}{(n-k)![(k-1)!]^2} \left(\frac{T_A}{\bar{T}}\right)^k, \quad (2.27)$$

$$Q_n = \frac{\beta(\beta+1)\dots(\beta+n-1)}{n!}.$$

A taxa de reação média, $\overline{\dot{\omega}_F}$ é (VILLASEÑOR; PITZ, 1991):

$$\begin{aligned} \overline{\dot{\omega}_F} = & -A\bar{\rho}^2\tilde{T}^\beta\tilde{Y}_F\tilde{Y}_O\exp\left(-\frac{T_A}{\bar{T}}\right) \\ & \left[1 + \frac{\widetilde{Y_F''Y_O''}}{\widetilde{Y_FY_O}} + (P_1 + Q_1) \left(\frac{\widetilde{Y_F''T''}}{\widetilde{Y_F\bar{T}}} + \frac{\widetilde{Y_O''T''}}{\widetilde{Y_O\bar{T}}}\right) \right. \\ & \left. + (P_2 + Q_2 + P_1Q_1) \left(\frac{\widetilde{Y_F''T''^2}}{\widetilde{Y_F\bar{T}^2}} + \frac{\widetilde{Y_O''T''^2}}{\widetilde{Y_O\bar{T}^2}}\right) + \dots\right]. \end{aligned} \quad (2.28)$$

A Eq. (2.28) leva a outras dificuldades pois, novas quantidades tais como os termos $\widetilde{Y_F''T''^n}$ que vêm dos termos de segunda ordem da série de Taylor, têm que ser fechadas usando equações algébricas ou de transporte. Também, por causa da não linearidade, comete-se erros graves quando levamos em consideração só alguns dos termos da série de Taylor. A expressão 2.28 é complicada e válida unicamente para reações simples irreversíveis, mas não pode ser estendida a esquemas químicos realísticos, como para os mecanismos cinéticos com várias espécies e reações. Por esta razão, na taxa de reação em combustão turbulenta, a equação 2.28 não é levada em consideração. Modelos que são obtidos a partir de análises físicas são os que vão fazer esta tarefa, como será visto adiante.

2.5 Escalas e Diagramas Para Combustão Turbulenta

2.5.1 Introdução

Como a taxa de reação média $\overline{\dot{\omega}}$ não pode ser encontrada a partir de uma lei média de Arrhenius, uma aproximação física é necessária para determinar o modelo para combustão turbulenta. A combustão turbulenta compreende várias escalas de comprimento, velocidade e tempo que descrevem o campo do escoamento turbulento e as reações químicas. A análise física é principalmente baseada na comparação dessas escalas.

O escoamento turbulento é caracterizado pelo número de Reynolds turbulento, que compara transporte turbulento com forças viscosas:

$$Re_t = \frac{u_{rms} l_t}{\nu_t}. \quad (2.29)$$

Onde u_{rms} é velocidade rms média (relacionada com a raiz quadrada da energia cinética turbulenta k), l_t é o comprimento da escala integral turbulenta e ν_t a viscosidade cinemática do escoamento.

O número de Damkhöler relaciona o tempo turbulento característico das escalas integrais τ_t com o tempo químico característico, τ_c .

$$Da = \frac{\tau_t}{\tau_c}. \quad (2.30)$$

No limite de números elevados de Damkohler ($Da \gg 1$), o tempo químico é pequeno em comparação com o turbulento, o que corresponde a uma zona de reação fina deformada e convectada pelo campo de escoamento. A estrutura interna da chama não é fortemente afetada pela turbulência, podendo ser descrita como um elemento de chama laminar, chamado “flamelet”. A estrutura turbulenta enruga e estica a chama. Por outro lado, um número de Damkohler baixo ($Da \ll 1$) corresponde a uma reação química lenta. Reagentes e produtos são misturados por estruturas turbulentas antes da reação. Neste limite do reator perfeitamente misturado, a taxa de reação média pode ser expressa a partir de leis de Arrhenius, usando frações mássicas médias e temperaturas médias, correspondentes ao primeiro termo da expansão da série de Taylor (Eq. (2.28)).

2.5.2 O Conceito de Flamelet

O conceito de flamelet para a combustão turbulenta é utilizado quando a reação é rápida em comparação com a mistura no nível molecular. Para este regime, a parte química da chama e a parte turbulenta são tratadas de um modo separado. O conceito de flamelet usa uma aproximação da solução de Burke-Schumann para o número de Damköhler elevado e o para mecanismo global. Flamelets relacionam a taxa de dissipação escalar que aparece nas equações com os efeitos causados pela difusão e pela convecção. Esta taxa é maior nas escalas menores. No entanto suas flutuações são governadas principalmente pelas grandes escalas, as quais podem ser resolvidas usando o modelo SGE. O modelo de flamelet é abordado nos trabalhos de Peters (1984), Williams (1985), Peters (1997), Pitsch e Peters (1998) e Peters (2000).

Em muitas aplicações de combustão turbulenta pré-misturada, o tempo turbulento e suas escalas espaciais são grandes, se comparados com o tempo químico e suas escalas espaciais (BRAY et al., 1980). Isso resulta em uma reação química, confinada geralmente para uma superfície de propagação delgada com espessura entre 0.1 mm e 1 mm. A mistura reativa tende a ser composta de reagentes não queimados e produtos queimados separados por uma interface delgada de reação, denominada flamelet, que preserva sua estrutura laminar localmente.

Assumir a hipótese de flamelets resulta em modelar um problema de combustão completo para um problema de dois fluidos de forma mais tratável. Ou seja, o tratamento é reduzido a uma descrição das variáveis do escoamento dos gases frescos e queimados, do movimento e da dinâmica de superfície de chama e a taxa de queima local. Outras simplificações podem ser feitas levando em conta a hipótese de que a estrutura local da interface reativa é uma chama curva laminar enrugada. Nesta situação, a taxa local de consumo de reagentes pode ser aproximada por uma chama tipo plana. Isto desacopla os efeitos químicos dos efeitos turbulentos. Os efeitos químicos modificam a velocidade laminar de chama local, que pode ser calculada de um modo independente (CANT; BRAY, 1989). Os efeitos iniciais da turbulência são de enrugamento e esticamento dos flamelets. Damköhler (1947) foi o primeiro a sugerir que o enrugamento da chama é o principal mecanismo que controla as chamas turbulentas, além de apresentar expressões teóricas para a velocidade de queima turbulenta (PETERS, 2000).

Na figura 2.6, é mostrado um esquema da frente de chama turbulenta pré-misturada movimentando-se localmente a uma velocidade de chama s_L . A velocidade de chama turbulenta é definida como a velocidade que uma chama plana deveria ter, se o movimento fosse da ordem com que os gases frescos são consumidos.

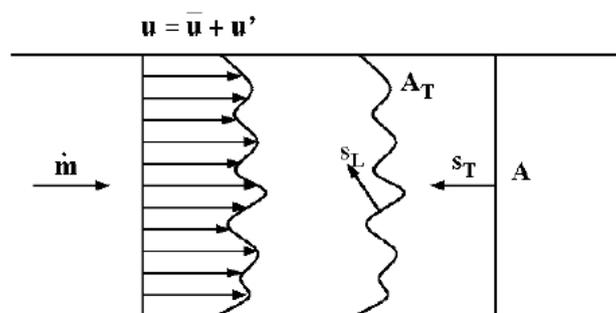


Figura 2.6 - Idealização de uma chama laminar pré-misturada num canal.

Por conservação de massa \dot{m} , temos:

$$\dot{m} = \rho_u s_L A_T = \overline{\rho_u} s_T A. \quad (2.31)$$

Onde $\overline{\rho_u}$ é a densidade média da mistura não queimada, A é a área da seção do canal, A_T é a área de superfície da chama total. Ignorando flutuações na densidade, o incremento na velocidade de chama turbulenta (s_T), comparado à velocidade de chama laminar (s_L), é uma consequência do incremento na superfície total A_T que resulta de um alta taxa no consumo de combustível para a mesma seção de área, A . A relação entre s_T e s_L pode ser expressada como:

$$\frac{s_L}{s_T} = \frac{A_T}{A} = \Xi. \quad (2.32)$$

Onde Ξ corresponde ao fator de enrugamento da frente de chama para uma superfície de chama, dividida pela sua projeção na direção média de propagação (POINSOT; VEYNANTE, 1997). O enrugamento dependeria do número de Reynolds turbulento e da velocidade de flutuação dos gases frescos, u'_f .

Em modelos de combustão, quando o modelo de flamelet é aplicado a uma chama não pré-misturada, considera-se que, as difusividades molares, mássica e térmica, são todas iguais para números de Lewis iguais a unidade, onde a difusividade é definida como

$$\mathcal{D} = \frac{K}{\rho C_p}, \quad (2.33)$$

onde K é a condutividade térmica.

Esta hipótese dá melhores resultados em chamas de hidrocarbonetos (PETERS, 1992).

2.5.3 Diagramas de Chamas de Combustão Pré-misturadas

Diagramas de regimes de combustão podem ser elaborados fazendo-se análises dos regimes de combustão turbulenta pré-misturada e comparando escalas de tempo, escalas de comprimento característico e escalas químicas. Esta análise leva a diagramas de combustão onde vários regimes são apresentados como função dos vários números adimensionais (BRAY, 1980; BORGHI, 1998b; BORGHI; DESTRIAU, 1998; WILLIAMS,

1985; PETERS, 1986; PETERS, 1999). Estes diagramas podem dar suporte à seleção e desenvolvimento de modelos de combustão que são relevantes para uma dada situação. Uma descrição proposta por Borghi e Destriau (1998) e Peters (2000), que combina essas análises, é apresentado na Fig. 2.7. O diagrama proposto é construído com l_t/δ_l na abscisa e a razão u'/s_L na ordenada, em uma escala log-log, onde δ_l é a espessura de chama laminar.

Para chamas pré-misturadas turbulentas, a escala de tempo químico τ_c , pode ser estimada como a razão entre a espessura de chama laminar δ_l e a velocidade de propagação da chama laminar s_L . Estimando-se a escala de tempo integral turbulenta ($\tau_t = l_t/u'$), o número Damkohler torna-se:

$$Da = \frac{\tau_t}{\tau_c} = \frac{l_t s_L}{\delta_l u'}, \quad (2.34)$$

sendo evidenciadas as razões de velocidade (u'/s_L) e de escalas de comprimento (l_t/δ_l)

2.5.4 Regimes de Combustão

Para grandes valores do número de Damkohler ($Da \gg 1$), a frente de chama é fina. Sua estrutura interna não é afetada por movimentos turbulentos, que apenas enrugam a superfície da chama. Este regime de flamelet, ou regime de chama fina enrugada, é mostrado na Fig. 2.8 e ocorre quando as escalas menores da turbulência (ou seja, as escalas de Kolmogorov) têm um período turbulento τ_k maior do que τ_c (movimentos turbulentos são lentos demais para afetar a estrutura da chama). Esta transição é descrita em termos do número de Karlovitz Ka , que relaciona os tempos característicos químicos com o da escala de Kolmogorov:

$$Ka = \frac{\tau_c}{\tau_k} = \frac{\delta_l u_k}{l_k s_L}. \quad (2.35)$$

O comprimento de l_k e a velocidade u_k das estruturas de Kolmogorov são dados por Roberts et al. (1993):

$$l_k = \left(\frac{\nu_t^3}{\epsilon^4} \right)^{1/4}; \quad u_k = (\nu_t \epsilon)^{1/4}. \quad (2.36)$$

Onde ϵ é a dissipação da energia cinética turbulenta k .

A escala integral l_t pode ser escrita:

$$l_t = \left(\frac{u_{rms}^3}{\epsilon} \right). \quad (2.37)$$

Utilizando-se $\nu_t = \delta_l s_L$, que corresponde ao valor de um, para o número de Reynolds de chama dado por:

$$Re_f = \frac{\delta_l s_L}{\nu_t} \approx 1, \quad (2.38)$$

o número de Karlovitz ficaria:

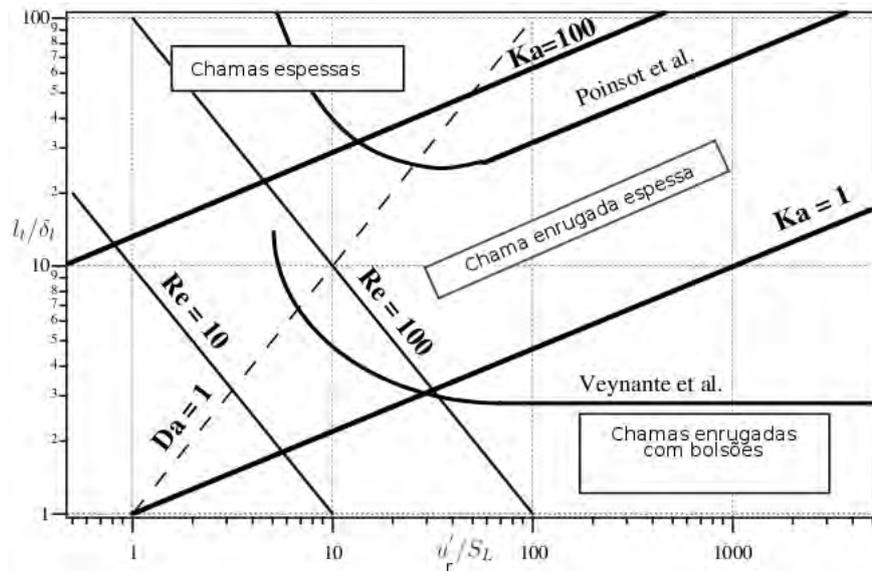


Figura 2.7 - Diagrama de regime de combustão em chama de pré-mistura.

Fonte: Adaptada de Veynante e Vervisch (2002).

$$Ka = \left(\frac{u_{rms}}{s_L} \right)^{3/2} \left(\frac{l_t}{\delta_l} \right)^{-1/2}. \quad (2.39)$$

Então, os números de Reynolds, Damköhler e Karlovitz são relacionados pela seguinte igualdade:

$$Re = Da^2 Ka^2. \quad (2.40)$$

Um conjunto de dois parâmetros é necessário para determinar um regime de combustão no caso de chamas de pré-mistura, (Re, Da) , (Re, Ka) ou (Da, Ka) .

O número de Karlovitz também compara a espessura de chama e a escala de comprimento de Kolmogorov:

$$Ka = \left(\frac{\delta_l}{l_k} \right)^2. \quad (2.41)$$

O número de Karlovitz é usado para definir o critério Klimov-Williams, correspondendo a $Ka = 1$, que define dois regimes de combustão. Este critério foi primeiro interpretado como a transição entre o regime de flamalet ($Ka < 1$), descrito previamente, e regime de combustão distribuído, onde a estrutura interior da chama é fortemente modificada por movimentos de turbulência. Uma análise padrão (PETERS, 1999) mostrou que, para números de Karlovitz maiores que a unidade ($Ka > 1$), os movimentos turbulentos se tornam capazes de afetar a estrutura interior da chama, mas não necessariamente a zona de reação. Esta zona de reação, onde o calor é liberado, tem uma espessura δ_r bastante inferior à espessura térmica da chama δ_l ($\delta_r \approx 0.1\delta_l$). O número Karlovitz, com base nesta espessura de reação é:

$$Ka_r = \left(\frac{\delta_r}{l_k} \right)^2 = \left(\frac{\delta_r}{\delta_l} \right)^2 \left(\frac{\delta_l}{l_k} \right)^2 \approx \frac{1}{100} \approx \left(\frac{\delta_l}{l_k} \right)^2 \approx \frac{Ka}{100}. \quad (2.42)$$

Então, os seguintes regimes de chama turbulenta pré-misturadas são propostas:

- $Ka < 1$: regime flamalet ou em regime de chama fina enrugada, Fig. 2.8(a). Duas subdivisões podem ser propostas dependendo da relação da velocidade u'_r/s_L :
 - $u'_r/s_L < 1$: chama enrugada. u'_r é a velocidade de rotação dos movimentos maiores de turbulência. As estruturas turbulentas são incapazes de enrugar a superfície da chama externa com as interações da frente da chama. A propagação laminar é predominante e as interações entre turbulência e combustão permanecem limitadas.
 - $u'_r/s_L > 1$: chama enrugada com bolsões (chamas onduladas). Nesta

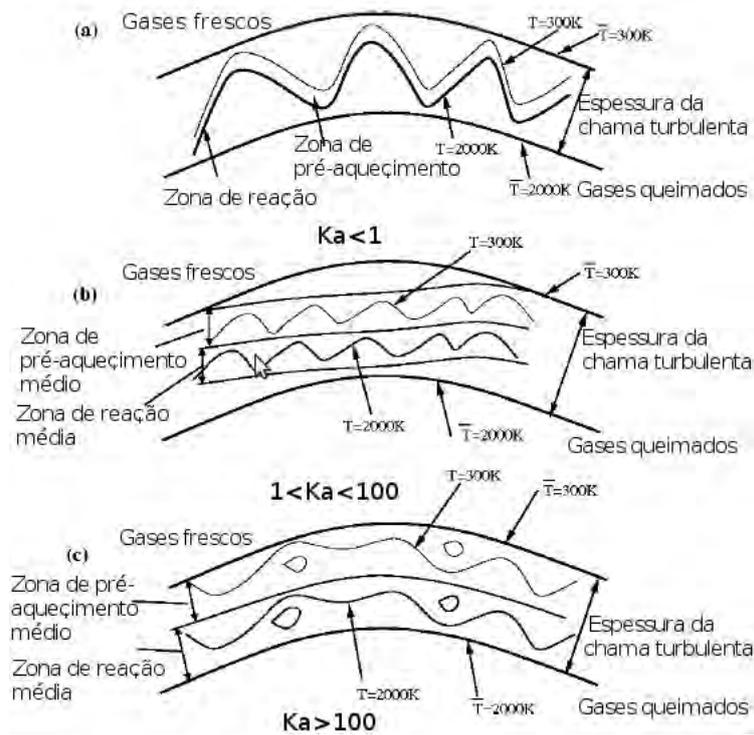


Figura 2.8 - Estrutura interior das chamas pré-misturadas identificadas por Borghi e Des-
triau (1998).

situação, estruturas maiores se tornam capazes de induzir interações da frente de chama que levam à formação de bolsões.

- $1 < Ka < 100$ ($Ka_r < 1$): Regime de chama espessada enrugada ou zona de reação fina. Neste caso, os movimentos de turbulência são capazes de afetar e engrossar a zona de preaquecimento, mas não podem modificar a zona de reação que permanece fina e mais próxima a uma zona de reação laminar Fig. 2.8(b).
- $Ka > 100$ ($Ka_r > 1$): Regime de chama espessada ou reator bem misturado. Nesta situação, o preaquecimento e zonas de reação são fortemente afetados por movimentos turbulentos e nenhuma estrutura de chama laminar pode ser identificada, como se mostra na Fig.2.8 (c).

Estes regimes são geralmente apresentados em um diagrama logarítmico (u'_r/s_L ; l_t/δ_l), semelhante ao apresentado na Fig. 2.7.

O critério Klimov-Williams ($Ka = 1$) corresponde a uma espessura de chama δ_l igual à escala de Kolmogorov l_k . Abaixo desta linha, a chama é mais fina que qual-

quer escala turbulenta. Abaixo da linha que delimita o critério de Peters ($Ka = 100$ ou $Ka_r = 1$), a espessura da zona de reação δ_r , é mais fina do que qualquer escala turbulenta e não é afetada por movimentos turbulentos (o critério é traçado assumindo-se $\delta_r \approx 0,1\delta_l$).

Duas curvas no diagrama da Fig. 2.7 são mostradas, a primeira mostra o limite para regime de flamelet concebido por Poinso et al. (1991) a partir de simulações numéricas diretas. Ela é apresentada na parte superior do diagrama. A segunda curva mostra o critério proposto por Veynante et al. (1997) para distinguir entre gradiente (acima da curva) e contra gradiente de transporte turbulento (abaixo da curva) o qual é exibido na parte inferior do diagrama. O critério assume um fator de liberação de calor $\kappa = T_b/T_u - 1 = 6$, onde T_u e T_b são, respectivamente, a temperatura dos gases frescos e queimados.

2.5.5 Diagramas de Chamas de Combustão Não Pré-misturadas

Duas variáveis têm sido utilizadas para identificar os regimes de combustão pré-misturada, a velocidade e um comprimento característico. O problema é mais difícil na combustão não pré-misturada turbulenta porque chamas de difusão não se propagam e, portanto, não exibem velocidade intrínseca característica. Além disso, a espessura da chama depende da aerodinâmica que controla a espessura das camadas de locais de mistura, entre o combustível e o oxidante. Nenhuma escala de comprimento fixo de referência pode ser facilmente identificada para chamas de difusão. Esta dificuldade é bem ilustrada na literatura, onde várias escalas características diferentes foram propostas para diferentes autores (BILGER, 1988; BORGHI, 1988; BRAY; PETERS, 1994; LEE, 1994; CUENOT; POINSOT, 1994; COOK; RILEY, 1996). A classificação de chamas não pré-misturadas turbulentas pode ser organizada em três grandes grupos:

- O regime de fluxo turbulento é caracterizado pelo número de Reynolds, ao passo que o número de Damkohler é escolhido para a zona de reação (LIBBY; WILLIAMS, 1994).
- A fração de mistura também descreve a mistura turbulenta usando a taxa média da flutuação da fração de mistura \tilde{Z}''^2 , enquanto que número de Damköhler caracteriza o tipo de chama (BRAY; PETERS, 1994).
- Uma relação de velocidades (intensidade de turbulência e velocidade de chama) e uma relação de comprimentos (escala integral e espessura de chama) podem ser construídas (BORGHI, 1988) para delinear os regimes.

Outros comprimentos adicionais também são introduzidos, como por exemplo, espessuras de perfis no espaço da fração de mistura (BILGER, 1988).

Uma chama de difusão laminar é totalmente determinada a partir do número de Damköhler $Da^*=(\tau_c/\chi_{st})^{-1}$, onde o valor do tempo químico τ_c depende da química do combustível (LIÑAN, 1974). Para este número, a taxa de dissipação escalar sob condição estequiométrica

$$(Z = Z_{st}), \text{ com } \chi_{st} = D\nabla|Z|_{st}^2, \quad (2.43)$$

é medida simultaneamente por um tempo mecânico, $\tau_\chi = (\chi)_{st}^{-1}$ e pelo comprimento característico da mistura, $l_d=(D/\chi_{st})^{1/2}$. De acordo com a expansão assintótica (LIÑAN, 1974), a espessura da zona de reação é da ordem de $l_r \approx l_d(Da^*)^{-1/(a+1)}$, onde a é da ordem de uma reação global de um passo. Como chamas de difusão não possuem um comprimento de referência fixo, a principal dificuldade surge quando os efeitos da instabilidade precisam ser quantificados. Em uma chama laminar estacionária, a taxa da deformação local está diretamente relacionada com χ_{st} (para uma dada espessura de chama), no entanto, quando os campos da velocidade flutuam, a instabilidade na chama de difusão se desenvolve em dois níveis (CUENOT et al., 2000):

- O campo da fração de mistura Z não responde imediatamente às flutuações da velocidade, levando a uma distribuição de χ_{st} para uma dada taxa de deformação. Por existir uma forte correlação entre χ_{st} e o gradiente de velocidade tomado ao longo da linha estequiométrica (MAHALINGAM et al., 1995), estes efeitos não são dominantes quando ocorre química de taxa finita.
- Para química de taxa finita, a taxa de queima não segue variações de χ_{st} imediatamente, levando a um segundo nível de instabilidade e modificando a taxa de queima de acordo com a Eq. (2.44)

$$u'_v \rightarrow \text{mistura não estacionaria} \rightarrow \chi_{st} \quad (2.44)$$

$$\chi_{st} \rightarrow [\dot{\omega}_i \text{ taxa de queima não estacionaria (para } Da^* < \infty)]$$

Representar todos esses efeitos num diagrama genérico é uma tarefa muito complexa. Um diagrama associando tais efeitos para chamas laminares foi apresentado por

Cuenot e Poinson a partir de resultados obtidos com simulação SND para interação chama/vórtices (CUENOT; POINSOT, 1994).

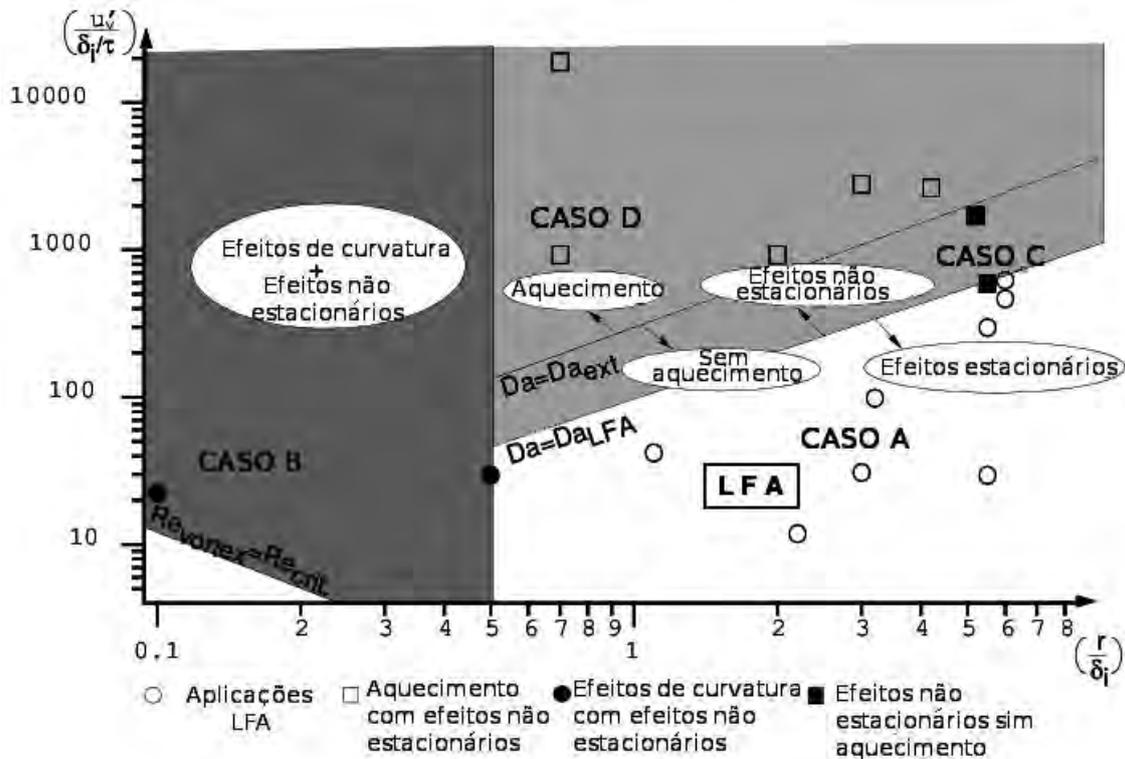


Figura 2.9 - Diagrama de regime de combustão turbulenta em chama não pré-misturada. Fonte: Adaptada de Veynante e Vervisch (2002).

No diagrama apresentado na Fig. 2.9, a espessura da chama é $\delta_i \approx l_d$, onde r e u'_v são o comprimento característico e a velocidade do vórtice respectivamente. Esta análise conduz a dois limites para o número de Damköhler, Da_{LFA} e Da_{ext} . Onde o subscrito LFA correspondem às siglas do inglês *Laminar Flamelet Assumption*, ou seja assumindo flamelets laminares. Quando Da^* é maior do que Da_{LFA} , a frente de chama pode ser vista como um elemento de chama laminar estacionária e sua estrutura interna não é afetada pelos vórtices. Por outro lado, quando $Da^* < Da_{ext}$, ocorre a extinção da chama. Em uma faixa intermediária, para números de Damköhler que vão de Da_{ext} a Da_{LFA} , fortes efeitos estacionários são observados. Em uma chama turbulenta não pré-misturada, a zona de reação se desenvolve dentro de uma zona de mistura média, onde a espessura l_z é da ordem do comprimento da escala integral l_t , como mostrado na Fig. 2.10:

$$l_z \approx |\nabla \tilde{Z}|^{-1} \approx l_t \approx \left(\frac{k^{3/2}}{\epsilon} \right). \quad (2.45)$$

As pequenas escalas de mistura turbulenta dependem principalmente das flutuações da velocidade que transportam as iso-superfícies de Z (misturadoras) e da difusão entre essas iso-superfícies, que compõem a camada de mistura de espessura l_d :

$$l_d \approx \left(\frac{D}{\tilde{\chi}_{st}} \right)^{1/2}, \quad (2.46)$$

sendo $\tilde{\chi}_{st}$ o valor condicional da taxa de dissipação escalar χ para $Z = Z_{st}$.

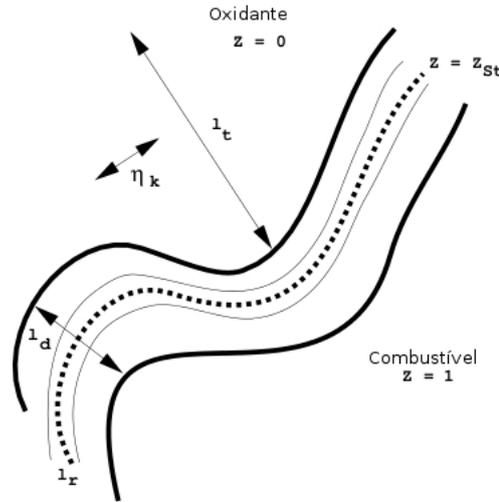


Figura 2.10 - Estrutura de chama turbulenta não pré-misturada. Z representa a fração de mistura, l_d a espessura difusiva, l_r a espessura da zona de reação, l_t o comprimento da escala integral turbulenta e η_k a micro escala de Kolmogorov. Fonte: Adaptada de Veynante e Vervisch (2002).

Quando o transporte de espécies e calor resultante da flutuação de velocidade é tão rápido quanto a transferência por difusão da chama, o início de um flamelet laminar é esperado. Também, quando a escala de Kolmogorov l_k é da ordem da espessura da chama, a estrutura da zona de reação pode ser modificada pela turbulência. Como as escalas de chamas de difusão dependem fortemente do movimento do escoamento

localmente, pode-se escrever:

$$l_d \approx \alpha_1 l_k \text{ e } \widetilde{\chi}_{st} \approx \frac{\alpha_2}{\tau_k}. \quad (2.47)$$

Onde $\alpha_1 \geq 1$ e $\alpha_2 \leq 1$ (a máxima taxa do esforço local deveria corresponder a $l_d = l_k$).

Então, utilizando $\tau_t/\tau_k = \sqrt{Re}$, o número de Damköhler que compara escalas turbulentas com as escalas químicas da chama se escreveria como:

$$Da = \frac{\tau_t}{\tau_c} = \frac{\tau_t}{\tau_k} \frac{\tau_k}{\tau_c} \approx \frac{\tau_t}{\tau_k} \frac{\alpha_2}{\widetilde{\chi}_{st} \tau_c} \approx \alpha_2 \sqrt{Re} Da^*. \quad (2.48)$$

Números de Damköhler constantes correspondem à linhas com inclinação 1/2 no gráfico log-log (Da, Re). Quando a química é suficientemente rápida (Grandes valores do número de Da), a chama tem a estrutura de chama laminar. Esta condição pode ser simplesmente expressa como $Da^* \geq Da_{LFA}$. De outro lado, para grandes tempos químicos $Da^* \leq Da_{ext}$, ocorre a extinção. Chamas laminares são encontradas para baixos números de Reynolds ($Re < 1$). A Fig. 2.11 apresenta o resumo de todos esses resultados.

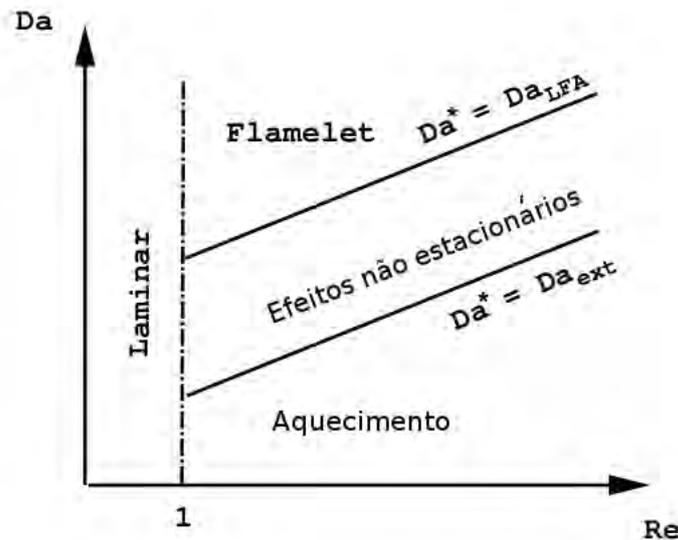


Figura 2.11 - Diagrama de regime de combustão em chama não pré-misturada como função do número de Damkhöler Da e o número de Reynolds turbulento Re .

Fonte: Adaptada de Veynante e Vervisch (2002).

2.5.6 Conclusões

Muitos dos temas discutidos neste capítulo serão utilizados nos estudos apresentados nos próximos capítulos. O modelo de pré-mistura utilizado para o presente trabalho utilizará um modelo de combustão para chamas tipo flamelet, como mostrado na Fig. 2.8(a). Nos diagramas para chamas pré-misturadas apresentados na Fig. 2.7, pode-se estabelecer em que zona o modelo está sendo empregado. Da mesma forma, para a segunda simulação, que corresponde a uma chama não pré-misturada, os adimensionais são utilizados como principais identificadores da zona onde são empregados os modelos.

3 FORMULAÇÃO

Neste capítulo, apresentam-se as equações de conservação e os modelos de aproximação de grandes escalas utilizados. As equações de conservação para o movimento de um fluido compressível, não estacionário, reativo, multi espécies, em termos da conservação de massa, quantidade de movimento, conservação de energia e das N espécies químicas são:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i}{\partial x_i} = 0, \quad (3.1)$$

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} [\rho u_i u_j + p \delta_{ij} - \tau_{ij}] + F_i = 0, \quad (3.2)$$

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} [(\rho E + p) u_i + q_i - u_j \tau_{ij}] + u_j F_j = 0, \quad (3.3)$$

$$\frac{\partial \rho Y_m}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} [\rho Y_m (u_i + V_{i,m})] = \dot{w}_m, \quad \text{Onde } m = 1, N. \quad (3.4)$$

Sendo u_i a componente da velocidade na direção x_i , ρ a densidade, p a pressão, Y_m a fração em massa da espécie m , $V_{i,m}$ a velocidade de difusão da espécie m na direção i , $E = e + \frac{1}{2}(u_k u_k)$ a energia total por unidade de massa e τ_{ij} o tensor viscoso, definido como:

$$\tau_{ij} = \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \mu \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij}. \quad (3.5)$$

Onde δ_{ij} é a função delta de Kronecker, ($\delta_{ij} = 0$ se $i \neq j$ e $\delta_{ij} = 1$ se $i = j$). Também, e representa a energia interna por unidade de massa. Assim:

$$e = \sum_{m=1}^N Y_m h_m - \frac{p}{\rho}. \quad (3.6)$$

Onde h_m é a entalpia da espécie m por unidade de massa dada por:

$$h_m(T) = \Delta h_{f,m}^0 + \int_{T_0}^T C_{p,m}(T')dT'. \quad (3.7)$$

Na equação acima, $\Delta h_{f,m}^0$ representa a entalpia de formação por unidade de massa da espécie m na temperatura de referência T^0 , $C_{p,m}$ é o calor específico à pressão constante. F_i representa a força de volume na direção i e $u_j F_j$ o trabalho realizado por estas forças de volume.

Retornando à equação (3.4), \dot{w}_m é a taxa de reação por unidade de massa por unidade de volume da espécie m :

$$\dot{w}_m = MW_m \sum_{k=1}^L (\nu''_{mk} - \nu'_{mk}) A_k T^{\beta_k} e^{(-E_{a,k}/R_u T)} \prod_{n=1}^N \left(\frac{X_n P}{R_u T} \right)^{\nu'_{nk}}, \quad m = 1, N, \quad (3.8)$$

onde L é o número de reações químicas dos mecanismos considerados, N é o número de espécies, MW_m é a massa molecular da espécie, m , e ν'_{mk} e ν''_{mk} são, respectivamente, os coeficientes estequiométricos da m -ésima espécie para a k -ésima reação química do produtos e reagentes respectivamente. A_k , β_k e $E_{a,k}$ são o coeficiente de Arrhenius, o expoente de temperatura e a energia de ativação da k -ésima reação química, respectivamente. T é a temperatura, R_u a constante universal do gases e X_m é a fração molar.

O vetor de fluxo na Eq. (3.3) contém a condução de calor (I), a difusão de calor devido à difusão de espécies (II), o fluxo de calor de Dufour e o fluxo de calor por radiação, que para este trabalho são desprezados:

$$q_i = \underbrace{-K \frac{\partial T}{\partial x_i}}_I + \rho \underbrace{\sum_{m=1}^N h_m Y_m V_{im}}_{II}, \quad (3.9)$$

onde $K = \bar{C}_p \mu / Pr$ é a condutividade térmica média, $\bar{C}_p = \sum_{m=1}^N Y_m C_{p,m}$ é o calor específico médio da mistura à pressão constante e Pr é o número de Prandtl da mistura.

A pressão p é diretamente calculada da equação de estado para gases perfeitos:

$$p = \rho RT = \rho \frac{R_u}{MW_{mix}} T = \rho R_u T \sum_{m=1}^N \frac{Y_m}{MW_m}. \quad (3.10)$$

Pela lei de Fick determina-se a velocidade de difusão de espécies:

$$V_{im} = -\frac{\mathcal{D}_m}{Y_m} \frac{\partial Y_m}{\partial x_i}. \quad (3.11)$$

Onde \mathcal{D}_m é o coeficiente de difusão molecular. Gradientes de temperatura e pressão podem produzir difusão de espécies (efeitos de Soret e Dufour, respectivamente), mas estes efeitos são desprezados.

A viscosidade é determinada usando a lei de Sutherland:

$$\frac{\mu}{\mu_0} = \frac{\left(\frac{T}{T^0}\right)^{3/2}}{\frac{T_s+T}{T^0}}. \quad (3.12)$$

Onde μ_0 é a viscosidade de referencia em T^0 e $T_s = 110,4$ K.

Finalmente, a conservação da massa total requer que:

$$\sum_{m=1}^N Y_m = 1, \quad (3.13)$$

$$\sum_{m=1}^N V_{im} = 0, \quad i = 1, 2, 3. \quad (3.14)$$

3.1 Formulação para o Filtro SGE

A primeira formulação para SGE foi apresentada por Smagorinsky (1963). Melhorias importantes no método foram introduzidas por Germano et al. (1990), Moin et al. (1991), Erlebacher et al. (1992) e Menon (1992). A separação entre grandes e pequenas escalas é determinada pelo tamanho da grade (Δ). Além disto, as equações de Navier-Stokes tem que ser filtradas com relação ao tamanho da grade para se obter as equações de conservação em SGE. Um filtro adequado com médias de Favre (apropriado para esquemas em volumes finitos) será empregado para obter as equações SGE.

Assim, qualquer variável f é decomposta em uma quantidade resolvida \tilde{f} e uma não resolvida f'' tal que $f = \tilde{f} + f''$. Maiores detalhes do filtro SGE e as metodologias são dados por Ghosal (GHOSAL, 1993) e Pope (POPE, 2000). O filtro de Favre representado pelo símbolo \tilde{f} é definido, para qualquer variável f por:

$$\tilde{f} = \frac{\overline{\rho f}}{\bar{\rho}}. \quad (3.15)$$

Onde a sobre barra representa o filtro espacial definido como:

$$\overline{f(\mathbf{x}, t)} = \int_D f(\mathbf{x}', t) G_f(\mathbf{x}, \mathbf{x}') d\mathbf{x}'. \quad (3.16)$$

Onde D é o contorno ou fronteira do domínio computacional, \mathbf{x} é o vector posição e G_f é a função filtro por unidade de volume, definida como:

$$G_f(\mathbf{x} - \mathbf{x}') = \begin{cases} \frac{1}{\Delta} & \text{if } |\vec{\mathbf{x}} - \vec{\mathbf{x}}'| < \frac{\Delta}{2}, \\ 0 & \text{qualquer outra opção} \end{cases} \quad (3.17)$$

3.2 Formulação para Chama Pré-misturada

Em combustão a turbulência enrugam e estira a chama. Isto incrementa a área da chama e a velocidade efetiva de chama. Geralmente as grandes escalas turbulentas enrugam a forma da chama, sendo que as pequenas escalas turbulentas, se são tão pequenas quanto a espessura da chama, podem penetrar na chama e mudar a sua estrutura.

Para conseguir reproduzir os efeitos de turbulência e combustão de escoamentos reativos, as equações de conservação são filtradas de um modo diferente, seguindo a frente de chama. Por tanto é necessário definir uma variável que distinga regiões de gases frescos e regiões de gases queimados. Esse equacionamento foi formulado por Weller (1993), Tabor e Weller (2004)

A variável de avanço c é uma simplificação pragmática da representação química. A estrutura da frente de chama não é mais descrita em termos de espécies, passando a ser agora uma única variável que identifica a presença de gases frescos e queimados. Esta aproximação é normalmente bem adaptada para combustão pré-misturada perfeitamente adiabática, mas pode ser estendida a casos mais gerais.

3.2.1 Definições Preliminares

Chamas pré-misturadas turbulentas são geralmente muito delgadas, com uma espessura de chama que varia numa faixa de $\delta_L = 0,1$ mm até 1,0 mm. Em muitos casos essa espessura é menor o igual ao tamanho do filtro Δ .

Em chamas de pré-mistura uma onda de reação se propaga dos gases queimados em direção aos gases frescos. A variável de avanço c que identifica esta propagação toma valores entre 0 para gases frescos e 1 para gases queimados. A transição entre esses valores descreve a frente de chama. A variável de avanço c pode ser definida baseada na temperatura normalizada T ou a fração mássica dos reagentes Y . Utilizando-se a temperatura resulta:

$$c = \frac{T - T_u}{T_b - T_u}, \quad (3.18)$$

onde o subscrito b corresponde aos gases queimados, e o subscrito u corresponde aos gases não queimados. A propagação da frente de chama é modelada utilizando-se uma equação de transporte para a variável de regressão definida como $b = c - 1$.

Para considerar SGE, levando-se em conta que as equações devem considerar a variável de regressão b , assume-se que as variáveis dependentes para as equações (3.1) a (3.3), podem ser divididas em componentes da escalas de malha (GS) e sub-malha (SGS), tal que, para uma dada variável dependente ψ resulta:

$$\psi = \bar{\psi} + \psi'. \quad (3.19)$$

A componente GS é obtida ao se filtrar ψ , pela propriedade integral de convolução envolvendo a função a ser filtrada e uma função filtro G_f com as propriedades, tal que:

$$\int_D G_f(\mathbf{x}) d^3\mathbf{x} = 1, \lim_{\Delta \rightarrow 0} G_f(\mathbf{x}, \Delta) = \delta(\mathbf{x}) \text{ e } G_f(\mathbf{x}, \Delta) \in C^m(\mathbb{R}^3). \quad (3.20)$$

Podemos adaptar a formulação SGE incluindo o conceito de média condicional, introduzindo uma função indicadora l (TABOR; WELLER, 2004), tal que:

$$l(\mathbf{x}, t) = \begin{cases} 1 & \text{se } (\mathbf{x}, t) \text{ está na fase de gás não queimado,} \\ 0 & \text{qualquer outra opção.} \end{cases} \quad (3.21)$$

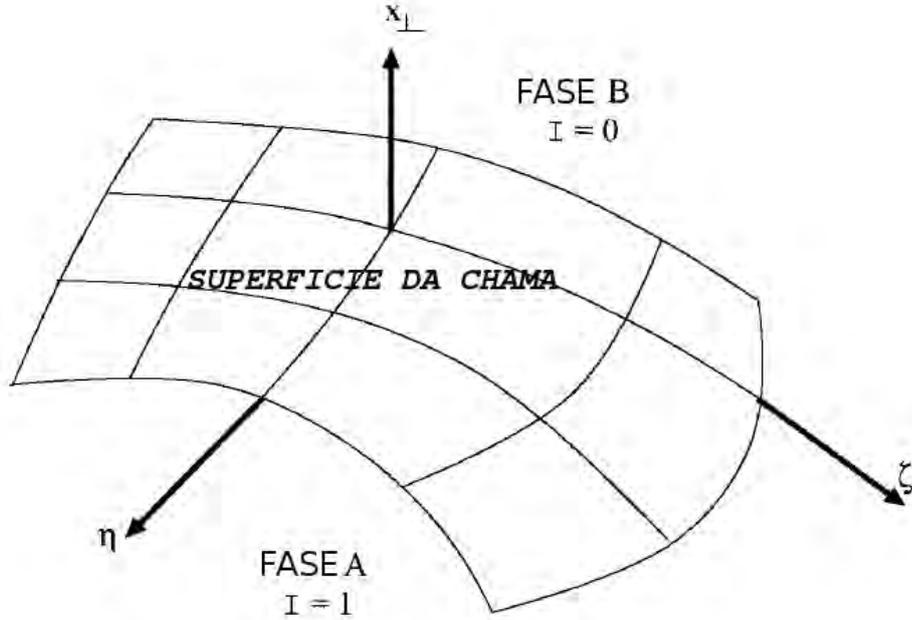


Figura 3.1 - Coordenadas locais para a superfície de chama. Sendo x_{\perp} a direção normal á superfície de chama e (η, ζ) são coordenadas da superfície de chama.

Aqui, l é uma função generalizada do qual podemos tomar o gradiente. Ele será zero sobre a interface com uma direção normal á superfície da chama. Se agora introduzimos um sistema de coordenadas na interface $(x_{\perp}, x_{\parallel})$ sendo x_{\perp} a direção normal a interface e $x_{\parallel} = (\eta, \zeta)$ as coordenadas da interface como mostra a fig. 3.1, então:

$$l(x_{\perp}, \eta, \zeta) = \Theta(x_{\perp}), \quad \nabla l = \frac{1}{h_{\perp}} \partial_{\perp} \Theta(x_{\perp}) \mathbf{n}_{\perp} = \frac{1}{h_{\perp}} \delta(x_{\perp}) \mathbf{n}_{\perp}, \quad (3.22)$$

onde Θ é a função de Heaviside. Também, h_{\perp} é o elemento do tensor métrico apropriado para este tipo de sistema de coordenadas que se relaciona à curva (ou enrugado) da superfície. \mathbf{n}_{\perp} é o vetor unitário na direção x_{\perp} , que é normal a superfície da chama.

Pode-se definir uma velocidade de interface \mathbf{U}_I tal que:

$$\frac{dl}{dt} = \frac{\partial l}{\partial t} + \mathbf{U}_I \cdot \nabla l = 0. \quad (3.23)$$

Pode-se notar que \mathbf{U}_I é definido aqui como sendo a velocidade total da interface, independente dela ser gerada por advecção do escoamento ou pela geração (ou remoção) da fase A , tendo a seguinte relação:

$$\frac{dl}{dt} = -\frac{1}{h_\perp} \mathbf{U}_I \cdot \mathbf{n}_\perp \delta(x_\perp). \quad (3.24)$$

Podemos introduzir agora um filtro condicional que tem a forma:

$$\overline{\overline{\psi}} = G_f * (l\psi) = \int_D G_f(\mathbf{x} - \mathbf{x}') l(\mathbf{x}', t) \psi(\mathbf{x}', t) d\mathbf{x}', \quad (3.25)$$

Para um tensor ψ de qualquer dimensão, pode-se definir $\overline{\overline{\psi}}$ como o valor da fase ponderada de ψ para qualquer ponto. Introduzindo a variável de avanço da combustão \bar{b} como a propriedade da função indicadora de grandes escalas:

$$\overline{\overline{\psi}} = \bar{b} \overline{\psi_u}, \quad (3.26)$$

onde $\bar{b}(\mathbf{x}, t)$ é a possibilidade do ponto (\mathbf{x}, t) estar dentro do gás não queimado, fixando $\psi = 1$

$$\bar{b}(\mathbf{x}, t) = \int_D G_f(\mathbf{x} - \mathbf{x}') l(\mathbf{x}', t) d^3 \mathbf{x}'. \quad (3.27)$$

Em escoamento compressível é necessário que a densidade seja variável e o produto $\overline{\overline{\rho\psi}}$ pode ser escrito:

$$\overline{\overline{\rho\psi}} = \bar{b} \overline{\rho\psi_u}. \quad (3.28)$$

Onde o subscrito u indica a fase do gás não queimado.

Definindo a densidade média ponderada $\widetilde{\psi}_u$ na fase do gás não queimado e dividindo o lado direito, resulta:

$$\overline{\rho\psi_u} = \overline{\rho_u}\widetilde{\psi}_u, \quad (3.29)$$

Com a equação (3.29) em (3.28), resulta:

$$\overline{\overline{\rho\psi}} = \overline{b} \overline{\rho_u}\widetilde{\psi}_u. \quad (3.30)$$

Para conseguir lidar com derivadas espaciais e temporais, assume-se um tamanho do filtro constante.

$$\nabla \circ \overline{\overline{\psi}} = \nabla \circ \{G_f * (l\psi)\} = G_f * \{\nabla \circ (l\psi)\}, \quad (3.31)$$

Sendo $\nabla \circ$ uma forma apropriada de derivar um tensor. Também,

$$\frac{\partial \overline{\overline{\psi}}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} \{G_f * (l\psi)\} = G_f * \frac{\partial (l\psi)}{\partial t}. \quad (3.32)$$

Usando a propriedade da identidade

$$l\nabla \circ \psi = \nabla \circ (\psi l) - \psi \circ \nabla l, \quad (3.33)$$

Na equação (3.22), teríamos:

$$\begin{aligned} \overline{\overline{\nabla \circ \psi}} &= \nabla \circ \overline{\overline{\psi}} - \int_D G_f(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \psi(\mathbf{x}') \circ \mathbf{n}_\perp \delta((\mathbf{x} - \mathbf{x}_I) \cdot \mathbf{n}_\perp) \frac{1}{h_\perp} d^3 \mathbf{x}' = \\ &\nabla \circ \overline{\overline{\psi}} - \underbrace{\overline{\psi \circ \mathbf{n}_\perp}}_{\Sigma} \end{aligned} \quad (3.34)$$

Aqui definimos um operador denominado, filtro de superfície $\underbrace{\hspace{1cm}}$ como

$$\underbrace{\psi}_{\Sigma} = \frac{1}{\Sigma} \int_D G_f(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \psi(\mathbf{x}') \delta((\mathbf{x}' - \mathbf{x}_I) \cdot \mathbf{n}_\perp) \frac{1}{h_\perp} d^3 \mathbf{x}'. \quad (3.35)$$

Porque o termo $\delta((\mathbf{x}' - \mathbf{x}_I) \cdot \mathbf{n}_\perp)$ da integral é diferente de zero nas vizinhanças da interface. Utilizando transformação de coordenadas em $(x_\perp, \mathbf{x}_\parallel)$, a integral ficaria:

$$\begin{aligned} \widehat{\psi} &= \frac{1}{\Sigma} \int \int \int G_{f\perp}(x_\perp - x'_\perp) \psi(x'_\perp, \mathbf{x}'_\parallel) \delta(x'_\perp - x_{\perp,I}) dx'_\perp \\ &\times G_{f\parallel}(\mathbf{x}_\parallel - \mathbf{x}'_\parallel) |\mathcal{J}| d^2 \mathbf{x}'_\parallel \\ &= \frac{1}{\Sigma} G_{f\perp}(x_\perp - x'_{\perp,I}) \int \int G_{f\parallel}(\mathbf{x}_\parallel - \mathbf{x}'_\parallel) \psi(x_{\perp,I}, \mathbf{x}'_\parallel) |\mathcal{J}| d^2 \mathbf{x}'_\parallel. \end{aligned} \quad (3.36)$$

Assume-se que a função filtro G_f pode ser dividida nas componentes perpendicular e paralela à interface, com $|\mathcal{J}|$ sendo o Jacobiano para o sistema de coordenadas (η, ζ) . Pode ser apreciado que a variável ψ esta sendo filtrada unicamente sobre a superfície da interface. Mas a interface é estendida pelo filtro G_f para as vizinhanças imediatas. Tomando $\psi=1$ na equação (3.36) para gases não queimados, resulta:

$$\Sigma = G_{f\perp}(\mathbf{x}_\perp - \mathbf{x}'_{\perp,I}) \int \int G_{f\parallel}(\mathbf{x}_\parallel - \mathbf{x}'_\parallel) |\mathcal{J}| d^2 \mathbf{x}'_\parallel. \quad (3.37)$$

Sendo $|\mathcal{J}| d^2 \mathbf{x}'_\parallel$ o elemento de área sobre a superfície, Σ é interpretada como sendo a quantidade de interface suportada pelo filtro.

De um modo similar à identidade descrita a seguir:

$$l \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{\partial \psi l}{\partial t} - \psi \frac{\partial l}{\partial t}, \quad (3.38)$$

gera a relação comutativa, ficando:

$$\frac{\partial \overline{\psi}}{\partial t} - \overline{\frac{\partial \psi}{\partial t}} = \overbrace{\psi \mathbf{U}_I \cdot \mathbf{n}_\perp} \Sigma. \quad (3.39)$$

Finalmente, substituindo $\psi=1$ na Eq. (3.34) resulta:

$$\nabla \bar{b} = \widehat{\mathbf{n}_\perp} \Sigma, \quad (3.40)$$

relacionando a variável de regressão \bar{b} (agora função indicadora de grandes escalas) com a superfície filtrada na direção do vetor $\widehat{\mathbf{n}_\perp}$. A identidade pode ser obtida a

partir da Eq. (3.39).

$$\frac{\partial \bar{b}}{\partial t} = - \overbrace{\mathbf{U}_I \cdot \mathbf{n}_\perp} \sum. \quad (3.41)$$

3.2.2 Equação da Continuidade Filtrada

A equação de conservação é escrita em um sistema de coordenadas localizado na superfície da chama, isto é \mathbf{n}_\perp e \mathbf{n}_\parallel são vetores unitários com direções normal x_\perp e paralela \mathbf{x}_\parallel à superfície da chama. O tensor métrico do sistema de coordenadas é h_\perp . Este sistema de coordenadas é usado a fim de incluir o filtro condicional baseado na variável de regressão média \bar{b} .

A equação da continuidade filtrada conforme Tabor e Weller (2004) resulta:

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \nabla \cdot \overline{\rho \mathbf{U}} = \overbrace{\rho(\mathbf{U} - \mathbf{U}_I) \cdot \mathbf{n}_\perp} \sum. \quad (3.42)$$

Onde $\mathbf{U}_I = \mathbf{U} + v_a \mathbf{n}_\perp$. \mathbf{U}_I é a velocidade total sobre a interface que tem as componentes do termo de velocidade de advecção do escoamento \mathbf{U} e do avanço da interface relativa ao escoamento $v_a \mathbf{n}_\perp$.

Para as coordenadas transformadas (x_\perp, x_\parallel) :

$$\sum = G_\perp(x_\perp - x_{\perp,I}) \int \int G_\parallel(\mathbf{x}_\parallel - \mathbf{x}'_\parallel) |\mathcal{J}| d^2 \mathbf{x}'_\parallel, \quad (3.43)$$

A operação de filtro da superfície $\overbrace{\psi}$ é definida como:

$$\overbrace{\psi} = \frac{1}{\sum} \int_D G(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \psi(\mathbf{x}') \delta((\mathbf{x}' - \mathbf{x}) \cdot \mathbf{n}_\perp) \frac{1}{h_\perp} d^3 \mathbf{x}'. \quad (3.44)$$

A partir de 3.29, em 3.42 resulta:

$$\frac{\partial \bar{\rho}_u}{\partial t} + \nabla \cdot \bar{\rho}_u \widetilde{\mathbf{U}}_u = - \overbrace{\rho v_a} \sum. \quad (3.45)$$

Esta operação de filtro da superfície aplicada para \mathbf{n}_\perp resulta:

$$\widehat{\mathbf{n}}_{\perp} = \frac{1}{\sum} G_{\perp}(x_{\perp} - x_{\perp,I}) \int \int G_{\parallel}(\mathbf{x}_{\parallel} - \mathbf{x}'_{\parallel}) \mathbf{n}_{\perp}((\mathbf{x}_{\perp,I}, \mathbf{x}'_{\parallel}) | \mathcal{J} | d^2 \mathbf{x}'_{\parallel}. \quad (3.46)$$

$\widehat{\mathbf{n}}_{\perp}$ pode ser relacionada para grandes escalas com \mathbf{n}_f na direção da interface:

$$\widehat{\mathbf{n}}_{\perp} = \frac{\mathbf{n}_f}{\Xi}. \quad (3.47)$$

Onde Ξ representa a área total da superfície da sub-malha por área da superfície enrugada na direção \mathbf{n}_f :

$$\Xi = \frac{1}{|\widehat{\mathbf{n}}_{\perp}|} = \frac{\sum}{|G_{\perp}(x_{\perp} - x_{\perp,I}) \int \int G_{\parallel}(\mathbf{x}_{\parallel} - \mathbf{x}'_{\parallel}) \mathbf{n}_{\perp}((\mathbf{x}_{\perp,I}, \mathbf{x}'_{\parallel}) | \mathcal{J} | d^2 \mathbf{x}'_{\parallel}|}. \quad (3.48)$$

Substituindo na Eq. (3.40), resulta

$$\Xi = \frac{\sum}{|\nabla \bar{b}|}, \quad (3.49)$$

onde $|\nabla \bar{b}|$ representa a área da superfície da grade.

3.2.3 Equação da Quantidade de Movimento e Energia

O filtro condicional na equação de quantidade de movimento resulta:

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\bar{b}\rho_u \widetilde{\mathbf{U}}_u)}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{b}\rho_u \widetilde{\mathbf{U}}_u \otimes \widetilde{\mathbf{U}}_u) = \\ - \nabla \bar{b} \bar{p}_u + \nabla \cdot \{ \bar{b}(\bar{\mathbf{S}}_u - \mathbf{B}_u) \} + \overbrace{[(p\mathbf{I} - \mathbf{S}) \cdot \mathbf{n}_{\perp} - \rho v_a \widetilde{U}]} \sum. \end{aligned} \quad (3.50)$$

Onde p é a pressão, s_L é a velocidade de chama laminar, \sum a densidade de superfície de chama, $\mathbf{S} = \lambda \nabla \cdot \mathbf{U} \mathbf{I} + 2\mu \mathbf{D}$ é o tensor das tensões viscosas e $\mathbf{D} = \frac{1}{2}(\nabla \mathbf{U} + \nabla \mathbf{U}^T)$ é a parte simétrica do tensor das deformações. Os termos em colchetes representam o efeito da interface no balance da quantidade de movimento.

\mathbf{B}_u representa o tensor das tensões da sub-malha.

$$\mathbf{B}_u = \overline{(\rho \mathbf{U} \otimes \mathbf{U})}_u - \bar{\rho}_u \widetilde{\mathbf{U}}_u \otimes \widetilde{\mathbf{U}}_u. \quad (3.51)$$

Este termo necessita ser modelado.

A equação da energia filtrada resulta:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial (\bar{b} \bar{\rho}_u \tilde{\epsilon}_u)}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{b} \bar{\rho}_u \tilde{\epsilon}_u \widetilde{\mathbf{U}}_u) = \\ & - (\bar{b} \bar{p}_u \nabla \cdot \widetilde{\mathbf{U}}_u + \bar{b} \bar{\rho}_u \pi_u) + (\bar{b} \bar{\mathbf{S}}_u \cdot \bar{\mathbf{D}}_u) + \bar{b} \bar{p}_u \epsilon_u + \nabla \cdot \bar{b} (\bar{\mathbf{h}}_u - \mathbf{b}_u) + \left[\overbrace{\rho e v_a} - \overbrace{\mathbf{h} \cdot \mathbf{n}_\perp} \right]. \end{aligned} \quad (3.52)$$

Onde

$$\bar{\rho}_u \pi_u = \overline{(p \nabla \cdot \mathbf{U})}_u - \bar{p}_u \nabla \cdot \widetilde{\mathbf{U}}_u, \quad (3.53)$$

$$\bar{\rho}_u \epsilon_u = \overline{(\mathbf{S} \cdot \mathbf{D})}_u - \bar{\mathbf{S}}_u \cdot \bar{\mathbf{D}}_u, \quad (3.54)$$

representam a pressão de dilatação SGS π e a dissipação ϵ (TABOR; WELLER, 2004). A energia total na interface é apresentada em colchetes.

3.2.4 Modelo de Sub-malha Para Chama Pré-Misturada

Modelos para a escala de sub-malha (SGS) para o tensor de tensões viscosas, para o vetor de fluxo, para a dissipação e para a taxas de reação filtradas são usados para fechar as equações de equilíbrio. Os modelos para o tensor de tensões viscosas e fluxo são do tipo padrão usados em SGE. Nesta aproximação eles não dependem da química detalhada do escoamento reativo.

Um modelo flamelet com filtro condicional para SGE é usado para determinar uma equação de transporte para b . O modelo usa a velocidade de propagação de chama em termos da área da chama laminar por unidade de volume Σ e o grau de enrugamento da chama em um ponto do domínio, como foi definido em 3.2.2. O modelo desenvolvido por Weller (1993) usa a densidade de superfície da chama e uma fun-

ção de superfície enrugada Ξ . A função Ξ é a área média da chama por unidade de volume dividida pela área projetada na direção média da propagação.

O principal problema em escoamento reativo para a abordagem SGE é o tratamento da zona de reação. Para a zona de reação as escalas características para os processos de reação são menores que o comprimento do filtro. Isto leva à necessidade de um tratamento adequado para a zona de reação, sendo necessário modelar essas escalas de sub-malha. Para conseguir isto são necessárias equações para as variáveis geométricas \bar{b} e Ξ .

3.2.4.1 Modelo para b em sub-malha

Combinando as fases queimadas e não queimadas em termos da média da densidade total

$$\bar{\rho} = \bar{\rho}_u \bar{b} + \bar{\rho}_c (1 - \bar{b}). \quad (3.55)$$

Agora definimos uma variável de regresso \tilde{b}

$$\bar{\rho} \tilde{b} = \bar{\rho}_u \bar{b}, \quad (3.56)$$

sendo que $\bar{b} \in [0, 1]$, $\tilde{b} \in [1, 0]$. Das Eqs. 3.49 e 3.56 a equação da continuidade se escreve:

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{b}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{U}}_u \tilde{b}) = -\bar{\rho}_u s_L \Xi |\nabla \bar{b}|. \quad (3.57)$$

Onde s_L é a velocidade da chama laminar. Na equação (3.57) o lado direito precisa de um modelo de sub-malha. Este modelo esta baseado no denominado filtro condicional da velocidade do gás não queimado $\tilde{\mathbf{U}}_u$. Este termo é modelado usando

$$\tilde{\mathbf{U}}_u = \tilde{\mathbf{U}} + (1 - \tilde{b}) \overline{\mathbf{U}}_{ub}. \quad (3.58)$$

Onde $\overline{\mathbf{U}}_{ub}$ é a velocidade de deslizamento definida como a diferença dos gases não queimados e dos gases queimados $\overline{\mathbf{U}}_{ub} = \overline{\mathbf{U}}_u - \overline{\mathbf{U}}_b$ e, por analogia com as propriedades de chama laminar, obtém-se uma relação para usar com SGE:

$$\overline{\mathbf{U}_{ub}} = \left(\frac{\bar{\rho}_u}{\bar{\rho}_b} - 1 \right) s_L \Xi \mathbf{n}_\perp - \mathcal{D} \frac{\nabla \tilde{b}}{\tilde{b}(1 - \tilde{b})}. \quad (3.59)$$

Sendo \mathcal{D}_{sgs} o coeficiente de difusão da sub-malha, e a normal à chama é $\mathbf{n}_\perp = \nabla \tilde{b} / |\nabla \tilde{b}|$. Combinando as equações (3.59) e (3.58) na Eq. (3.57), chegamos a equação modelada para \tilde{b} , (TABOR; WELLER, 2004):

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{b}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{U}} \tilde{b}) - \nabla \cdot (\bar{\rho} \mathcal{D}_{sgs} \nabla \tilde{b}) = -\bar{\rho}_u s_L \Xi |\nabla \tilde{b}|. \quad (3.60)$$

3.2.4.2 Modelo SGS de sub-malha para Ξ

Da equação de transporte para a densidade de área de chama Σ apresentada por Weller (1993) para a sub-malha obtida a partir da relação $\Xi = \Sigma / |\nabla \bar{b}|$ e a fracção em volume de gases não queimados b

$$\frac{\partial \Xi}{\partial t} = \frac{1}{|\nabla \bar{b}|} \frac{\partial \Sigma}{\partial t} - \frac{\Xi}{|\nabla \bar{b}|} \frac{\partial |\nabla \bar{b}|}{\partial t}, \quad (3.61)$$

uma equação de transporte para a chama enrugada é obtida (TABOR; WELLER, 2004):

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Xi}{\partial t} + \widehat{\mathbf{U}}_I \cdot \nabla \Xi = \\ - \Xi \overbrace{\mathbf{n}_\perp \cdot \nabla \mathbf{U}_I \cdot \mathbf{n}_\perp} + \Xi \mathbf{n}_f \cdot \nabla \widehat{\mathbf{U}}_t \cdot \mathbf{n}_f + \Xi \left(\widehat{\mathbf{U}}_t - \widehat{\mathbf{U}}_I \right) \cdot \frac{\nabla |\nabla \bar{b}|}{|\nabla \bar{b}|}. \end{aligned} \quad (3.62)$$

Onde $\widehat{\mathbf{U}}_t$ é a velocidade efetiva da superfície de chama definida por $\partial \bar{b} / \partial t + \widehat{\mathbf{U}}_t \cdot \nabla \bar{b} = 0$ e U_I é a velocidade instantânea local da superfície de chama. O primeiro e o segundo termo do lado direito da Eq. (3.62) representam os efeitos da tensão viscosa e propagação (em SGS e GS) sobre Ξ . Esses termos são modelados por decomposição das taxas do tensor das deformações σ_t e σ_s relacionados a $\tilde{\mathbf{U}}_t$ e $\tilde{\mathbf{U}}_s$, respectivamente.

Esses termos envolvem derivadas de alta ordem e criam dificuldade numérica para SGE e são evitados. Ao invés de tentar resolver cada termo em detalhe, desenvolvem-

se modelos que representam a geração e remoção de enrugamento, modelados respectivamente por $G\Xi$ e $\mathcal{R}(\Xi - 1)$.

O terceiro termo do lado direito da Eq. (3.62) representa o efeito da diferença entre a velocidade da propagação $\widehat{\mathbf{U}}_t$ e a velocidade da interface $\widehat{\mathbf{U}}_I$, que é incrementada com a distorção da interface. A distribuição de Ξ , por um lado reduz a geração na frente de chama e por outro reforça a geração de chama na parte de trás.

Desta forma o problema associado com derivadas de alta ordem é evitado ao incluir o efeito diretamente no modelo para G , resultando a seguinte equação simplificada para Ξ :

$$\frac{\partial \Xi}{\partial t} + \widehat{\mathbf{U}}_s \cdot \nabla \Xi = G\Xi - \mathcal{R}(\Xi - 1) + (\sigma_s - \sigma_t)\Xi, \quad (3.63)$$

Aqui, o termo final pode ser correlacionado com as taxas do tensor das deformações resolvidas

$$\sigma_t = \frac{1}{2} \left\| \nabla \widehat{\mathbf{U}}_t + \nabla \widehat{\mathbf{U}}_t^T \right\|,$$

$$\sigma_s = \frac{1}{2} \left\| \nabla \widehat{\mathbf{U}}_I + \nabla \widehat{\mathbf{U}}_I^T \right\|.$$

Os valores para os parâmetros G e \mathcal{R} devem ser modelados. Uma abordagem espectral é aplicada para a modelagem da interação entre chama e turbulência na qual a frente de chama enrugada é representada por uma distribuição de escalas - comprimento das distorções da superfície, limitados pelo tamanho do núcleo da chama e a espessura de chama laminar (WELLER et al., 1990). No entanto, a solução das equações da evolução espectral, aliada a equação de transporte para Ξ , é custosa e modelos algébricos são considerados mais apropriados. A abordagem utilizada foi baseada e testada com sucesso na correlação para velocidade de chama (GULDER, 1990):

$$G = \mathcal{R} \frac{\Xi_{eq} - 1}{\Xi_{eq}}, \quad \mathcal{R} = \frac{0.28}{\tau_\eta} \frac{\Xi_{eq}^* - 1}{\Xi_{eq}^*}, \quad (3.64)$$

sendo

$$\begin{aligned}\Xi_{eq}^* &= 1 + 0.62\sqrt{\frac{z'}{s_L}Re_\eta}, \\ \Xi_{eq} &= 1 + 2(1-b)(\Xi_{eq}^* - 1).\end{aligned}\tag{3.65}$$

Sendo τ_η o tempo de Kolmogorov, z' a intensidade da turbulência na sub-malha e Re_η o número de Reynolds na escala de Kolmogorov. A velocidade de superfície filtrada de chama $\widehat{\mathbf{U}}_I$ é modelada, usando de uma maneira similar, o filtro condicional da velocidade dos gases não queimados.

$$\bar{\mathbf{U}}_I = \tilde{\mathbf{U}} + \left(\frac{\bar{\rho}_u}{\bar{\rho}} - 1\right)s_L\Xi\mathbf{n}_f - \frac{\nabla \cdot (\bar{b}\mathcal{D}\tilde{b})}{\bar{b}|\nabla\tilde{b}|}\mathbf{n}_f.\tag{3.66}$$

A taxa do tensor das deformações resolvidas GS σ_t é obtida a partir de $\tilde{\mathbf{U}}$ e a velocidade de chama turbulenta da sub-malha $s_L\Xi$ é obtida ao retirar a componente de dilatação da taxa do tensor das deformações na direção de propagação \mathbf{n}_f , resultando:

$$\sigma_t = \nabla \cdot (\tilde{\mathbf{U}} + s_L\Xi\mathbf{n}_f) - \mathbf{n}_f \cdot (\nabla(\tilde{\mathbf{U}} + s_L\Xi\mathbf{n}_f)) \cdot \mathbf{n}_f.\tag{3.67}$$

Assume-se que a expansão do gás devido à combustão ocorre na direção \mathbf{n}_f , evitando assim a necessidade de se aproximar o modelo da velocidade do gás filtrada. A taxa do tensor das deformações resolvidas com superfície filtrada σ_s é obtida de maneira similar, separando os efeitos das tensões do escoamento e as tensões da propagação, de modo que o enrugamento da chama possa ser modelado apropriadamente. No limite, para um grande enrugamento (considerando escoamento isotrópico), os efeitos de compressão do campo de escoamento são cancelados e se considera que os efeitos da deformação de propagação aproximam-se da metade daqueles enrugados e alinhados com \mathbf{n}_f . O resultado é:

$$\sigma_s = \frac{\nabla \cdot \tilde{\mathbf{U}} - \mathbf{n}_f \cdot (\nabla\tilde{\mathbf{U}}) \cdot \mathbf{n}_f}{\Xi} + \frac{(\Xi + 1)[\nabla \cdot (s_L\mathbf{n}_f) - \mathbf{n}_f \cdot (\nabla(s_L\mathbf{n}_f)) \cdot \mathbf{n}_f]}{2\Xi}.\tag{3.68}$$

Durante a compressão lateral espera-se que a taxa do tensor das deformações GS cause um incremento no enrugamento da chama, apesar do modelo espectral

(WELLER et al., 1990) sugerir a existência de uma leve remoção da taxa das deformações causada por uma redução na distância entre rugas. Isto incrementa a taxa de remoção na sub-malha de uma maneira desproporcional. Para solucionar este problema uma função *max* é aplicada ao último termo na Eq. (3.63), permitindo a remoção do enrugamento unicamente para as deformações resolvidas.

Os requisitos restantes para conseguir fechar a equação são destinados a proporcionar uma formulação para a velocidade de chama laminar s_L . Isto dependera fortemente da física do problema em consideração. Para alguns problemas de combustão é razoável assumir que a velocidade de chama laminar não é afetada pela deformação nem pela curvatura, e assim $s_L = s_L^0$, para velocidade de chama sem deformações. No entanto, em muitos dos casos o efeito das deformações não pode ser ignorado (POINSOT et al., 1991).

Uma aproximação do modelo assume que a velocidade de chama laminar está em equilíbrio com as taxas de deformações resolvidas locais, resultando em uma resposta linear. Os efeitos das deformações e curvatura de sub-malha são considerados grandes e se cancelam, como sugere o modelo espectral:

$$s_L^\infty = s_L^0 \max(1 - \sigma_s / \sigma_{ext}, 0), \quad (3.69)$$

onde σ_{ext} é a taxa do tensor deformação na extinção obtida da extrapolação da escala de comprimento de Markstein quando $s_L \rightarrow 0$.

Desafortunadamente, as escalas de tempo químico de chamas pobres podem ser comparáveis às escalas de tempo das deformações e transporte, fazendo neste caso com que a hipótese de equilíbrio local não seja alcançada, sendo requerida então uma equação de transporte total.

Por analogia com o transporte de uma chama enrugada, espera-se que a velocidade de chama laminar filtrada seja transportada na superfície filtrada pela velocidade de chama $\widehat{\mathbf{U}}_I$. Assumindo que a escala de tempo da taxa das tensões é $1/\sigma_s$ e a escala de tempo químico é tal que quando $t \rightarrow \infty$, $Su \rightarrow s_L^\infty$ (WELLER et al., 1998), então:

$$\frac{\partial s_L}{\partial t} + \widehat{\mathbf{U}}_s \cdot \nabla s_L = -\sigma_s s_L + \sigma_s s_L^\infty \frac{(s_L^0 - s_L)}{(s_L^0 - s_L^\infty)}. \quad (3.70)$$

A equação de transporte obtida obedece ao comportamento da chama laminar e

tem uma forma consistente com o desenvolvimento das equações para o modelo de combustão SGE. Somente com dados apropriados que verifiquem os efeitos de deformação temporal da chama laminar, pode ser possível a validação do modelo.

Assim, o modelo de chama enrugada pode ser simplificado substituindo Ξ na equação 3.63 pela expressão de equilíbrio 3.65 e, por outro lado, pela substituição de s_L da equação (3.70) pela expressão de equilíbrio 3.69. Com essas substituições feitas resultam os conhecidos modelos de uma equação e o modelo algébrico respectivamente.

3.3 Formulação Para Chama Não Pré-misturada

Aplicando filtro SGE nas equações (3.2) a (3.4), as equações de Navier-Stokes resultam (ERLEBACHER et al., 1992):

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} [\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j + \bar{p} \delta_{ij} - \bar{\tau}_{ij} + \tau_{ij}^{sgs}] = 0, \quad (3.71)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{E}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} [(\bar{\rho} \tilde{E} + \bar{p}) \tilde{u}_i + \bar{q}_i - \tilde{u}_j \bar{\tau}_{ij} + H_i^{sgs} + \sigma_i^{sgs}] = 0, \quad (3.72)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Y}_m}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} [\bar{\rho} \tilde{Y}_m \tilde{u}_i + \bar{\rho} \tilde{D}_m \frac{\partial \tilde{Y}_m}{\partial x_i} + \Phi_{i,m}^{sgs} + \Theta_{i,m}^{sgs}] = \bar{\rho} \tilde{w}_m, \text{ onde } m = 1, N \quad (3.73)$$

As equações filtradas com SGE tem termos que representam os efeitos das escalas não resolvidas sobre as escalas resolvidas do movimento, resultado dos processos de filtragem e denotado aqui pelos termos com sobrescrito *sgs*. Assim, k^{sgs} representa a energia cinética turbulenta na sub-malha, definida como:

$$k^{sgs} = \frac{1}{2} (\widetilde{u_k u_k} - \tilde{u}_k \tilde{u}_k). \quad (3.74)$$

A energia total por unidade de massa pode ser escrita como:

$$\tilde{E} = \tilde{e} + \frac{1}{2} (\tilde{u}_k \tilde{u}_k) + k^{sgs}. \quad (3.75)$$

Onde, a energia interna para gases caloricamente perfeitos é:

$$\tilde{e} = \sum_{m=1}^N (c_{v,m} \tilde{Y}_m \tilde{T} + \tilde{Y}_m \Delta h'_{f,m}). \quad (3.76)$$

Onde, $\Delta h'_{f,m} = \Delta h'_{f,m}{}^0 - C_{p,m} T^0$ e $C_{v,m}$ é o calor específico da espécie m a volume constante.

Também, o tensor das tensões viscosas filtrado pode ser escrito em termos de velocidades filtradas:

$$\tilde{\tau}_{ij} = \mu \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{3}{2} \mu \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \delta_{ij}. \quad (3.77)$$

Similarmente, o vetor de fluxo de calor filtrado ficaria:

$$\bar{q}_i = -\bar{k} \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_i} + \bar{\rho} \sum_{m=1}^N \tilde{h}_m \tilde{Y}_m \tilde{V}_{im} + \sum_{m=1}^N q_{im}^{sgs}. \quad (3.78)$$

Onde as velocidades de difusão são calculadas usando os gradientes resolvidos da fração mássica das espécies \tilde{Y}_k e q_{im}^{sgs} representa a transferência de calor via convecção turbulenta das espécies.

Finalmente a equação de estado em sua forma filtrada pode ser escrita como:

$$p = \rho R_u \sum_{m=1}^N \frac{\tilde{Y}_m \tilde{T}}{MW_m} + \Upsilon^{sgs}. \quad (3.79)$$

Sumarizando, as equações filtradas de Navier-Stokes contêm vários termos sem fechamento que precisam ser modelados: O tensor das tensões de Reynolds a nível de sub-malha τ_{ij}^{sgs} , os fluxo de entalpia, H_i^{sgs} , o trabalho viscoso σ_i^{sgs} , o fluxo convectivo de massa $\Phi_{i,j}^{sgs}$, o fluxo difusivo de massa $\Theta_{i,j}^{sgs}$, o fluxo de calor $q_{i,j}^{sgs}$, e o termo de correlação de temperaturas de espécies Υ^{sgs} .

$$\begin{aligned}
\tau_{ij}^{sgs} &= \bar{\rho}[\widetilde{u_i u_j} - \tilde{u}_i \tilde{u}_j], \\
H_i^{sgs} &= \bar{\rho}[\widetilde{E u_i} - \tilde{E} \tilde{u}_i] + [\overline{p u_i} - \bar{p} \tilde{u}_i], \\
\sigma_i^{sgs} &= \widetilde{u_j \tau_{ij}} - \tilde{u}_j \overline{\tau_{ji}}, \\
\Phi_{jm}^{sgs} &= \bar{\rho}[\widetilde{Y_m u_j} - \tilde{Y}_m \tilde{u}_j], \\
\Theta_{jm}^{sgs} &= \bar{\rho}[\widetilde{Y_m V_{j,m}} - \tilde{Y}_m \tilde{V}_{j,m}], \\
q_{jm}^{sgs} &= \overline{h_m \mathcal{D}_m \frac{\partial Y_m}{\partial x_i}} - \tilde{h}_m \tilde{\mathcal{D}}_m \frac{\partial Y_m}{\partial x_i}, \\
\Upsilon^{sgs} &= \sum_{m=1}^N (Y_k \tilde{T} - \tilde{Y}_k \tilde{T}).
\end{aligned} \tag{3.80}$$

3.3.1 Fechamento das Equações em SGE Para Sub-malha

O fechamento dos termos de sub-malha é uma grande área de pesquisa e muitas aproximações têm sido propostas. A formulação inicial foi dada por Smagorinsky (SMAGORINSKY, 1963) usando um modelo de viscosidade turbulenta algébrico para fechar as equações com SGE. Smagorinsky assume que a produção de energia cinética e a dissipação estão em equilíbrio. Em geral, desde que as pequenas escalas proporcionam dissipação primária para uma cascata de energia das grandes escalas através da faixa inercial, um modelo de sub-malha do tipo viscosidade turbulenta parece apropriado. Apesar de que a hipótese de produção de energia cinética e a dissipação entrarem em equilíbrio é bastante questionável. Sendo este requerimento válido somente na zona de dissipação, especialmente para números de Reynolds altos, a resolução da grade em SGE é insuficiente.

Para um campo computacional com grade grossa e com a energia cinética significativa contida nas escalas de sub-malha, se requer um passo de tempo de relaxamento antes de passar a informação de mudanças para a escala resolvida, por isso a hipótese acima não é exata. Portanto, um modelo alternativo, de não-equilíbrio, com escolha para a escala da velocidade, torna-se necessário.

Um modelo de não-equilíbrio proposto por Schumann (1975) baseado na equação de transporte de energia cinética de sub-malha, foi implementado por Kim e Menon (KIM; MENON, 1999). Basicamente, o modelo assume turbulência isotrópica na escala da sub-malha e faixas da energia cinética de sub-malha (k^{sgs}) utilizando uma equação

de transporte que será descrito na seção seguinte. O comprimento da escala da sub-malha é dado pelo tamanho do filtro ($\bar{\Delta}$). A velocidade de sub-malha V^{sgs} é determinado a partir de k^{sgs} e a viscosidade turbulenta é modelada como:

$$\nu_t = C_\nu \sqrt{k^{sgs}} \bar{\Delta}. \quad (3.81)$$

O tensor das tensões da sub-malha é assim fechado usando a viscosidade turbilhonar e um modelo de gradiente de difusão na zona de corte da sub-malha:

$$\tau_{ij}^{sgs} = -2\bar{\rho}\nu_t(\tilde{S}_{ij} - \frac{1}{3}\tilde{S}_{kk}\delta_{ij}) + \frac{2}{3}\bar{\rho}k^{sgs}\delta_{ij}. \quad (3.82)$$

Onde $\tilde{D}_{ij} = \frac{1}{2}(\partial\tilde{u}_i/\partial x_j + \partial\tilde{u}_j/\partial x_i)$ é a taxa de deformação resolvida.

O fluxo de entalpia na sub-malha H_{ij}^{sgs} é também modelado assumindo um gradiente e a viscosidades turbilhonar ν_t :

$$H_{ij}^{sgs} = -\bar{\rho} \frac{\alpha}{Pr_\Theta} \frac{\partial \tilde{H}}{\partial x_i}. \quad (3.83)$$

Onde $\tilde{H} = \tilde{h} + \tilde{u}_i\tilde{u}_i/2 + k^{sgs}$ é a entalpia total. Pr_Θ é o número de Prandtl turbulento, que para este trabalho é igual a um (mas que pode ser calculado) e α é a difusividade térmica. \tilde{h} é a entalpia específica da mistura e pode ser calculada com:

$$\tilde{h} = \sum_{m=1}^N \tilde{h}_m \tilde{Y}_m. \quad (3.84)$$

Foi provado por Fureby e Moller (1995) e Veynante et al. (1996) que Υ^{sgs} pode ser desprezado para casos com baixa geração de calor. Porém, pode ser importante em outros casos. O termo de trabalho viscoso σ_i^{sgs} também é desprezado.

Finalmente, o fechamento a nível de sub-malha para a taxa de reação filtrada \tilde{w}_m , para a convecção $\Phi_{i,j}^{sgs}$, para a difusão das espécies $\Theta_{i,j}^{sgs}$, e para o fluxo de calor $q_{i,m}^{sgs}$ serão tratados na seguinte seção.

3.3.2 Modelo de Sub-malha Não Pré-misturado

Os modelos de combustão para chamas difusivas com aproximação de interação entre química e turbulência podem ser divididos em dois grupos, os de equilíbrio químico e os de química detalhada, como mostrado na tabela 3.1.

O modelo PaSR (Reator parcialmente misturado) é uma variação do modelo Eddy dissipation concept mostrado na tabela 3.1. Ele é baseado na teoria de que chamas reais são menores que qualquer célula computacional. Então, considera-se que a célula de entrada é um reator perfeito. Considera-se uma parte reativa e uma não reativa. A parte reativa é tratada como um reator perfeitamente misturado onde todas as espécies são homogeneamente misturadas e reagem completamente.

Tabela 3.1 - Modelos de chama não pré-misturadas

Tipo de chama	Chama pré-misturada	Chama de Difusão	Chama parcialmente pré-misturada
Equilíbrio Químico	Reação com variável de avanço	Modelo com fração de mistura	Aproximação de fração de mistura
	Modelo Eddy Dissipation(Magnussen e Hjertager)		
Química detalhada		Modelo flamelet	
		Modelo de taxa finita Modelo Eddy dissipation concept Modelo de transporte PDF	

Cada espécie é transportada por difusão e convecção e pode ser formada ou consumida pelas reações. A fração mássica para a espécie i é denotado por Y_i , e a equação de transporte é:

$$\frac{\partial \rho Y_i}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U} Y_i) - \nabla \cdot ((\mu + \mu_t) \nabla Y_i) = f_m(C). \quad (3.85)$$

Onde μ é a viscosidade dinâmica laminar e μ_t é a viscosidade dinâmica turbulenta.

O objetivo do modelo de combustão é relacionar o escoamento do fluido turbulento

com as reações químicas.

3.3.2.1 O conceito do reator parcialmente misturado

A hipótese da teoria de reator parcialmente misturado PaSR considera que uma célula computacional é dividida em duas diferentes zonas, a primeira onde ocorrem todas as reações e uma segunda na qual não se tem nenhuma reação. Então, as variações na composição dependem do intercâmbio de massa na zona de reação, sendo que a zona de reação é tratada como sendo um reator perfeitamente misturado (Perfectly Stirred Reactor, PSR), onde a composição é homogênea, ou seja, cada espécie se considera perfeitamente misturada com as outras. Isto permite desprezar qualquer flutuação na hora de calcular o termo de fonte química. Como estas células computacionais estão divididas na zona reativa e não reativa se torna uma incógnita saber qual é a dimensão da fração em massa tomando parte na combustão e como ela é governada.

Como será constatado depois, a resposta para essa incógnita será dada pela aproximação PaSR, que une a informação da sub-grade com as das grades escalas.

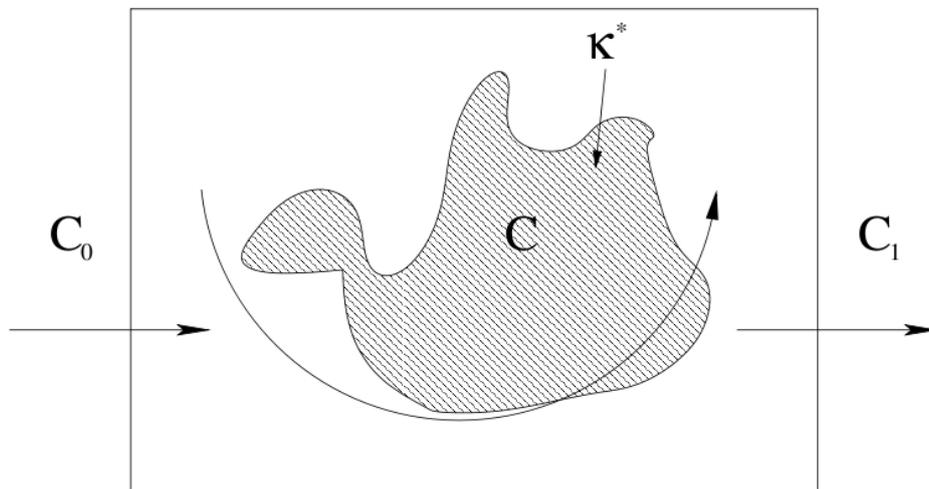


Figura 3.2 - Modelo conceitual do PSR.

A fração mássica reativa será definida com um passo de tempo avançando de C_0 para C_1 como mostrado na Fig. 3.2.

O modelo distingue três concentrações molares:

- C_0 é a concentração média que alimenta a célula e se considera como a concentração inicial média na célula.
- C é a concentração não conhecida na zona de reação da sub-malha na parte reativa desconhecida da célula material.
- C_1 é a concentração média do reator na saída, e é, também, a concentração média da célula.

Tendo estabelecido isto, a concentração do reator na saída pode ser obtida das considerações de conservação de massa (Fig. 3.2) como:

$$C_1 = k^*C + (1 - k^*)C_0. \quad (3.86)$$

Onde k^* é a fracção em massa da mistura que reage. Analisando a Eq. (3.86) podemos estabelecer que C_1 pode ser obtido a partir da interpolação linear entre C_0 e C . Assim plotando C_0 , C e C_1 como mostrado na Fig. 3.3, pode-se estabelecer que o processo total poderia ser subdividido em 2 passos. Na Fig. 3.3 eles são marcados com os números I e II:

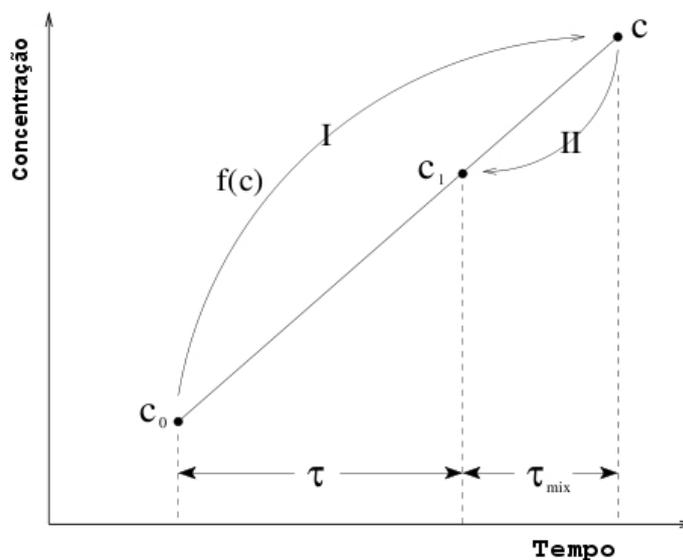


Figura 3.3 - Passos do procedimento reação/mistura

- I - A concentração inicial na zona de reação muda de C_0 para C quando esta reage,
 II - A mistura reativa C é misturada com a mistura não reativa C_0 , pela turbulência, dando como resultado a concentração média C_1 .

Então C_1 é o valor inicial para o passo seguinte. O tempo entre C_0 e C_1 deve ser o passo de integração τ . A mistura gerada pela turbulência é o tempo entre C e C_1 , chamado aqui de tempo característico τ_{mix} . O tempo para a reação total para o caminho I segundo a Fig. 3.3 poderia ser assim considerado como sendo incrementado pelo tempo de mistura desde τ até $\tau + \tau_{mix}$.

A partir da Fig. 3.3 a seguinte relação pode ser estabelecida, assumindo que a forma da curva é igual ao da taxa de reação na zona de reação C :

$$\frac{C_1 - C_0}{\tau} = \frac{C - C_1}{\tau_{mix}} = f_m(C). \quad (3.87)$$

Esta equação está de acordo com a principal hipótese de aproximação de flamelet estacionário (KLIMENKO; BILGER, 1996). Rearranjando a equação (3.87) com a equação (3.86) teríamos:

$$C_1 = k^*C + (1 - k^*)C_0, \quad k^* = \frac{\tau}{\tau + \tau_{mix}}. \quad (3.88)$$

A equação (3.88) claramente estabelece que se o passo de integração τ é maior que o tempo de mistura turbulenta τ_{mix} , $k^* \approx 1$, então muito do que sai fora do reator seria da zona de reação. Tendo estabelecido a fração reativa k^* , faltaria eliminar o parâmetro incógnita C para obter C_1 .

Reordenando o termo fonte químico na equação de transporte de espécies:

$$\begin{aligned}
f_m(C) &= \sum_{r=1}^{N_r} f_m^r = M_m \sum_{r=1}^{N_r} f_m^r (\vartheta''_{mr} - \vartheta'_{mr}) \left(k_f^r \prod_{s=1}^{N_s} C_s^{\vartheta'_{sr}} - k_b^r \prod_{s=1}^{N_s} C_s^{\vartheta''_{sr}} \right) \\
&= M_m \sum_{r=1}^{N_r} f_m^r \underbrace{\left(\vartheta''_{mr} k_f^r \prod_{s=1}^{N_s} C_s^{\vartheta'_{sr}} + \vartheta'_{mr} k_b^r \prod_{s=1}^{N_s} C_s^{\vartheta''_{sr}} \right)}_{\xi_1} \\
&\quad - M_m \sum_{r=1}^{N_r} f_m^r \underbrace{\left(\vartheta''_{mr} k_b^r \prod_{s=1}^{N_s} C_s^{\vartheta'_{sr}} + \vartheta'_{mr} k_f^r \prod_{s=1}^{N_s} C_s^{\vartheta''_{sr}} \right)}_{\xi_2} \\
&= \sum_{r=1}^{N_r} (\xi_1^r - \xi_2^r) = \xi_1 - \xi_2.
\end{aligned} \tag{3.89}$$

Sendo que ξ_1 e ξ_2 são ambos positivos. Na equação (3.89) a taxa de reação é avaliada na zona de reação na condição C . No entanto esta informação para C é de sub-malha. A solução teria que vir a partir de alguma variável conhecida das grandes escalas.

Usando expansão em série de Taylor teríamos:

$$f_m(C) = f_m(C_1) + \frac{\partial f_m}{\partial C}(C - C_1) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 f_m}{\partial C^2}(C - C_1)^2. \tag{3.90}$$

Os elementos da diagonal $\partial^2 f_m / \partial C^2$ são zero e os elementos fora da diagonal são desprezíveis. Desta forma, nenhum termo da série de expansão de Taylor contém alguma derivada maior do que segunda ordem, além de considerar que o termo dominante no Jacobiano é relativo à espécies químicas i.e. $\partial f_m / \partial C_r$. O tempo químico é então determinado a partir do elemento Jacobiano:

$$\frac{1}{\tau_c} = -\frac{\partial f_m}{\partial C_r}. \tag{3.91}$$

A equação (3.90) pode ser então escrita da seguinte forma:

$$f_m(C) = f_m(C_1) - \frac{C - C_1}{\tau_c}. \tag{3.92}$$

Ao substituir C em (3.92) da equação (3.88) obtemos:

$$\frac{C_1 - C_0}{\tau} = f_m(C) = f_m(C_1) - \frac{1}{\tau_c} \left[\left(\frac{C_1}{k^*} - \frac{1 - k^*}{k^*} C_0 \right) - C_1 \right], \tag{3.93}$$

O que leva a:

$$\frac{C_1 - C_0}{\tau} = f_m(C_1) - \frac{1}{\tau_c k^*} (C_1 - k_1^* - (1 - k^*)C_0) = f_m(C_1) - \frac{1 - k^*}{\tau_c k^*} (C_1 - C_0). \quad (3.94)$$

Agrupando o termo $(C_1 - C_0)$ ficaríamos com:

$$\left(\frac{1}{\tau} - \frac{1 - k^*}{\tau_c k^*} \right) (C_1 - C_0) = f_m(C_1). \quad (3.95)$$

Depois de manipular o lado esquerdo da equação (3.95) a equação ficaria da seguinte forma:

$$\left(\frac{1}{\tau} - \frac{\tau_{mix}}{\tau_c \tau} \right) (C_1 - C_0) = \frac{C_1 - C_0}{\tau} \frac{\tau_c + \tau_{mix}}{\tau_c} = \frac{C_1 - C_0}{\tau} \frac{1}{k} = f_m(C_1). \quad (3.96)$$

Tendo finalmente a seguinte expressão:

$$\frac{C_1 - C_0}{\tau} = k f_m(C_1), \quad (3.97)$$

onde

$$k = \frac{\tau_c}{\tau_c + \tau_{mix}}, \quad (3.98)$$

Resumindo:

$$f_m(C) = k f_m(C_1). \quad (3.99)$$

Esta é a correlação para o termo da fonte química da sub-malha baseada em informação resolvida. $f(C_1)$ é tratada implicitamente pois usa informação do passo do tempo seguinte.

Os processos de intercâmbio entre a parte fresca, a mistura não reativa e os gases queimados são contabilizados pelo tempo característico τ_{mix} .

Existe uma ampla faixa de escalas em escoamento turbulento, desde as grandes escalas até o nível das escalas de Kolmogorov e para contabilizar todas essas diferentes escalas, usando unicamente um único valor característico, é sem duvida uma grande simplificação. A pergunta aqui é, qual é a base de representação de τ_{mix} ? Estudos foram realizados por [Kjälman et al. \(2000\)](#) para três diferente formas de comparação com escalas de tempo. A primeira em relação à escala de tempo de Kolmogorov:

$$\tau_k \sim \left(\frac{\mu}{\rho\varepsilon} \right)^{1/2}. \quad (3.100)$$

A segunda em relação à escala de tempo de Taylor:

$$\tau_t \sim k/\varepsilon. \quad (3.101)$$

E a terceira em relação à média geométrica da escala de tempo de Kolmogorov e Taylor:

$$\tau_{kC} \sim \sqrt{\tau_k \tau_C}. \quad (3.102)$$

Conforme proposto por [Karlsson e Chomiak \(1995b\)](#).

Kjälman reportou que a aproximação de Karlsson e Chomiak deu resultados melhores que a proposta usando só o tempo de Kolmogorov. Mas os melhores resultados foram aqueles obtidos utilizando a escala de tempo de Taylor. Estes resultados estão em concordância com os resultados obtidos por [Nordin \(2001\)](#)

A principal diferença para o modelo implementado neste trabalho e o modelo com abordagem RANS está em como determinar o tempo τ_{mix} da Eq. (3.103). Ele é obtido a partir dos valores para k e ε que são calculados pelo modelo de sub-malha turbulento, calculado com a metodologia de grandes escalas e discutido no Cap. 4.

$$\tau_{mix} = C_{mix} \frac{k}{\varepsilon} \quad (3.103)$$

Um valor de 0.005 é usado para C_{mix} que é uma constante. Ela pode variar entre 0.001 a 0.3, dependendo do tipo de escoamento assim como do mecanismo químico usado.

4 MODELOS MATEMÁTICOS

Neste capítulo faremos a descrição do modelo numérico e da metodologia para o tratamento da pressão para uma ampla faixa de números de Mach. Com isto conseguiremos distinguir quais esquemas numéricos estão por implementados do código e quais deles vão ser utilizados nas simulações. A abordagem SGE da turbulência e sua implementação do ponto de vista do OpenFOAM, utilizando a metodologia de programação orientada a objetos, é descrita de forma tal que pode ser usada a partir de bibliotecas padrões presentes no OpenFOAM para o modelo de combustão com chama não pre-misturada.

4.1 O Código OpenFoam

O objetivo desta seção é fazer uma pequena introdução aos principais aspectos do OpenFOAM como código de suporte para simulações de CFD. O OpenFOAM, de fato, não foi projetado para ser um código tipo caixa preta, pronto para usar, mesmo que ele possa ser usado como um pacote de simulação padrão. A finalidade do OpenFOAM é oferecer um suporte aos programadores de CFD na construção de seus próprios códigos, tendo como núcleo principal apenas bibliotecas de C++.

4.1.1 Introdução a C++

Uma pequena introdução a C++ é colocada, destinando-se grande parte desta seção a descrever as metodologias de programação suportadas pela linguagem e algumas das ferramentas para torná-las possível. Tais metodologias são tecnicamente chamadas de paradigmas de programação. Suporte para um paradigma de programação não significa apenas permitir aquele estilo de programação e sim proporcionar facilidades para fazer tal paradigma conveniente para usar em termos de facilidade, segurança e eficiência. O suporte não deve ser limitado às instalações da linguagem para usar diretamente o paradigma de programação, mas deve ser estendido para controlar o tempo de compilação, o tempo de execução e cheque.

Os paradigmas de programação mais comuns são rapidamente descritos:

- **Objetos.** - São coisas do mundo real ou imaginário que podemos de alguma forma identificar, como uma pedra, uma caneta, um copo. O objeto interage com o meio e, em função de excitações que sofre, realiza determinadas ações que alteram o seu estado.
- **Classe.** - A classe contém toda a descrição da forma do objeto, é um molde

para a criação do objeto, é uma matriz geradora de objetos.

- Programação modular (encapsulamento). - Também conhecida como o princípio de ocultamento de dados, ela está relacionada com a subdivisão dos programas em módulos sendo que os dados estão escondidos dentro deles (caixa preta). Esta necessidade reflete um aumento constante no tamanho do programa.
- Abstração de dados. - Este paradigma trata com dados tipo usuário pré-definido. Os tipos de dados adequados para o problema são novamente definidos fornecendo um conjunto completo de operações para cada tipo de usuário. Na conexão tem algo fundamental para se ter em conta, são os conceitos de operador de sobrecarga e polimorfismo ou também chamado de operador estático. Não é necessário recompilar programas originais, adicionando novos tipos. Apenas a nova vinculação é necessária para expor as novas mudanças juntamente com a antiga aplicação.
- Programação orientada a objetos. - O conceito introduzido com este paradigma é um conceito de herança em conexão com hierarquia de classes. Classes de base são definidas como a estrutura comum e, em seguida, as especializadas em classes derivadas. Isso pode realmente ser feito mesmo com o paradigma anterior, mas agora a possibilidade de compartilhamento de (herança) membros de base para classe derivada é introduzida.
- Programação genérica. - o objetivo é conseguir um algoritmo de parametrização de tal modo que ele possa trabalhar para uma variedade de tipos adequados de estruturas de dados. A programação genérica apresenta o conceito de contêiner: classes que podem conter uma coleção de elementos de diferentes tipos.

O C++ foi projetado para suportar abstração de dados, programação orientada a objetos e programação genérica, além de técnicas tradicionais de programação C, tais como programação procedural e modular. Isto não foi concebido para forçar um determinado estilo de programação para todos os usuários (STOURSTROUP, 1997).

Para esclarecer os conceitos acima apresentados, é necessário definir algumas propriedades deles. Nos referimos a: herança, polimorfismo e contêiner.

Polimorfismo é a capacidade de decidir na execução, qual das várias funções de superclasse deve ser chamada para desenvolver a hierarquia de classe.

Herança é a capacidade que tem uma classe filha (subclasse) de herdar recursos, propriedades ou atributos de sua classe pai (superclasse).

Pensando em contêiner o melhor exemplo é uma lista. As listas são basicamente coleções de elementos armazenados em uma fila. É possível definir uma lista de inteiros, bem como uma lista de pessoas, o que significa que a classe de reconhecimento não está vinculada com o tipo de objetos que ele está listando. É comum referir-se a contêiner como templates. Templates são mecanismos de compilação temporal de modo que seu uso resulte em nenhuma sobrecarga de tempo de execução comparada com o código escrito manualmente (DAVIS, 2005).

4.1.2 O Modelo Numérico

O código OpenFOAM, que significa Operação e manipulação de campos de suas siglas em inglês *Field Operation And Manipulation*, é um código de tipo aberto, como é chamado na comunidade de CFD. Ele tem distribuição gratuita e foi lançado pela OpenCFD Ltd. (OPEN SOURCE CFD, 2010), agora comprada pela Silicon Graphics Inc. SGI. O código foi desenvolvido em C++ orientado a objetos e serve como uma ferramenta de simulação numérica para mecânica do contínuo. Diferentemente dos códigos tipo caixa preta, o OpenFOAM é capaz de suportar todas as características acima discutidas, típicas de programação C++: permite a construção de novos tipos de dados específicos para o problema a ser resolvido (ou seja, uma classe virtual para o modelo de turbulência com funções virtuais, como ϵ , k , μ_t , etc ...), a agregação de dados e operações em classes hierárquicas, previne corrupções acidentais (ou seja, uma classe base para armazenar dados de malha e uma classe desenvolvida para aderir-los), uma sintaxe natural para as classes definidas de usuários (operador ou seja, sobrecarga) e que facilmente permite a reutilização de código para as operações equivalentes em diferentes tipos (por exemplo, templates) (JASAK, 1996; JASAK et al., 2004; JURETIC, 2004).

Entrando mais em detalhe nos procedimentos que OpenFOAM contém, no sentido de ajudar a programação em CFD, a primeira e mais importante é que esta ferramenta implementa operadores diferenciais para discretizar equações diferenciais parciais (EDP). Cada termo de uma EDP é representado individualmente por classes de funções estáticas. Esses operadores denominados do tipo implícito e explícito de segunda a quarta ordem são discretizados em Volumes Finitos (VF) no espaço tridimensional para qualquer tipo de coordenada.

Operadores diferenciais podem ser tratadas no código como a classe "cálculo de

volumes finitos”(FVC) e a classe ”método de volumes finitos”(FVM). A primeira abordagem (FVC) realiza derivadas explícitas retornando um campo geométrico. O segundo (FVM) obedece a uma derivação implícita, convertendo a expressão em uma matriz de coeficientes. A idéia mantida é pensar em equações diferenciais parciais em termos de uma soma de operadores diferenciais únicos que podem ser discretizados separadamente, com esquemas de discretização diferentes. A seguir, apresenta-se um operador diferencial:

$$\begin{aligned}
 fmv :: ddt &= \frac{\partial}{\partial t}, \\
 fmv :: d2dt2 &= \frac{\partial^2}{\partial t^2}, \\
 fmv :: div &= \sum_i \frac{\partial}{\partial t_i}, \\
 fmv :: laplacian &= \sum_i \frac{\partial^2}{\partial t_i^2}.
 \end{aligned}
 \tag{4.1}$$

O tratamento de termos fontes é feito através de `fvm::Sp` e `fvm::Susp` que pode ser implícito ou explícito, dependendo do sinal do termo fonte. Como pode ser visto na equação 4.1 o divergente, o laplaciano e outros operadores são descritos de maneira muito simples e implementados no OpenFOAM.

Construir diferentes tipos de equações diferenciais parciais é agora apenas uma questão de combinar de um modo diferente o mesmo conjunto básico de operadores diferenciais. Para dar um exemplo da capacidade de alto nível do código, teremos de considerar uma equação padrão como a da quantidade de movimento:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \mathbf{U}) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U} \mathbf{U}) - \nabla \cdot (\mu \nabla \mathbf{U}) = -\nabla p
 \tag{4.2}$$

Esta pode ser implementada em uma linguagem surpreendentemente quase natural que está pronta para compilar em C++:

```

solve
(
  fvm::ddt(rho, U)
  + fvm::div(phi, U)
  - fvm::laplacian(mu, U)
  ==
  - fvc::grad(p)
);

```

Esse exemplo mostra claramente a modelagem em termos de objetos (\mathbf{U} , ρ , ϕ , etc.) definidos como um campo de valores, sem importar sua dimensão ou tamanho. Apenas para esclarecer melhor, por exemplo, o campo de velocidade é definido em cada centróide da célula e nos centros das faces de fronteira, com suas dimensões dadas e os valores calculados para cada direção e representada apenas por um único objeto \mathbf{U} da classe `GeometricField`.

Uma característica importante permitida pela programação orientada a objetos é a verificação dimensional. Quantidades físicas de objetos são construídas fazendo referência às suas dimensões permitindo que apenas operações dimensionais válidas possam ser realizadas, evitando erros e permitindo uma mais fácil compreensão, o que traz diretamente como consequência uma fácil depuração.

Uma característica importante do OpenFOAM é a flexibilidade para manipular diferentes tipos de malhas. Seu mecanismo de malha nativo pode, de fato, lidar com cada malha de poliedros arbitrários delimitados por polígonos arbitrários (MANGANI et al., 2007), ver Fig. 4.1

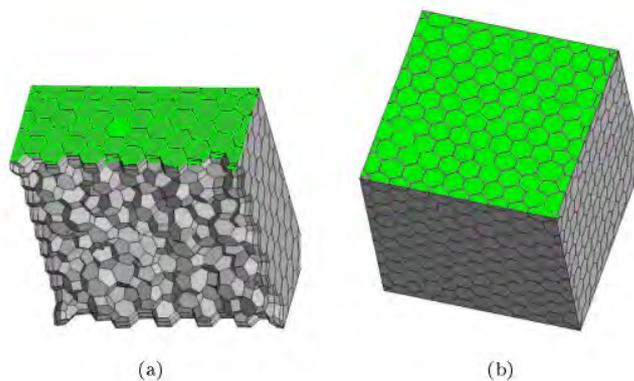


Figura 4.1 - Malha não estruturada

O OpenFOAM foi pensado realmente não só como um código pronto para usar, mas para ser o mais flexível possível na definição de novos modelos e esquemas de maneira simples. Sua força está no fato de estar aberto não só em termos de código fonte, mas, o que é mais importante, em sua estrutura interna e desenho hierárquico, dando a oportunidade de estender completamente a sua capacidade. Além disso, a possibilidade de utilizar bibliotecas de alto nível contendo um conjunto de modelos para a mesma finalidade que se referem à mesma interface, garantindo uma harmoniosa e eficiente funcionalidade no solver incorporado. Assim novos modelos podem

ser adicionados e outros presentes no código melhorados.

4.2 Implementação

A dinâmica dos fluidos é um ramo significativo da mecânica do contínuo e cobre uma variedade de casos, tais como escoamento compressível, incompressível, multifásicos e de superfície livre, assim como escoamentos que envolvem reações químicas, transporte de espécies, mudança de fase e efeitos eletromagnéticos. Todos esses tipos de escoamentos podem ser descritos por um sistema de equações diferenciais parciais do tipo:

$$\frac{\partial \rho \mathbf{Q}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U} \otimes \mathbf{Q}) - \nabla \cdot \rho \mathcal{D} \nabla \mathbf{Q} = S_p \mathbf{Q} + S_q. \quad (4.3)$$

Onde \mathbf{U} é a velocidade do fluido, ρ a densidade e \mathbf{Q} é qualquer propriedade do escoamento, tal como a concentração de espécies. Na equação 4.3 pode ser identificada a derivada temporal ($\frac{\partial \rho \mathbf{Q}}{\partial t}$), o termo convectivo $\nabla \cdot (\rho \mathbf{U} \otimes \mathbf{Q})$, o termo difusivo $\nabla \cdot \rho \mathcal{D} \nabla \mathbf{Q}$ e os termos fonte $S_p \mathbf{Q} + S_q$. Um exemplo simples é dado pela Eq. (3.3), que descrita na forma da Eq. (4.3), é:

$$\frac{\partial \rho \mathbf{U}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U} \otimes \mathbf{U}) - \nabla \cdot \mu \mathbf{D} = -\nabla p. \quad (4.4)$$

Onde

$$\mathbf{D} = \frac{1}{2}(\nabla \mathbf{U} + \nabla \mathbf{U}^T). \quad (4.5)$$

Os efeitos não lineares embutidos nessas equações são significativos. A maior parte dos problemas de escoamentos de fluidos pode ser estudada com o uso de métodos computacionais envolvendo discretização do domínio, seguida de uma solução numérica das equações do balanço. As técnicas agora predominantes para a solução desses problemas são o método dos elementos finitos (MEF) (FLETCHER, 1991) e o método dos volumes finitos (MVF) (FERZIGER; PERIC, 2002). Na técnica dos volumes finitos, que é usada neste trabalho, o domínio computacional é dividido em um conjunto de volumes discretos δV_i que cobre todo o domínio computacional D sem se sobrepor. As equações são integradas volumetricamente para cada volume finito δV_i . O teorema de Gauss é usado para converter o termo de divergência da Eq. (4.4) em um termo de fluxo na superfície, reduzindo o problema da discretização desses

termos a encontrar uma aproximação diferente para o fluxo na superfície do volume de controle partindo de um valor conhecido na parte central da célula computacional (*cell – center*). Outras derivadas espaciais são resolvidas de um modo similar. Esta forma de tratamento converte as equações em um conjunto de equações diferenciais ordinárias. As derivadas temporais podem ser discretizadas de maneira simples usando uma aproximação em diferenças finitas. Isto resulta em um conjunto de equações algébricas que, quando é linearizado, pode ser descrito na forma de matriz

$$A\psi = \mathbf{Q}. \quad (4.6)$$

Onde A é uma matriz de bloco do tipo esparsa, que pode ser invertida para resolver o sistema. O termo não linear na Eq. (4.4) requer um método iterativo para solucionar o sistema. O código usa o método segregado descrito mais adiante.

4.2.1 Implementação do Campo Tensorial

A maioria dos problemas de dinâmica dos fluidos pode ser descrito usando cálculo de tensores de ordem igual ou menor que 2. Assim temos os escalares, os vetores e os tensores de segunda ordem. Três classes foram criadas no OpenFOAM: *scalarField*, *vectorField* e *tensorField*. A maneira de relacionar a interface do campo do tensor com o operador diferencial se descreve a seguir.

No código o campo da classe tensor é diferente do campo tensor matemático por que ele inicialmente não contém informação posicional. Essas classes são simplesmente listas ordenadas dos tensores e também operações de ordem pontual. Os operadores de implementação incluem soma, subtração, multiplicação por um escalar, e aqueles formados por produtos internos e os produtos de vetores que resultem em vetores e tensores respectivamente. A implementação em C++ é feita utilizando os operadores descritos anteriormente em 4.1.2.

O passo seguinte para a classe tensor é referido como “campo geométrico do tensor” e contém a informação de posição que não possuía no passo anterior. Novamente se tem três classes base para os três tipos de tensores implementados: *volScalarField*, *volVectorField* e *volTensorField*. Para relacionar essas classes é necessário encapsulamento e informação da métrica para diferenciar melhor a operação entre as classes. Isto é proporcionado com referência à classe grade *fvMesh*. Essa classe contém informação dos limites e passos de tempo prévios, necessários para a discretização temporal e um conjunto de informações dimensionais. No total são sete dimensões do

sistema internacional armazenadas e todas as operações algébricas implementadas acima são dimensionalmente checadas na execução. Como resultado, é impossível levar adiante uma operação dimensionalmente incorreta.

Dois tipos de classes tensor derivadas são implementadas: *finiteVolumeCalculus* ou *fvc*, que representa uma avaliação explícita do dado predeterminado e retorna um campo de tensor geométrico, e o *finiteVolumeMethod* ou *fvm*, que retorna uma representação matricial das operações, que pode ser resolvida para a variável dependente em um passo de tempo. A classe *fvc* unicamente implementa funções membro estáticas que mapeiam o campo de um tensor a outro. As funções membro destas classes implementam o volume finito equivalente a vários operadores diferenciais. Por exemplo, a expressão:

$$vorticity = 0.5 * fvc :: curl(\mathbf{U}); \quad (4.7)$$

calcula a vorticidade de um campo vetorial \mathbf{U} como $1/2\nabla \times \mathbf{U}$. Todas as possíveis operações tensoriais são implementadas em FOAM.

4.2.2 Implementação de Classes Equações Diferenciais Parciais

Para sistemas lineares o método que contem a classe FVC, corresponde diretamente a um operador diferencial tensorial. Ele mapeia os campos de tensor a tensor. Esses operadores diferenciais levam a matrizes do tipo esparsa que para malhas do tipo não estruturadas tem uma composição complexa, requerendo direcionamento indireto e uma solução apropriada. Em FOAM é usado o método do gradiente conjugado e uma ampla gama de pré condicionadores, como o de Cholesky incompleto (ICCG) (JACOBS, 1980) e diagonal incompleto rápido FDIC, para a resolução de matrizes simétricas. Para matrizes assimétricas é utilizado o método do gradiente bi-conjugado Bi-CGSTAB (VORST, 1992) e o diagonal incompleto entre outros. A matriz inversa é implementada usando faces completas direcionadas (JASAK, 1996), um método no qual elementos da matriz são indexados de acordo com a face da célula com aquelas faces que estão associadas. Ambas as soluções de estado estacionário e transiente dos sistemas de equações são obtidas por marcha no tempo, com o passo do tempo sendo selecionado para garantir a dominância diagonal das matrizes, como é requerida na solução.

A notação matemática padrão pode ser usada para criar a representação matricial das equações diferenciais. Classes de equações objeto chamadas *fvMatrixScalar*,

fvMatrixVector, etc., são definidas para manejar e direcionar o resultado, alocar o armazenador, eleger o solver e obter a solução. Essas classes armazenam as matrizes que representam as equações. Os operadores matemáticos $+$, $-$ são novamente tipo sobrecarga, para adicionar e subtrair matrizes objetos. Todas as derivadas tensoriais são implementadas como funções membro da classe *finiteVolumeMethod* (fvm), a qual constrói adequadamente as matrizes usando a discretização em volumes finitos.

Considerações numéricas são relevantes para decidir a forma exata de muitas funções membro. Por exemplo, em fvm a divergência é representada pela superfície integral sobre o volume de controle δV_i . Assim a função divergência seria $div(phi, \mathbf{Q})$, onde phi é o fluxo, um campo onde os valores estão armazenados nas faces da célula, e \mathbf{Q} é uma quantidade sendo transportada pelo fluxo, onde os valores estão alocados no centro das células. Por esta razão esta operação não pode ser representada por uma função da forma $div(phi * \mathbf{Q})$. O operador laplaciano é implementado com simples chamado dos operadores ∇ e $\nabla \cdot$.

Varias formas de implementar o termo fonte tem sido adotadas. Um termo fonte pode ser explicito, nesse caso um tipo de equação objeto especial, com entradas para unicamente o vetor fonte \mathbf{Q} da Eq. (4.6). Ou pode ser do tipo implícito, com entradas da matriz M . Na equação 4.3 esses termos são S_p e $S_p \mathbf{Q}$, respectivamente. A construção de um termo fonte explícito é realizada por operadores $+$ e $-$. Para o caso do termo fonte implícito, a implementação é por meio da função $Sp(a, \mathbf{Q})$. Assim, especificamos a variável dependente \mathbf{Q} para ser resolvida. Desta forma é possível construir um sistema de matrizes apropriado para qualquer equação por adição de termos individuais. Como exemplo consideremos a equação de conservação de massa:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\phi) = 0. \quad (4.8)$$

Onde $\phi = \rho \mathbf{U}$. O sistema de matrizes pode ser escrita da seguinte forma:

```
fvMatrixScalar rhoEq
(
  fmv::ddt(rho)+fvc::div(phi) )
;
```

Onde o fluxo de velocidade phi foi avaliado previamente e resolvido pelo chamado da subrotina `rhoEq.solve()`; que avança o valor de ρ um passo de tempo. Onde, necessariamente, a tolerância a solução pode ser explicitamente considerada. Finalmente,

o operador `==` é definido para representar igualdade entre os dois lados de uma equação.

4.2.3 Topologia de Malha e Condições de Contorno

A informação geométrica é passada para o campo geométrico pela classe `fvMesh`, a qual consiste de uma lista de vértices, uma lista de células internas e uma lista de parcelas limites (que são também listas de faces das células). Os vértices especificam a geometria da malha. No entanto a topologia de qualquer célula, seja esta unidimensional (1D)(uma linha), bidimensional (2D)(uma face) ou tridimensional (3D) (uma célula), é especificada como uma lista ordenada de índices junto com uma forma primitiva descrevendo a relação entre o ordenamento da lista e os vértices na forma. Essas formas primitivas são definidas para cada tempo e deste modo as faixas dessas formas primitivas podem ser estendidos facilmente. No entanto para tetraedros (quatro vértices), pirâmides (cinco vértices), prismas (seis vértices) e hexaedros (oito vértices) é necessário cobrir mais eventualidades. Ou seja cada forma primitiva n -dimensional conhece a sua decomposição em $(n-1)$ dimensões, informação usada para direcionar as listas ou a conectividade de célula a célula.

As condições de contorno são consideradas como uma parte integral do campo assim como também uma parte extra. A classe `fvMesh` incorpora um conjunto de parcelas que definem o limite exterior do domínio ∂D . Cada parcela traz uma condição de contorno, que é passada para cada operador `fvm` de uma maneira apropriada. Diferentes classes de parcelas tratam os cálculos de valores fixos, gradiente fixo, gradiente zero, simétrico, cíclico e outras condições de contorno, todas derivadas da classe `patchField`. Todas as condições de contorno têm que proporcionar o mesmo tipo de informação, ou seja, elas têm a mesma interface mas diferente implementação, o uso do polimorfismo é fundamental nesta aplicação para o código. A partir desses elementos básicos as condições de contornos são situadas em entradas, saídas, paredes, etc.

4.2.3.1 Condição de contorno cíclica

Em muitos casos o custo computacional para cálculo de geometrias complexas é muito grande. Dependendo do problema em estudo pode ser possível impor periodicidade entre a entrada e a saída do domínio de modo a modelar o escoamento de forma menos custosa. Esta técnica é frequentemente utilizada em SGE e SND para estudos de turbulência (FUREBY et al., 1997c).

No código OpenFoam esta condição é usada da seguinte forma, habilitam-se duas parcelas para serem tratadas como se estivessem fisicamente conectadas (usada para geometrias repetidas), uma parcela cíclica divide as faces em dois e estabelece uma comunicação entre elas como mostrado na Fig.4.2. Cada par de faces em comunicação deve ter a mesma área mais não necessariamente a mesma orientação.

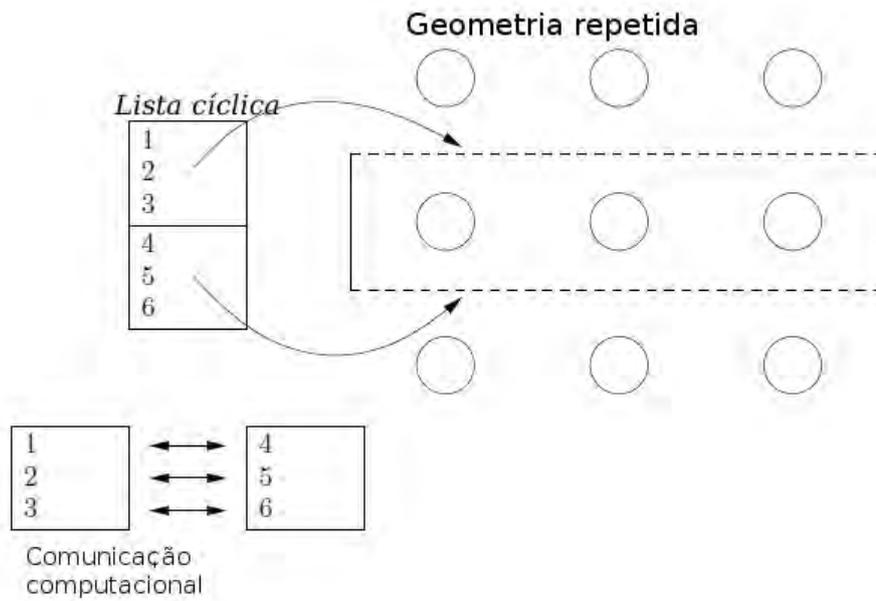


Figura 4.2 - Geometria repetida usando condição de contorno cíclica.

4.2.3.2 Condição de contorno sintética

Um método comumente usado para gerar turbulência na entrada do domínio é o de turbulência sintética. Esse método gera um espectro turbulento artificial na entrada do domínio. A turbulência é analisada por uma função harmônica. Assim, as flutuações turbulentas são representadas por uma soma de funções lineares. No código estas são relacionadas a seno e coseno. Também são necessários coeficientes que representam a energia contida em cada modo. Assim pode-se usar transformadas inversas de Fourier para o sistema e escrever a flutuação turbulenta do modo seguinte:

$$u'_x(Y) = u_m \sum_{i=1}^N a'_i \cos(ikY + \phi'_i). \quad (4.9)$$

Onde u'_x é a componente da velocidade da flutuação, Y a coordenada transversal para a condição de entrada, a' e ϕ' são os coeficientes a serem determinados por um processo aleatório (função harmônica). Isto gera um perfil flutuante arbitrário que pode ser somado ao perfil da velocidade média para gerar um perfil do escoamento instantâneo.

$$u_x(X, t) = \bar{u}_x(Y) + u'_x(Y, t) = \bar{u}_x(Y) + u_m \sum_{i=1}^N a'_i(t) \cos(ikY + \phi'_i(t)) \quad (4.10)$$

4.3 Metodologia Para o Tratamento da Pressão Para uma Faixa Ampla de Número de Mach

Quando calculamos o conjunto de equações de conservação e falamos de equações acopladas, consideramos que os coeficientes de uma equação dependem da solução das outras equações. Esses acoplamentos resultam em sistemas não lineares e a solução destas não linearidades leva a processos iterativos. Considerando como exemplo a expressão final para as equações de Navier-Stokes:

$$A_{[m \times n, m \times n]} \psi_{[m \times n]} = \mathbf{Q}_{[m \times n]}, \quad (4.11)$$

Onde $\psi_{[m \times n]}$ é um vetor com dimensão igual ao numero de células n vezes o número de incógnitas m . Por razões de custo computacional, este sistema é usualmente resolvido de modo sequencial e não de uma vez só. Em outras palavras o sistema de matrizes é decomposto em outros sistemas menores para cada equação e assim essas matrizes são resolvidas em sequência para o escalar de referência:

$$\begin{aligned} A_{\rho[n, n]} \psi_{\rho[n]} &= \mathbf{Q}_{\rho[n]}, \\ A_{u[n, n]} \psi_{u[n]} &= \mathbf{Q}_{u[n]}, \\ A_{v[n, n]} \psi_{v[n]} &= \mathbf{Q}_{v[n]}, \\ A_{w[n, n]} \psi_{w[n]} &= \mathbf{Q}_{w[n]}, \\ A_{p[n, n]} \psi_{p[n]} &= \mathbf{Q}_{p[n]}, \\ A_{h[n, n]} \psi_{h[n]} &= \mathbf{Q}_{h[n]}, \end{aligned} \quad (4.12)$$

Desta forma, é claro que o acoplamento entre as diferentes equações deve ser tratado com outra estratégia. Um algoritmo iterativo para relacionar as diferentes equações é necessário para alcançar a convergência. Como se pode supor, uma grande variedade

de algoritmos tem sido proposta para organizar os passos no qual o processo deve ser dividido.

4.3.1 Acoplamento Pressão Velocidade

As duas principais classes de método de solução das equações do escoamento reativo são: o método em base da pressão e o método em base da densidade. Cada um desses métodos é naturalmente aplicado para o escoamento apropriado. Para altos números de Mach, com escoamento compressível, o método baseado na densidade é usado e para baixos números de Mach, para escoamentos quase incompressíveis, o método baseado na pressão é o apropriado.

A diferente natureza das equações de conservação para casos de escoamentos subsônicos ou supersônicos faz com que o uso desses métodos seja uma tarefa difícil para zonas que ficam fora da faixa do número de Mach de referência. Como se sabe as equações de Navier-Stokes para escoamento compressível são de natureza parabólicas-hiperbólicas mas as equações para escoamento incompressíveis são do tipo elíptico-parabólico.

Como sabemos, a maioria dos escoamentos em dispositivos aeronáuticos e aeroespaciais entram na faixa compressível. Isto significa que escoamentos com diferentes números de Mach estão presentes simultaneamente no mesmo domínio. Esta situação torna a aproximação da solução uma tarefa complexa, levando em conta que este tipo de escoamento não se enquadra completamente em nenhuma das categorias citadas anteriormente. Nesse sentido, devemos construir soluções que abrangem ou estendem a faixa de aplicabilidade ao máximo, no melhor dos casos para escoamentos para todos os números de Mach.

Um método proposto com a finalidade de fazer mudar o comportamento incompressível nas equações de Navier-Stokes, é a denominada técnica de compressibilidade artificial: Uma falsa derivada temporal é adicionada na equação de conservação de massa, convertendo-a em hiperbólica. Essa técnica de marcha no tempo, foi desenvolvida para que a equação também represente a forma compressível. Este método é aplicado para soluções do tipo estado estacionária e requer um conjunto diferente de variáveis para a parte compressível e outra para a parte incompressível do escoamento, pois a solução da equação tem dois diferentes caminhos possíveis.

4.3.2 Problemas Associados à Formulação Baseada na Densidade

Nas equações de conservação o fluxo total é composto por um termo convectivo e um difusivo. Nelas uma equação de estado para descrever a relação entre variáveis termodinâmicas é necessária. Este conjunto de equações não lineares acopladas deve ser resolvida para as incógnitas ρ , \mathbf{U} , p , h .

Para isto, usualmente se associa a cada equação uma variável: densidade para continuidade, componentes da velocidade para quantidade de movimento e entalpia para energia. A equação de estado pode ser considerada como a equação para a pressão. Para escoamentos compressíveis em baixos números de Mach no entanto, a pressão e a densidade são frequentemente utilizadas e no limite, a densidade é completamente desacoplada da pressão. Por esta razão, nenhuma pressão ou densidade pode ser diretamente associada com a equação de continuidade incompressível e esta assume o papel de uma condição de compatibilidade sobre o campo de velocidade.

Para uma solução sequencial das equações, um mecanismo para acoplar continuidade e quantidade de movimento deve ser obtido. Ou de outra forma, também é possível usar as equações compressíveis totais para escoamentos incompressíveis. Na verdade todos os fluidos são compressíveis e a pressão é sempre relacionada à densidade, apesar da relação ser muito fraca no regime incompressível.

A lei para gases perfeitos para escoamento próximo do incompressível, para o que se considera a velocidade do som constante estabelece que:

$$p = \rho RT = \frac{c^2}{\gamma} \rho \rightarrow \Delta p = \frac{c^2}{\gamma} \Delta \rho. \quad (4.13)$$

Introduzindo valores de referência é possível reescrever a equação acima em sua forma adimensional:

$$\frac{\Delta p}{\rho_0 u_0^2} = \frac{1}{\gamma Ma_0^2} \frac{\Delta \rho}{\rho_0}. \quad (4.14)$$

Esta expressão claramente estabelece que, apesar de pequenas ou infinitesimais, mudanças na densidade ocorram quando o número de Mach tende a zero, a razão sempre é finita e mudanças na pressão podem permanecer grandes. Uma boa discussão do problema descrito acima, em que se associa o uso da densidade como uma variável primária para calcular escoamentos em baixo Mach ou escoamentos mistos

compressíveis e incompressíveis, é apresentada por Karki (1986).

Desenvolver um esquema computacional que abrange toda a faixa de números de Mach, requer um controlador que estabeleça a pressão como variável independente inicial e a densidade como alternativa.

4.3.3 Método Semi-implícito Para Pressão

Uma forma do método segregado é descrito em detalhe a seguir. O algoritmo tem a denominação em inglês *Semi – implicit Method for Pressure Linked Equations* (SIMPLE) e foi publicado pela primeira vez por Patankar e Spalding (1972), sendo um método muito conhecido hoje em dia. Na versão original o método foi desenvolvido para escoamento incompressível ou fracamente compressível. A extensão para toda a faixa compressível será discutida a seguir. A principal idéia é converter a equação da continuidade em uma equação para a pressão, ou corretor da pressão, usando um procedimento tipo predição-correção. A partir da equação de continuidade, que contém a velocidade discretizada, uma conexão para relacionar esta velocidade ao campo de pressão é necessária. A vinculação é a equação de quantidade de movimento.

Se consideramos a equação da quantidade de movimento discretizada nas coordenadas X e Y com notação referida à Fig. 4.3., obtemos:

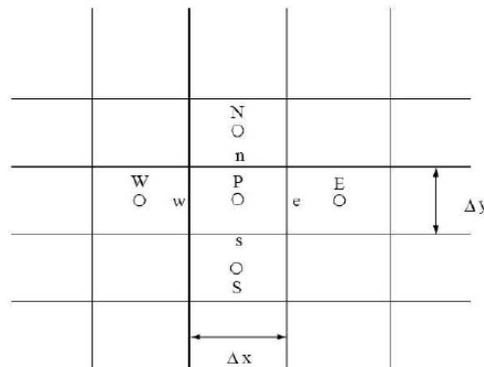


Figura 4.3 - Volume de controle bidimensional.

$$a_e u_e = \sum a_{nb} u_{nb} + (p_W - p_E) \Delta Y + Q_e, \quad (4.15)$$

$$a_n v_n = \sum a_{nb} v_{nb} + (p_S - p_N) \Delta X + \mathbf{Q}_n, \quad (4.16)$$

Para inicializar o cálculo com o método SIMPLE, um campo de pressão p^* é suposto. Então a Eq. (4.15) e (4.16) são resolvidas de forma tal que a distribuição de pressão para se obter o primeiro valor de velocidade suposto para u^* e v^* seria:

$$a_e u_e^* = \sum a_{nb} u_{nb}^* + (p_W^* - p_E^*) \Delta Y + \mathbf{Q}_e, \quad (4.17)$$

$$a_n v_n^* = \sum a_{nb} v_{nb}^* + (p_S^* - p_N^*) \Delta X + \mathbf{Q}_n, \quad (4.18)$$

Um corretor de pressão é agora definido como a diferença entre a pressão corrigida e suposta, e similarmente este procedimento é feito também para os corretores da velocidade:

$$p' = p - p^*, \quad (4.19)$$

$$u' = u - u^*, \quad (4.20)$$

$$v' = v - v^*. \quad (4.21)$$

Subtraindo a Eq. (4.17) da Eq. (4.15) e a Eq. (4.18) da Eq. (4.16), obtemos duas equações corretoras para a pressão e a velocidade:

$$a_e u_e' = \sum a_{nb} u_{nb}' + (p_W' - p_E') \Delta Y, \quad (4.22)$$

$$a_n v_n' = \sum a_{nb} v_{nb}' + (p_S' - p_N') \Delta X, \quad (4.23)$$

Quando os corretores tendem a zero, então a solução converge. Os termos $\sum a_{nb} u_{nb}'$ e $\sum a_{nb} v_{nb}'$ decaem, minimizando o erro quando a convergência é alcançada.

Esta é a grande aproximação do algoritmo SIMPLE e suas consequências serão discutidas nesta seção.

As equações 4.22 e 4.23 são reescritas na seguinte forma:

$$u_e' = (p_W' - p_E') d_e, \quad (4.24)$$

$$v'_n = (p'_S - p'_P)d_n, \quad (4.25)$$

onde $d_e = \Delta Y/a_e$ e $d_n = \Delta X/a_n$. Agora, a continuidade deve ser considerada usando a conservação de massa:

$$\begin{aligned} [F_e - F_w] + [F_n - F_s] = 0 &\Rightarrow [(\rho u A)_e - (\rho v A)_s] = \\ [\rho_e u_e - \rho_w u_w] \Delta Y + [\rho_n v_n - \rho_s v_s] \Delta X = 0. \end{aligned} \quad (4.26)$$

O fluxo de massa F_i é então dividido em duas partes correspondentes às duas componentes da solução exata da velocidade, u^* e u' :

$$[F_e^* - F_w^*] + [F_e' - F_w'] + [F_n^* - F_s^*] + [F_n' - F_s']. \quad (4.27)$$

As equações 4.24 e 4.25 são substituídas na Eq. (4.27) dando:

$$\begin{aligned} F_e^* + \rho_e d_e \Delta Y (p'_P - p'_E) - F_w^* + \rho_w d_w \Delta Y (p'_P - p'_W) \\ + F_n^* + \rho_n d_n \Delta X (p'_P - p'_N) - F_s^* + \rho_s d_s \Delta X (p'_P - p'_S) = 0. \end{aligned} \quad (4.28)$$

Rearranjando a equação acima, obtém-se a equação para o corretor de pressão:

$$A_P p'_P = \sum_{nb} a_{nb} p'_{nb} + b, \quad (4.29)$$

onde:

$$a_E = \rho_e d_e \Delta Y, \quad (4.30)$$

$$a_W = \rho_w d_w \Delta Y, \quad (4.31)$$

$$a_N = \rho_n d_n \Delta X, \quad (4.32)$$

$$a_S = \rho_s d_s \Delta X, \quad (4.33)$$

$$A_P = \sum_{nb} a_{nb}, \quad (4.34)$$

$$b = F_w^* - F_e^* + F_s^* - F_n^*. \quad (4.35)$$

Neste ponto todas as equações necessárias foram deduzidas. Elas devem ser incluídas em um processo iterativo organizado para obter a solução. O algoritmo completo tem as seguintes etapas:

- 1.- Supor um campo de pressões p^* .
- 2.- Discretizar e resolver a equação de quantidade de movimento usando o valor suposto p^* para o termo da pressão. Eq. (4.17) e (4.18) obtendo u^* e v^* .
- 3.- Encontrar o termo fonte de correção de pressão b calculando o balanço de massa com a Eq. (4.35).
- 4.- Discretizar e resolver a equação de correção de pressão Eq. (4.29).
- 5.- Calcular a correção da velocidade utilizando as Eqs. (4.24) e (4.25).
- 6.- Corrigir os campos de velocidade e pressão com as Eqs. (4.19), (4.20) e (4.21).
- 7.- Resolver a equação discreta para cada escalar da equação de continuidade, satisfazendo o campo de velocidade para o termo de convecção.
- 8.- Revisar a convergência: se ela satisfaz o critério estabelecido para o mesmo, se não, usa-se p como um novo p^* e começa-se de novo a partir do passo 2.

Retornando à Eq. (4.22) para entender as consequências de reduzir $\sum_{nb} a_{nb}$, deve se sublinhar que, o resultado fica limitado a taxa de convergência.

Esta redução, de fato, coloca o cálculo da velocidade corrigida sobre o corretor de pressão. Isto levaria a um campo de velocidade satisfazendo a equação da continuidade, mas a uma sobre estimação do campo da pressão. A equação da correção da pressão é de fato suscetível a uma divergência, a menos que uma sobre relaxação seja usada durante o processo iterativo. A sobre relaxação implícita é usualmente preferida por que isto também incrementa o domínio diagonal da matriz. Sendo p' um corretor, seu histórico de convêrgencia não tem nenhum significado em particu-

lar, como consequência p'^{n-1} é muito diferente de p'^n e a relaxação implícita violaria à continuidade. O que é feito para evitar esse obstáculo é relaxar o novo valor para a pressão e não o corretor:

$$p^{novo} = p^* + \alpha_p p' . \quad (4.36)$$

Para evitar superestimções de pressão, as velocidades também são relaxadas. Uma escolha apropriada do fator de sub-relaxação α é essencial para se ter um custo efetivo na simulação. Valores muito altos podem levar a oscilações ou ainda soluções divergentes, no entanto valores pequenos levam a comportamentos extremamente lentos da convergência. Desafortunadamente, valores ótimos de fatores de sub-relaxação são dependentes do escoamento e devem ser buscados para cada caso (MALALASEKERA; VERSTEEG, 1995; MURTHY; MATHUR, 2002).

Outras variantes do mesmo método têm sido propostas no decorrer dos anos. A saber:

- SIMPLER (SIMPLE-Revisado): Usa uma equação de discretização para a pressão para obter p^* a partir de uma suposição inicial dos campos de velocidade v^{**} e de pressão p^{**} (PATANKAR, 1998).
- SIMPLEC (SIMPLE-Consistente): Usa o mesmo algoritmo do SIMPLE mas com uma melhor aproximação da Eq. (4.24) e Eq. (4.25) (DOORMAL; RAITHBY, 1983).
- PISO (Pressure Implicit with Splitting Operators): Este método adiciona um segundo passo corretor ao algoritmo padrão SIMPLE, de modo que $p^{**} = p^* + p'$ é unicamente uma suposição inicial para o segundo passo corretor (ISSA, 1986).

O procedimento para o algoritmo PISO é descrito a seguir:

- 1.- Resolver implicitamente a equação de quantidade de movimento discretizada para o preditor da velocidade utilizando os valores atuais de velocidade e pressão. Para a primeira iteração da pressão usamos o passo de tempo anterior.
- 2.-Calcular os fluxos de massa com base na velocidade do preditor.
- 3.- Construir e resolver a equação de correção-predição para a corrigir a pressão

usando o preditor do campo de velocidade.

4.- Corrigir o fluxo de massa gerando convergência livre. O campo da convergência livre é usado na discretização do termo convectivo no passo seguinte.

5.- Corrigir explicitamente o preditor da velocidade para conseguir convergência livre do campo de velocidade.

6.- Repetir os passos de 2 a 5 usando o novo campo de velocidade como um preditor de velocidade de um modo iterativo. Issa recomenda como mínimo 2 iterações de correção-predição para alcançar uma solução aproximada (ISSA, 1986).

7.- Atualizar as condições limites, avançar um passo no tempo e repetir tudo desde o passo 1.

4.3.4 Grade Colocalizada: Interpolação Rhie-Chow

A correção de Rhie-Chow é um método que utiliza uma grade colocalizada com a finalidade de remover as oscilações na solução, que ocorrem se o gradiente de pressão não depende da célula adjacente. No código OpenFOAM a correção é utilizada no fim de cada iteração PISO antes de corrigir as condições de contorno. Esta técnica proposta por Rhie e Chow (1983), conhecida como interpolação da quantidade de movimento, consiste em definir uma pseudo-velocidade sobre a célula computacional, excluindo o termo de gradiente de pressão. Então a pseudo-velocidade é interpolada linearmente e o gradiente de pressão avaliado diretamente na face é somado. Para estabelecer tal proposta, um domínio unidimensional é considerado para obter a formulação. Começando com a definição da pseudo-velocidade:

$$u_P^0 = u_p + \left(\frac{dl}{A} \nabla p \right)_p = u_p + \left(\frac{P_E - P_W}{2Ap} \right), \quad (4.37)$$

Interpolando linearmente no centro da fase, resulta:

$$u_e^0 = \frac{u_E^0 + u_P^0}{2}, \quad (4.38)$$

para, finalmente, reconsiderar a contribuição da pressão como gradiente na face da célula.

$$u_e^0 = u_e - \left(\frac{dl}{A} \nabla p \right)_e = u_e^0 - \left(\frac{p_E - p_P}{2A_e} \right), \quad (4.39)$$

Substituindo a Eq. (4.37) na Eq. (4.38) e na Eq. (4.39), uma expressão final para a velocidade na face é obtida:

$$u_e = \frac{u_E + u_P}{2} + \frac{1}{2} \left(\frac{p_E - p_W}{2A_P} + \frac{p_P - p_E}{2A_E} \right) - \frac{p_E - p_P}{2A_e} \quad (4.40)$$

Expressões similares podem ser obtidas para as outras faces. Somando todas ao fluxo de massa F_i , fica claro que a dependência explícita sobre os valores da célula não se cancelam com a interpolação.

O interessante desta solução é que o comportamento da equação da continuidade muda ao introduzir esta interpolação, conhecida como esquema de dissipação adicionada. Reordenando a Eq. (4.40) considerando agora $A_p = A_E = A_e$, para o caso de grade uniforme e escoamento uniforme:

$$u_e = \frac{u_E + u_P}{2} + \frac{1}{4A_P} (p_E - p_W + 2p_P) + (p_P - p_E - 2p_E). \quad (4.41)$$

Fazendo a expansão em série de Taylor para a pressão e reorganizando teríamos:

$$\left(\frac{\partial^2 p}{\partial X^2} \right)_P = \frac{p_W - p_E - 2p_P}{\Delta X^2} + O(\Delta X^2). \quad (4.42)$$

Então

$$u_e = \frac{u_E + u_P}{2} + \frac{1}{4A_P} \left(\left(\frac{\partial^2 p}{\partial X^2} \right)_P - \left(\frac{\partial^2 p}{\partial X^2} \right)_E \right) \Delta X^2 = \left(\frac{\partial^3 p}{\partial X^3} \right)_e \Delta X^3. \quad (4.43)$$

Substituindo este resultado na equação de continuidade teríamos:

$$u_e - u_w = \frac{u_E - u_W}{2} - \left(\frac{\partial^3 p}{\partial X^3} \right)_e \Delta X^3 + \left(\frac{\partial^3 p}{\partial X^3} \right)_w \Delta X^3 =$$

$$\frac{u_E - u_W}{2} - \left(\frac{\partial^4 p}{\partial X^4} \right)_P \Delta X^4. \quad (4.44)$$

O resultado é uma aproximação de quarta ordem na equação de continuidade. Aproximações de ordem par são conhecidas na literatura por serem dissipativas. Como consequência um comportamento mais difusivo é esperado com esta implementação (ANDERSON JR., 1995).

4.3.5 Efeitos de Compressibilidade

Para expandir o método proposto para escoamentos compressíveis a dependência da densidade sobre a pressão deve ser explicitamente calculada e incluída na equação da correção da pressão. Esta inclusão é essencial para estender a aplicabilidade do método com escoamento para altos números de Mach, longe da zona de compressibilidade fraca.

A idéia é considerar na equação 4.19 a densidade como variável principal, sendo igual a uma densidade suposta mais sua correção:

$$\rho = \rho^* + \rho' \quad (4.45)$$

Logo, usando um fator de compressibilidade definido como:

$$\Psi = \frac{\partial \rho}{\partial p} = \frac{1}{RT}, \quad (4.46)$$

obtém-se:

$$\rho = \Psi p. \quad (4.47)$$

Como consequência teríamos:

$$\begin{aligned} F_e &= (\rho u)_e A_e = (\rho^* + \rho')_e (u^* + u')_e A_e = \\ &= (\rho^* u^*)_e A_e + \rho_e^* u'_e A_e + \rho'_e u_e^* A_e + \rho'_e u'_e A_e. \end{aligned} \quad (4.48)$$

Eliminando o último termo por ser de segunda ordem e substituindo ρ' da Eq. (4.47), resulta:

$$F_e = F_e^* + \rho_e^* u_e' A_e + \Psi p_P' u_e^* A_e. \quad (4.49)$$

Repetindo o mesmo procedimento para cada face, diferentes termos de pressão são obtidos:

$$\begin{aligned} & F_e^* + \rho_e^* d_e \Delta Y (p_P' - p_E') + \Psi p_P' u_e^* \Delta Y, \\ & -F_w^* + \rho_w^* d_w \Delta Y (p_P' - p_W') - \Psi p_W' u_w^* \Delta Y, \\ & +F_n^* + \rho_n^* d_n \Delta Y (p_P' - p_N') + \Psi p_N' u_n^* \Delta Y, \\ & -F_s^* + \rho_s^* d_s \Delta Y (p_P' - p_S') - \Psi p_S' u_s^* \Delta Y. \end{aligned} \quad (4.50)$$

Reescrevendo em uma notação mais simples, teríamos:

$$A_P p_P' = \sum_{nb} a_{nb} p_{nb}' + b, \quad (4.51)$$

onde:

$$A_E = \rho_e^* d_e \Delta Y, \quad (4.52)$$

$$A_W = \rho_w^* d_w \Delta Y + \Psi u_w^* \Delta y, \quad (4.53)$$

$$A_N = \rho_n^* d_n \Delta X, \quad (4.54)$$

$$A_S = \rho_s^* d_s \Delta X + \Psi u_s^* \Delta X, \quad (4.55)$$

$$A_P = \sum_{nb} a_{nb} - \Psi u_w^* \Delta Y - \Psi u_s^* \Delta X + \Psi u_e^* \Delta Y + \Psi u_n^* \Delta X \quad (4.56)$$

$$b = F_w^* - F_e^* + F_s^* - F_n^*. \quad (4.57)$$

A equação 4.51 contém dois termos para a correção da pressão. O primeiro envolve a velocidade e um termo convectivo $\Psi p'_P u_e^* \Delta Y$. O segundo envolve a diferença de pressão e um termo de difusão $\rho_e^* d_e (p'_P - p'_E)$. A importância desses termos depende do número de Mach do escoamento. Para baixos números de Mach o termo difusivo é dominante e a equação exibe um comportamento elíptico. No regime supersônico, o termo convectivo é maior que o de difusão e o fluxo de massa é governado pela pressão a jusante. Isto reflete o correto comportamento hiperbólico da pressão em escoamentos supersônicos. A natureza da equação é tal que a transição de regime subsônico para supersônico é suave e o cálculo do regime transônico é tratado facilmente.

4.3.6 Configuração dos Esquemas Numéricos

Como o reactinFoam é um modelo transiente, alguns valores nos esquemas numéricos tem que ser definidos. A configuração para este esquema pode ser visto na tabela 4.1. Ao utilizar um modelo transiente no OpenFOAM algumas opções adicionais tem de ser definidas no arquivo controlDict (ver anexo C). A opção mais importante que tem que ser ajustada é o tamanho do passo de tempo. O OpenFOAM pode lidar com isso de duas maneiras diferentes. A primeira opção é definir o passo do tempo manualmente, mas a escolha de um passo de tempo muito grande causará uma divergência. Em vez disso, uma abordagem diferente pode ser usada. Um passo de tempo ajustável pode ser usado onde o OpenFOAM ajusta automaticamente o passo de tempo com base no número de Courant. O número Courant reflete a distância percorrida por uma informação em um passo de tempo. Na Eq. (4.58), C_r é o número Courant, \bar{v} é a velocidade média característica em cada célula, δX é a dimensão da célula e Δt é o passo de tempo.

$$C_r = \frac{\bar{v} \Delta t}{\delta X}. \quad (4.58)$$

Quando a advecção é dominada pela dispersão um modelo com um pequeno número de Courant ($C_r < 1$) irá diminuir as oscilações, ou seja, melhora a estabilidade e

Tabela 4.1 - Esquemas numéricos para o código reactingFoamles.

Solver	
Transiente	Cr=0.2
Pressão base	
Acoplamento pressão velocidade	PISO
Esquemas	
Pressão	limitedLinear
Velocidade	limitedLinearV
Turbulência	Smagorinsky
Espécies	CubicCorrected
Energia	CubicCorrected

diminui a dispersão numérica. Um numero de Courant baixo ($0 < Cr \leq 0,5$) significa melhor estabilidade, mas o procedimento de cálculo ficara lento. Para número de Courant na faixa de $0.5 \leq Cr \leq 1$ ocorre exatamente o contrario, menos estabilidade e maior rapidez no cálculo. Números de Courant entre 0,2 e 0,5 foram utilizados para o cálculo deste trabalho. Números mais elevados do que isso provaram ser instáveis.

O esquema numérico no OpenFoam para volumes finitos parte da discretização de cada termo integrado sobre uma célula de volume V . Integrais de volume são convertida então a integrais sobre a superfície S usando o teorema de Gauss.

Integrais de volume e superfície são então linearizadas usando os esquemas apropriados, sendo eles descritos tomando em conta os parâmetros mostrados na Fig. 4.4.

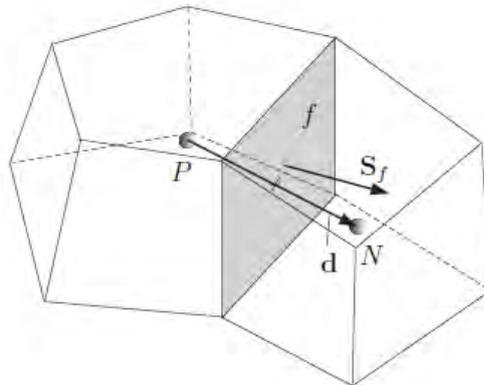


Figura 4.4 - Parâmetro de discretização em volumes finitos.

4.3.6.1 Termo laplaciano

O termo laplaciano é integrado sobre o volume de controle e linearizado da seguinte forma:

$$\int_V \nabla \cdot (\Gamma \nabla \phi) dV = \int_S dS \cdot (\Gamma \nabla \phi) = \sum \Gamma_f S_f \cdot (\nabla \phi)_f. \quad (4.59)$$

A discretização do gradiente é implícita quando o comprimento do vetor d entre o centro da célula de interesse P e o centro da célula vizinha N é ortogonal a face plana, ou seja paralela a S_f :

$$S_f \cdot (\nabla \phi)_f = |S_f| \frac{\phi_N - \phi_P}{|d|} \quad (4.60)$$

No caso de malha não ortogonal, um termo explícito adicional é introduzido, o qual é avaliado por interpolação do gradiente no centro da célula com diferenças centradas.

4.3.6.2 Termo convectivo

O termo convectivo é integrado sobre o volume de controle e linearizado da seguinte forma.

$$\int_V \nabla \cdot (\rho \mathbf{U} \phi) dV = \int_S dS \cdot (\rho \mathbf{U} \phi) = \sum S_f \cdot (\rho \mathbf{U})_f \phi_f = \sum F \phi_f \quad (4.61)$$

O campo ϕ_f pode ser avaliado usando uma grande variedade de esquemas. Entre eles, o esquema de diferenças centradas e de segunda ordem é dado por:

$$\phi_f = f_x \phi_P + (1 - f_x) \phi_N. \quad (4.62)$$

Onde $f_N \equiv \overline{FN}/\overline{PN}$, \overline{FN} é a distância entre f e o centro da célula N e \overline{PN} é a distância do centro das células P e N .

4.3.6.3 Divergente

Este termo é estritamente explícito e se diferencia da convecção por que não é o produto da velocidade por uma variável dependente. Neste caso o termo é integrado

sobre um volume de controle e linearizado como:

$$\int_V \nabla \cdot \phi dV = \int_S dS \cdot \phi = \sum S_f \cdot \phi_f. \quad (4.63)$$

4.3.6.4 Gradiente

O gradiente é um termo explícito que pode ser avaliado de várias formas. A forma mais usada é usando o teorema de Gauss:

$$\int_V \nabla \phi dV = \int_S dS \phi = \sum_f S_f \phi_f. \quad (4.64)$$

Outro método de discretização é o denominado gradiente normal à superfície. Nele o gradiente é normal a superfície $n_f \cdot (\nabla \phi)_f$ e é avaliado nas faces das células da seguinte forma:

$$(\nabla \phi)_f = \frac{\phi_N - \phi_P}{|d|} \quad (4.65)$$

O esquema padrão selecionado para a simulação em OpenFoam é o Gauss linear para o termo divergente e gradiente, e Gauss linear corrigido para o termo laplaciano. Mas um esquema de interpolação deve ser adicionado. Esses esquemas em OpenFoam são divididos em 4 categorias: centrados, upwind, total variation diminishing (TVD) e normalized variable diagram (NVD). Os esquemas centrados são mais usados, as outras três categorias são usualmente para o termo divergente e o termo convectivo. No presente trabalho é usado um esquema Gauss linear limitedLinear de segunda ordem limitado e limitedLinearV para o termo convectivo, que é um esquema de interpolação TVD. Como casos específicos, também foram utilizados os esquemas de interpolação CubicCorrected que correspondem a quarta ordem não limitados.

4.4 Modelo de Turbulência

Um assunto de importância em dinâmica de Fluidos é a existência da turbulência. Em escoamentos turbulentos temos estruturas coerentes em uma variedade de escalas espaciais. As grandes escalas determinadas pelo tamanho da geometria e as pequenas, onde os efeitos viscosos são dominantes. Como já se explicou no Cap. 1 existem várias formas de abordagens, mas explicaremos o SGE em particular, por

ser de interesse neste trabalho. A malha utilizada deve ser apropriadamente fina para conseguir resolver e simular as escalas filtradas do escoamento.

A formulação SGE, como se mostrou no Cap. 3, nos dá a mesma Eq. (3.71) em sua forma filtrada:

$$\partial_t(\bar{\rho}\tilde{\mathbf{U}}) + \nabla \cdot (\bar{\rho}\tilde{\mathbf{U}} \otimes \tilde{\mathbf{U}}) = -\nabla\bar{p} + \nabla \cdot (\bar{\mathbf{S}} - \mathbf{B}), \quad (4.66)$$

Onde o tensor das tensões de sub-malha (SGS) é:

$$\mathbf{B} = \bar{\rho}(\widetilde{\mathbf{U} \otimes \mathbf{U}} - \tilde{\mathbf{U}} \otimes \tilde{\mathbf{U}}). \quad (4.67)$$

Modelar consistentemente a turbulência consiste em encontrar convenientemente e fisicamente a representação de \mathbf{B} .

4.4.1 Modelos para Simulação de Grande Escalas

A quantidade de modelos de sub-malha possíveis para uma formulação SGE é muito grande. Uma descrição deles pode ser encontrada em (FUREBY et al., 1997). Como em RANS, o modelo pode ser incorporado diretamente na equação de quantidade de movimento. No código OpenFoam existem 3 tipos de classes virtuais, cada uma conceituada de maneira diferente. A classe virtual *isoGenEddyVisc* usa a hipótese de Boussinesq, a classe virtual *isoGenScaleSimilarity* usa a metodologia de similaridade e a terceira classe *isoGenSGSStress* resolve todas as equações do balanço para tensores turbulentos. Essa distribuição pode ser observada na Fig. 4.5.

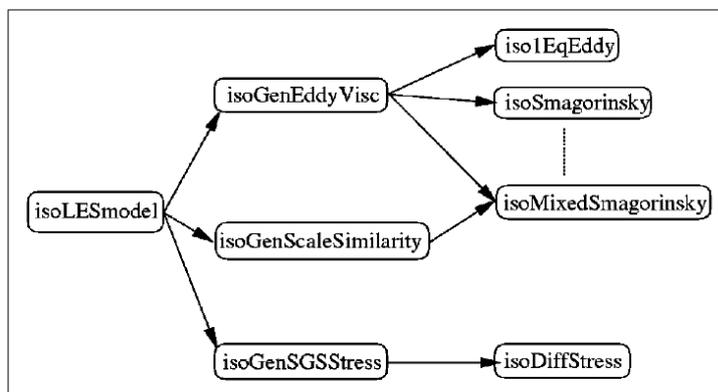


Figura 4.5 - Classe virtual hierárquica para modelos SGE. As linhas sólidas representam a herança hierárquica.

Os vários modelos para SGE podem ser agrupados em conjuntos que compartilham características comuns, sendo isto naturalmente construído para que a classe hierárquica coincida. Uma ampla seleção de modelos usa a hipótese de Boussinesq, na qual os efeitos da turbulência não resolvidos são modelados como um incremento na viscosidade. Isto é equivalente a modelar \mathbf{B} como:

$$\mathbf{B} = \frac{3}{2}k\mathbf{I} - 2\nu_t\overline{\mathbf{D}}_D. \quad (4.68)$$

Com $\mathbf{D}_D = \overline{\mathbf{D}} - \frac{1}{3}tr(\overline{\mathbf{D}})\mathbf{I}$. Cada modelo difere na forma como a viscosidade turbulenta ν_t é avaliada. Exemplo disto é a aproximação de Smagorinsky e o modelo de uma equação de viscosidade turbilhonar (SCHUMANN, 1975). Um segundo conjunto de modelos proporcionam a solução total das equações do balanço para B . Um exemplo é o modelo de Deardorff (DEADORFF, 1973) que tem a forma:

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{B} \otimes \overline{\mathbf{U}}) - \nabla \cdot \frac{\nu_t}{\sigma_B} \mathbf{B} = P_k - C_1 \frac{\epsilon}{k} \mathbf{B} - \frac{2}{3}(1 - C_1)\mathbf{I}\epsilon - C_2 [P_k - \frac{1}{3}\mathbf{I}tr(P_k)]. \quad (4.69)$$

Muitos códigos de CFD convencionais requerem seis equações individuais para resolver a Eq. (4.69) de maneira separada.

Um terceiro grupo de modelos SGE se baseia na escala de similaridade (BARDINA et al., 1983). Neles se introduz a interação entre diferentes escalas de turbulência, introduzindo um segundo nível de filtro que são escritos da seguinte forma:

$$\mathbf{B} = \overline{\overline{\mathbf{U}}} \otimes \overline{\overline{\mathbf{U}}} - \widetilde{\widetilde{\mathbf{U}}} \otimes \widetilde{\widetilde{\mathbf{U}}}. \quad (4.70)$$

Esses modelos não incluem os efeitos de dissipação corretamente e são usualmente combinados com modelos do tipo viscosidade turbulenta dando modelos mistos.

As classes hierárquicas dos modelos SGE no OpenFOAM estão baseadas na relação descrita na Fig. 4.5. A base é a classe virtual *isoLESmodel*, logo vem as classes intermediarias *isoGenEddyVisc*, *isoGenSStress* e a *isoGenScaleSimilarity* as que implementam as Eq. (4.68), Eq. (4.69) e Eq. (4.70) respectivamente.

No presente estudo três modelos de turbulência presentes no código foram utilizados. Eles são descritos no trabalho de Fureby et al. (1997). Esses modelos são o modelo de

Smagorinsky, o modelo de uma equação proposto por Yoshisawa e Horiuchi (1985), e o modelo dinâmico de uma equação, que usa a identidade de Germano segundo o trabalho de Ghosal et al. (1995). A forma como eles foram incluídos no modelo de sub-malha para chama não pré-misturada é descrita no anexo D.

4.4.1.1 Modelo de Smagorinsky

O modelo descrito por Fureby et al. (1997b) é baseado no clássico modelo de Smagorinsky (1963), ele é baseado na hipótese de Boussinesq e descrito como:

$$\tau_{ij} - \frac{\delta_{ij}}{3}\tau_{kk} = -\nu_t \bar{\rho} \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3}\delta_{ij} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \right) = -2\bar{\rho}\nu_t \left(\tilde{S}_{ij} - \frac{\delta_{ij}}{3}\tilde{S}_{kk} \right). \quad (4.71)$$

Onde τ é o tensor viscoso, ν_t é a viscosidade de sub-malha, ou viscosidade turbulenta, e

$$\tilde{\mathbf{D}} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right), \quad (4.72)$$

é a taxa das deformações. A viscosidade é determinada utilizando:

$$\nu_t = (C_s \Delta)^2 |S|. \quad (4.73)$$

Onde C_s é uma constante que tem um valor entre 0,01 e 0,2. No presente trabalho foi usado um valor igual a 0,18.

4.4.1.2 Modelo de uma equação

Este modelo foi proposto por Yoshisawa e Horiuchi (1985) e inclui a energia cinética de sub-malha k definida como:

$$\tilde{k} = \frac{1}{2}\bar{\rho}\tau_{kk} = \frac{1}{2}(\widetilde{u_k u_k} - \tilde{u}_k \tilde{u}_k). \quad (4.74)$$

O tensor viscoso de sub-malha é definido como:

$$\tau_{ij} = -2\bar{\rho}C_v \Delta \sqrt{\tilde{k}} \left(\tilde{S}_{ij} - \frac{\delta_{ij}}{3}S_{kk} \right) + \frac{2}{3}\bar{\rho}k\delta_{ij}. \quad (4.75)$$

A viscosidade turbulenta é dada por:

$$\mu_t = \bar{\rho} C_k \delta \sqrt{k}.$$

$$\nu_t = C_k \delta \sqrt{k}.$$

$$\epsilon = \frac{C_\epsilon \bar{\rho} k^{3/2}}{\Delta} \quad (4.76)$$

Yoshisawa e Horiuchi (1985) determinaram os valores para as constantes, sendo $C_k=0,5$ e $C_\epsilon =1$. Com esses valores e usando uma equação de transporte para a energia cinética, se fecha o sistema:

$$\frac{\partial k}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i k}{\partial u_i} - \frac{\partial \nu_t \nabla k}{\partial u_i} = -\bar{\rho} \mathbf{D}_i : \mathbf{B}_i - \epsilon. \quad (4.77)$$

4.4.1.3 Modelo dinâmico de uma equação

Este modelo segue o procedimento de Ghosal et al. (1995), utiliza a identidade de Germano $\mathbf{L} = \mathbf{T} - \bar{\mathbf{B}}$ e considera a existência de uma lei de escala. Isto permite que \mathbf{T} e \mathbf{B} possam ser expressos na mesma forma funcional. \mathbf{L} é calculada explicitamente das equações filtradas.

$$\frac{\partial k}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i k}{\partial u_i} - \frac{\partial \nu_t \nabla k}{\partial u_i} = -\bar{\rho} \mathbf{D}_i \mathbf{B}_i \mathbf{L}_i - \epsilon. \quad (4.78)$$

Sendo a equação para o tensor viscoso:

$$\tau_{ij} - \frac{1}{3} \delta_{ij} \tau_{ij} = -2C_k |\bar{S}| \bar{S}_{ij}. \quad (4.79)$$

Um segundo filtro é usado obtendo-se:

$$T_{ij} - \frac{1}{3} \delta_{ij} T_{ij} = -2C_k |\hat{S}| \hat{S}_{ij} \quad (4.80)$$

Com as equações 4.75, 4.76 e 4.78 obtemos um sistema sobre-determinado de equações para C_k que se reduz a:

$$C_k = \frac{m_{ij} L_{ij}}{m_{ij} m_{ij}}, \quad (4.81)$$

sendo que:

$$m_{ij} = -2\hat{\Delta}^2 |\hat{S}| \hat{S}_{ij} + 2|\bar{S}| \bar{S}_{ij}. \quad (4.82)$$

5 ANÁLISE E RESULTADOS

Neste capítulo, são apresentados os resultados das simulações para chamas pré-misturadas e não pré-misturadas. Nele, enfatiza-se a análise do filtro SGE para ver como os resultados simulados se comparam com os resultados experimentais. São apresentados resultados da simulação para combustão de chama não pré-misturada, reproduzindo o trabalho realizado no Workshop sobre chamas não pré-misturadas (TNF, 2011) com o experimento de um queimador desenvolvido no laboratório da universidade de Sidney. Estes resultados são utilizados para verificar a implementação do modelo para chamas não pré-misturadas com SGE a partir das explicações dadas na seção 4.4, sendo esta implementação a principal contribuição deste trabalho.

Inicialmente se apresentam os resultados da simulação para chamas pré-misturadas. A finalidade de testar o modelo para chamas de pré-mistura foi validar o modelo de turbulência para a metodologia SGE, presente no código. O modelo de turbulência de Smagorinsky foi implementado no código para o modelo de chama não pré-misturada PaSR, denominado agora ReactingFoamLES no OpenFoam.

As condições iniciais, e de contorno impostas para as duas simulações são descritas assim como o procedimento para levar adiante as simulações. Uma seção é dedicada exclusivamente ao tratamento dos mecanismos de cinética química, utilizados no presente trabalho. É importante salientar que o código utilizado na avaliação da cinético-química também é do tipo aberto.

5.1 Simulação Com o Modelo Pré-misturado XiFoam

A simulação com um modelo de combustão turbulenta de chama pré-misturada reproduz o experimento realizado por Sanquer (1998). O experimento consiste de um retentor de chama triangular. O modelo utiliza SGE para simular a turbulência e o modelo de combustão denominado Xi para chamas de pré-mistura, descrito no Cap. 3. Os resultados são comparados com os dados experimentais obtidos por Sanquer (1998) para um caso inerte e um caso reativo do experimento. Estes experimentos são detalhados adiante.

O experimento se baseia num escoamento para um canal de seção transversal retangular. Nesse canal é colocado um obstáculo de seção triangular que funciona como um retentor de chama. Foram testados três tipos de modelos de turbulência, que são descritos na seção 4.4.1. Estes modelos já estão implementados na distribuição

do OpenFoam e foram testados para verificar qual deles tem melhor desempenho na simulação.

A análise dos resultados simulados, busca uma comparação com resultados obtidos experimentalmente. Por exemplo, é comparado o número de Strouhal de emissão de vórtices no regime periódico determinado experimentalmente por Sanquer (1998), com os resultados das simulações com o modelo Xi para SGE e com os resultados das simulações de Dourado (2003) que foi obtida com abordagem RANS, como mostrado na tabela 5.1. Em combustão turbulenta, o comportamento da frente de chama é predominantemente ditado pela turbulência (PETERS, 2000) e a velocidade de combustão está diretamente relacionada à turbulência (WELLER et al., 1990). Porém, é necessário que o modelo de turbulência seja capaz de reproduzir os processos dinâmicos que são principalmente produzidos pelas grandes escalas.

Baseados nestes resultados é que se realizaram análises de espectros de energia para verificar se o filtro SGE captura corretamente a faixa do espectro de Kolmogorov. A análise mostrou que a malha utilizada é adequada para os modelos de turbulência adotados no que diz respeito à frequência de corte.

Foram testados os modelos de turbulência de Smagorinsky, o modelo de uma equação e o modelo dinâmico de uma equação, disponíveis originalmente no OpenFoam. O código trata as Equações de Navier-Stokes para escoamento compressível usando o método de grade co-localizada descrita na seção 4.3.4, com PISO (pressure-implicit split-operator) para resolver o acoplamento pressão-velocidade. Para discretização espacial, usou-se esquemas de segunda ordem TVD (Total Variation Diminishing) e o método de Euler para a discretização temporal. O método de discretização padrão adotado pelo código é a integração de Gauss para volumes finitos, como descrito na Sec. 4.3.6.

5.1.1 Condições de Contorno e Iniciais

Uma representação do experimento realizado por Sanquer (1998) é apresentada na Fig. 5.1. O experimento consiste em um canal de 600 mm de comprimento, 160 mm de largura e 28.8 mm de altura. O caso estudado aqui tem número de Reynolds de 6600 baseado na semi-altura do canal de entrada, ou seja, o escoamento está em regime turbulento. O obstáculo é um triedro triangular cuja face posterior se encontra a 160 mm da entrada. A dimensão transversal do obstáculo é tal que o bloqueio do escoamento resulta em 33 % da área total. Este caso é referido como caso r-65 na tese do Sanquer (SANQUER, 1998).

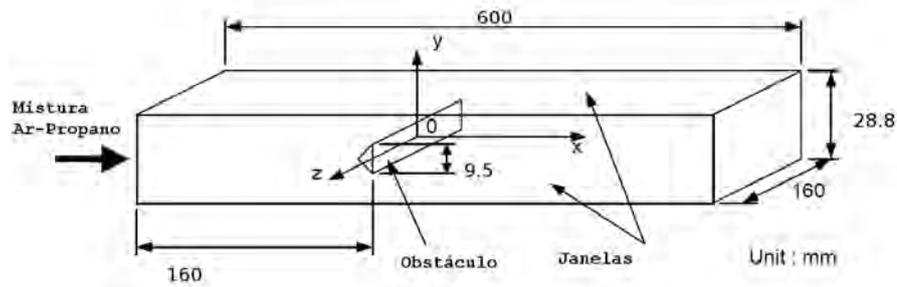


Figura 5.1 - Esquema do canal com obstáculo de Sanquer.

Na simulação numérica para o obstáculo num canal, se considerou primeiramente escoamento inerte com uma temperatura inicial de 300 K. Considerou-se que a saída do canal é aberta com condição de transmissividade da onda de pressão (CANDEL, 1992). Um perfil de velocidade uniforme com turbulência sintética descrito na seção 4.2.3.2 foi imposto na entrada do canal. O perfil tem uma velocidade de 3.1 m/s como mostrado na Fig. 5.2. Sobre esse perfil, foi imposta uma flutuação que visou simular o campo de flutuações turbulentas, conforme uma rotina disponível no OpenFoam. Utilizou-se a função de parede de Jayatilleke (1969) nas paredes do canal e do obstáculo. Com esta função pode-se fazer o tratamento adequado da camada limite térmica, conhecido como função \mathcal{P} .

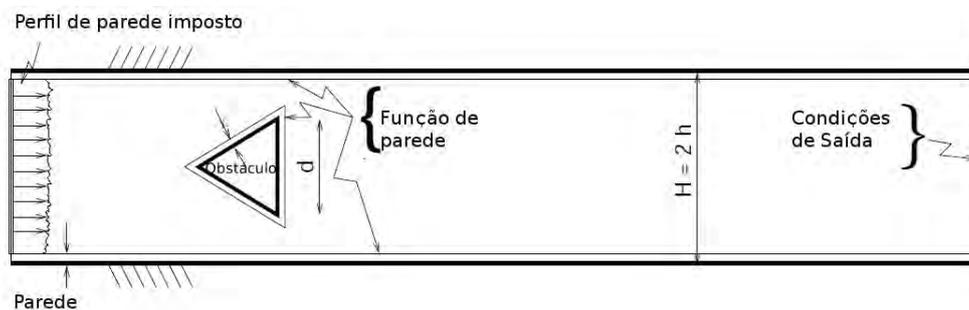


Figura 5.2 - Perfil de velocidade uniforme imposto e condições iniciais na entrada do canal.

$$T^+ = \sigma_T(U^+\mathcal{P}), \quad (5.1)$$

sendo que a função de Jayatilleke é usualmente tomada como:

$$\mathcal{P} = 9.24(r^3 - r), \quad (5.2)$$

onde $r = (Pr - Pr_\Theta)^{1/4}$ e $Pr_\Theta = k/k'$ é o número de Prandtl turbulento.

A segunda simulação corresponde ao escoamento reativo. Considerando uma mistura homogênea de Propano e ar pré-misturados. A mistura foi ignitada atrás do obstáculo na zona de recirculação para se conseguir um desempenho apropriado e evitar a extinção da chama. O ponto de ignição foi localizado a 0.05 m atrás do obstáculo, no centro da zona de recirculação. A velocidade de chama inicial foi de 0.256 m/s e a variável de regressão b foi tomada igual a 1 em todo o domínio, como condição inicial de entrada.

As condições de contorno usadas foram uma combinação de condições de contorno de Dirichlet e Neumann, podendo ser classificadas em 3 categorias: condições de contorno para paredes viscosas isotérmicas ou adiabáticas; condições de contorno periódicas e condições de entrada e saída, estas últimas tratadas pelo método desenvolvido por [Baum et al. \(1994\)](#) para escoamento compressível em 3D.

A malha construída para a simulação é composta de 388.355 volumes para o caso bidimensional e de 2.300.000 volumes para o caso 3D. A figura 5.3 mostra a topologia da malha ao redor do obstáculo. Nela, distingue-se uma maior densidade de volumes em volta do obstáculo, na parte posterior do bloqueio e nas paredes. Este adensamento é feito com a finalidade de recuperar a zona de recirculação obtida por [Sanquer \(1998\)](#).

A velocidade instantânea foi monitorada para estabelecer a partir de que momento o escoamento pode ser considerado periódico estacionário. As figuras 5.4 e 5.5 mostram os históricos das componentes, longitudinal e transversal das velocidades U_x e U_y respectivamente. Como pode ser apreciado, a transição dura aproximadamente 180 milissegundos e, a partir desse instante, o escoamento pode ser considerado periódico plenamente estabelecido.

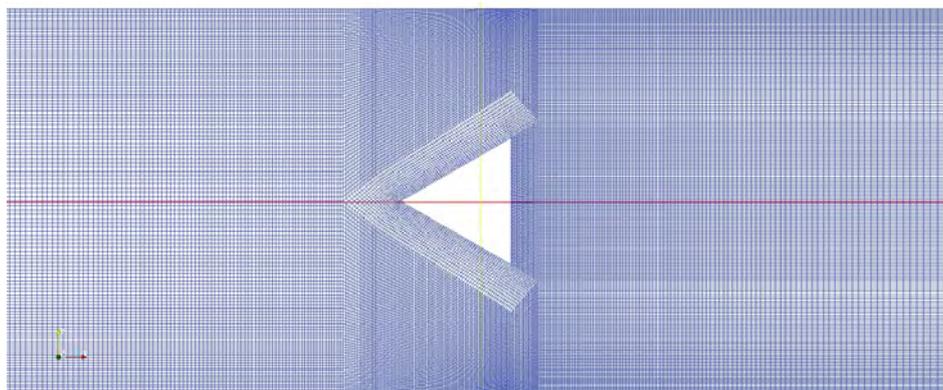


Figura 5.3 - Detalhe da malha computacional ao redor do obstáculo.

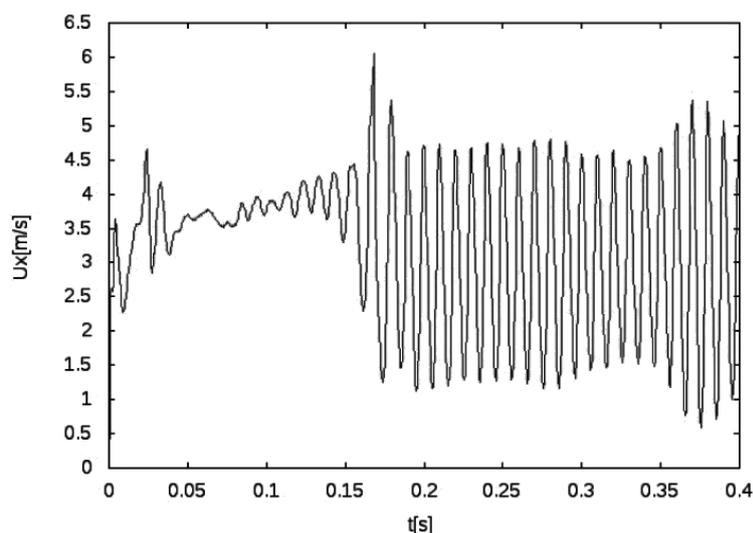


Figura 5.4 - Evolução da componente longitudinal da velocidade U_x .

5.1.2 Resultados Para Chama Pré-misturada

O objetivo dos resultados apresentados nesta seção, foi verificar os modelos de turbulência implementados no OpenFoam. Primeiramente, resultados são apresentados em termos do número de Strouhal da emissão de vórtices atrás do obstáculo segundo a Eq. (5.3), onde d é o comprimento da base do obstáculo e U_{axe} é a velocidade na entrada do canal. O tamanho da zona de recirculação é também comparado com os dados experimentais do [Sanquer \(1998\)](#). O espectro de energia é analisado para verificar se a malha computacional é adequada e também para comparar se a faixa inercial coincide com o decaimento da turbulência em uma inclinação de $-5/3$, para os casos reativo e inerte. Também, perfis das componentes normal e transversal da velocidade são comparados com os resultados experimentais na zona de recirculação

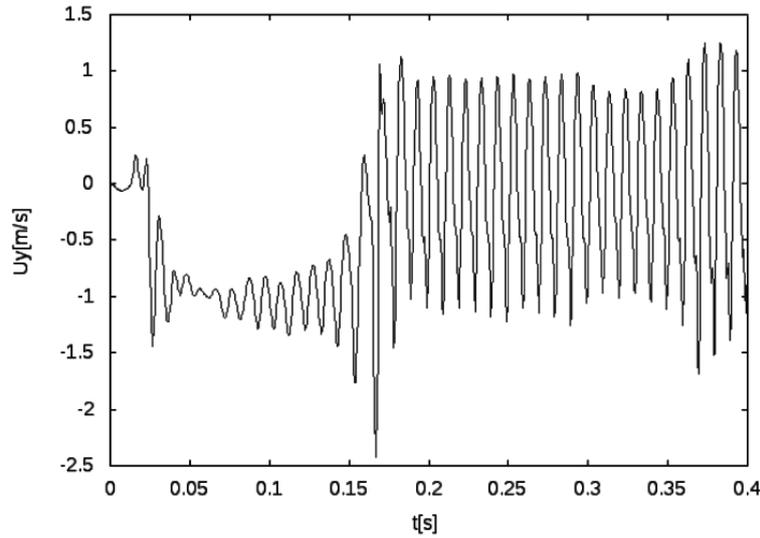


Figura 5.5 - Evolução da componente transversal da velocidade U_y .

e a jusante da zona de recirculação. Finalmente, as variáveis de avanço e perfis de temperatura são apresentados.

A zona de recirculação e o espectro de energia são determinados com os dados fornecidos pela velocidade, após alcançar o estado periódico estacionário. A partir desse ponto o comprimento da zona de recirculação X_r é determinado. Com esta informação, pode-se calcular o número de Strouhal para comparar com o valor obtido experimentalmente. Para determinar os valores do espectro de energia, transformadas de Fourier são tomadas para a velocidade oscilatória instantânea. Esta informação é usada para determinar se a simulação está capturando as grandes escalas turbulentas e se as escalas turbulentas da sub-malha estão sendo modeladas corretamente.

5.1.2.1 Escoamento inerte

A análise espectral é importante para se conhecer a repartição de energia através da cascata de Kolmogorov e se obter a frequência de emissão dos vórtices dimensionada. É usual aplicar transformadas de Fourier para este fim. Outro parâmetro importante de comparação é o número de Strouhal, definido como:

$$St = \frac{f_q d}{U_{axe}}, \quad (5.3)$$

onde f_q é a frequência de emissão de vórtices, d é o comprimento da aresta do triângulo na zona de bloqueio e U_{axe} a velocidade de entrada do escoamento.

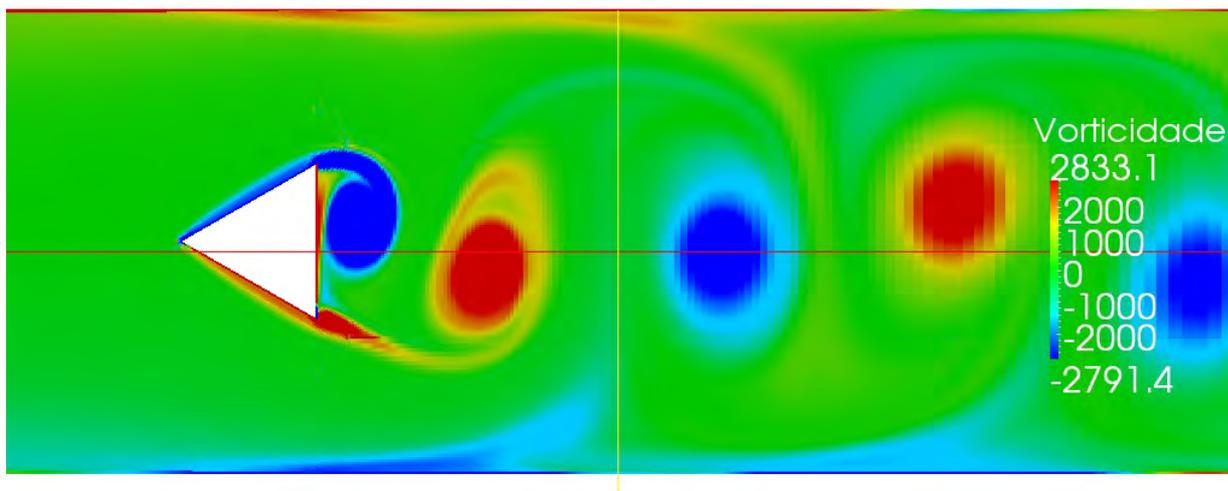


Figura 5.6 - Campo de vorticidade instantânea para escoamento inerte em 0,25 segundos.

A estrutura do escoamento mostra vórtices assimétricos sendo formados a partir das duas camadas viscosas na borda final do prisma, conhecidos como vórtice de von Karman (Fig. 5.6). Os vórtices observados se desenvolvem como resultado da separação de camada limite nos dois bordos de fuga do prisma na parte posterior. A jusante os vórtices são quebrados em pequenos turbilhões que posteriormente são dissipados por efeitos viscosos.

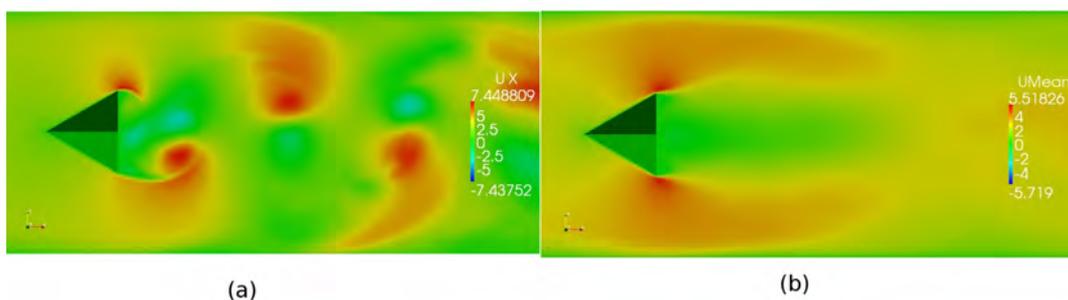


Figura 5.7 - Isocontornos do campo de velocidade (a) instantâneo e (b) médio, para escoamento inerte.

Como era de se esperar, a configuração para a velocidade no escoamento inerte mostra vórtices alternados. Esses vórtices saem com um intervalo de tempo diferente

a cada lado do obstáculo, isto por causa de uma diferença de pressão nos lados do obstáculo. O perfil de velocidade da esteira é um perfil instável onde a instabilidade é classificada como absoluta. Ou seja, as perturbações se propagam na direção contrária ao escoamento principal e exitam o escoamento sobre o obstáculo. O resultado é que a frequência de desprendimentos dos vórtices é a mesma frequência instável do perfil da esteira (TIMOTHY, 2012)

A Fig. 5.7 mostra o campo de velocidade média e instantânea. O escoamento é acelerado por causa do bloqueio do obstáculo e, a jusante, experimenta uma repentina expansão no bordo de fuga, gerando uma separação do escoamento criando uma esteira de recirculação. Atrás da zona de recirculação, o campo de velocidade é modificado pela transferência de energia das grandes escalas para as pequenas escalas.

Os resultados numéricos mostram uma boa concordância com aqueles obtidos experimentalmente, como mostrado na Tab. 5.1. No entanto esses resultados são mais diferentes em relação ao resultado experimental do que os obtidos pela abordagem RANS, para o caso em que se simulou com o modelo de uma equação. O comprimento da zona de recirculação, baseado na evolução da componente da velocidade média Ux , foi determinado tomando os valores médios ao longo do eixo X à jusante do obstáculo.

Tabela 5.1 - Comparação de resultados numéricos entre SGE, RANS e resultados experimentais.

	$f_q[Hz]$	$f_q d/U$	$\Delta Xr[m]$	Xr/d
Experimento do Sanquer (1998)	89	0,276	0,0204	2,12
LES-Xi One eq.	93,5	0,284	0,023	2,42
LES-Xi Smagorinsky	90	0,275	0,02	2,22
RANS Dourado (DOURADO, 2003)	87	0.2694	0,0222	2,31

O comprimento da zona de recirculação tem uma diferença aproximada de 11.5 % a mais, se comparado com o valor experimental. O perfil mostrado na Fig. 5.8 apresenta a média da componente longitudinal da velocidade na esteira do obstáculo. Ou seja, estão representados os valores da média das velocidades instantâneas, durante o intervalo de tempo físico após superar o transiente, mostrado na fig. 5.4 ou seja, 180 milissegundos. A representação esquemática dessa evolução é mostrada na Fig. 5.9. A adimensionalização adotada por Sanquer (1998) também é levada em conta, sendo que no eixo X o valor da distância medida é dividida pelo comprimento da zona de recirculação e a velocidade média longitudinal, por sua vez, é dividida pela

velocidade na entrada do canal.

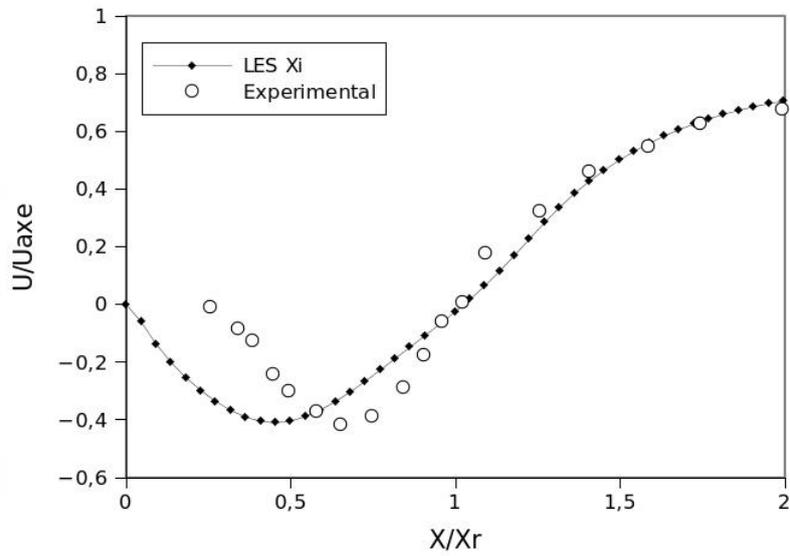


Figura 5.8 - Perfil de velocidade média U_x ao longo do eixo X , atrás do obstáculo.

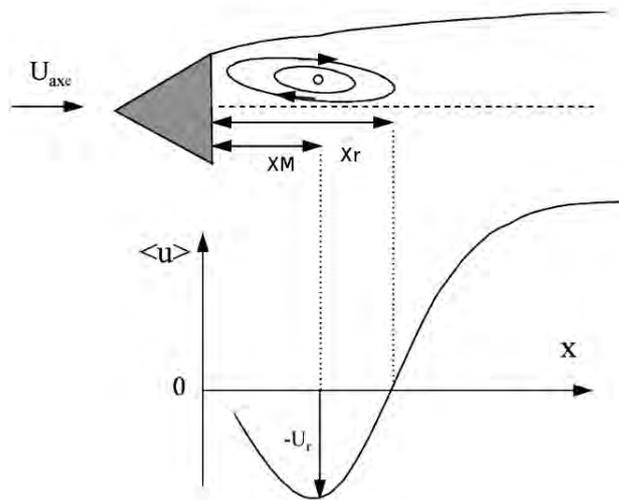


Figura 5.9 - Representação esquemática da distribuição de velocidade (SANQUER, 1998).

O comprimento da zona de recirculação encontrado na presente simulação é de 0,023

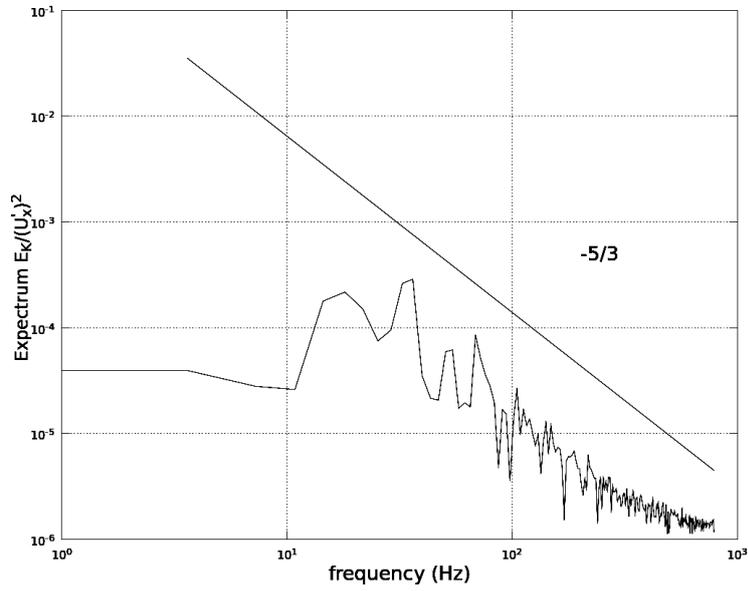
m, para o modelo de turbulência de uma equação, e de 0,020 m, para a simulação com o modelo de turbulência de Smagorinsky. No entanto, no resultado experimental é igual a 0,0204 m e o valor da simulação com a metodologia RANS é de 0,0222 m.

Espectros de frequência de energia são apresentados nas Figs.5.10 e 5.11. Eles correspondem a uma simulação SGE em 2-D, utilizando o modelo de turbulência de uma equação. Como no trabalho de Sanquer (SANQUER, 1998), as velocidades longitudinal e normal foram medidas em pontos distribuídos ao longo do eixo X . Esses pontos se encontram em $X/Xr = 1,4$; $Y/h = 0$ e $X/Xr = 1,4$ e $Y/h = 0,41$. Uma das razões para fazer a simulação 2D foi ver como era o comportamento dos resultados de vorticidade e velocidade, já que realizar essas avaliações em 3-D demandaria maior tempo e custo computacional.

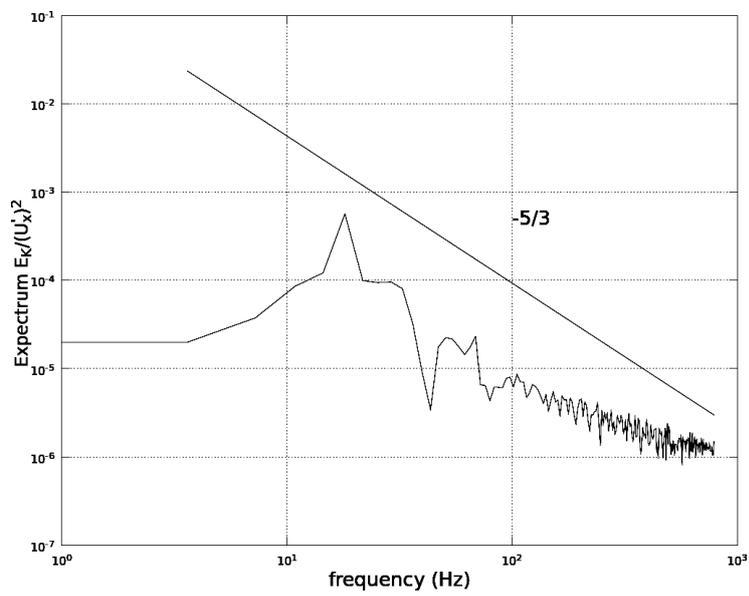
As figuras 5.10 e 5.11 mostram os espectros de energia das simulações bidimensionais e apresentam um decaimento da energia que não é o esperado. Isto ocorre principalmente por que as grandes escalas da turbulência na terceira dimensão não estão representadas.

As figuras 5.12 e 5.13 (a)-(d), mostram o espectro de energia para uma simulação em 3-D. Tal espectro é obtido a partir das componentes da velocidade Ux e Uy . O espectro de energia mostra um decaimento de $-5/3$, conforme esperado para escoamentos com número de Reynolds elevado. Estes resultados mostram que a faixa inercial é capturada adequadamente. Então, o refinamento da malha pode ser considerado adequado para a presente análise.

O espectro de energia também mostra, nas Figs. 5.12 e 5.13, picos correspondentes à frequência de emissão de vórtices de grandes escalas. Um pico de 80 Hz pode ser identificado na Fig. 5.12 (b) e Fig. 5.13 (d), onde as medições foram tomadas em $Y/h = 0,41$. Em $Y/h=0$ os picos estão localizados em 100 Hz, mas o espectro não é conclusivo.



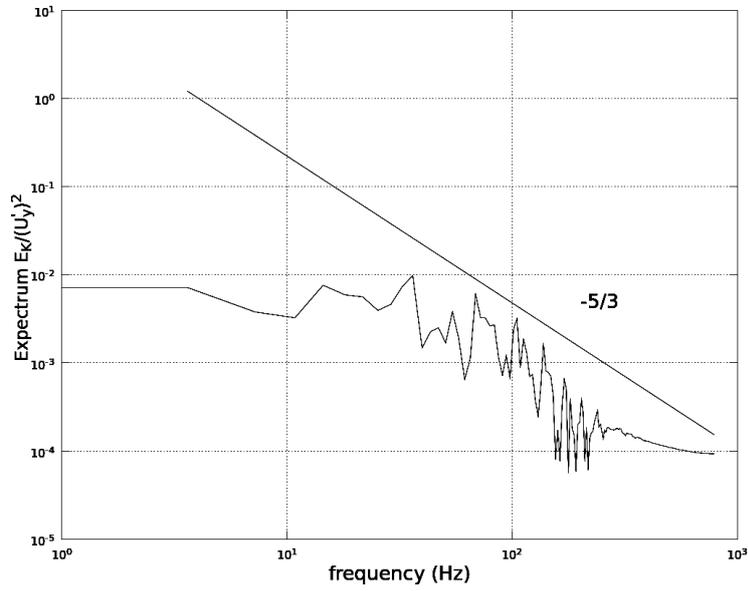
a



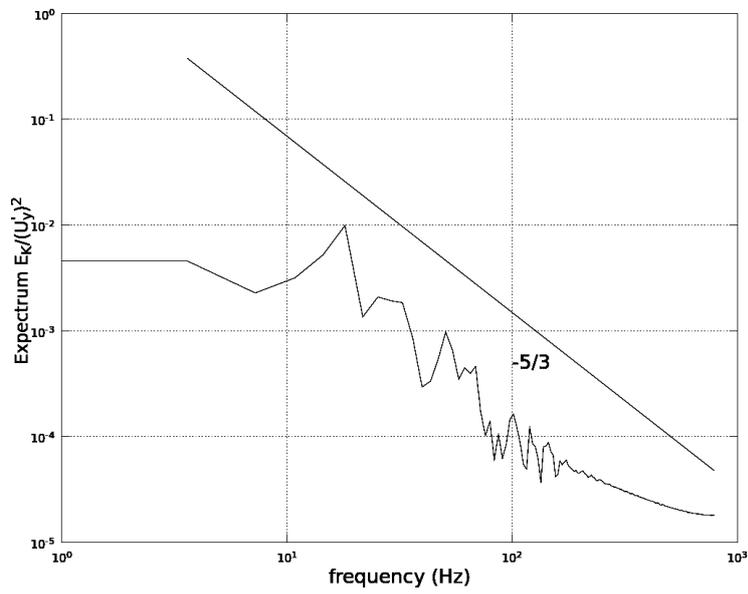
b

Figura 5.10 - Espectros de energia das componentes da velocidade longitudinal para simulações 2D. (a) U_x , $X/Xr = 1.4$, $Y/h = 0$; (b) U_x , $X/Xr = 1.4$, $Y/h = 0.41$.

5.11

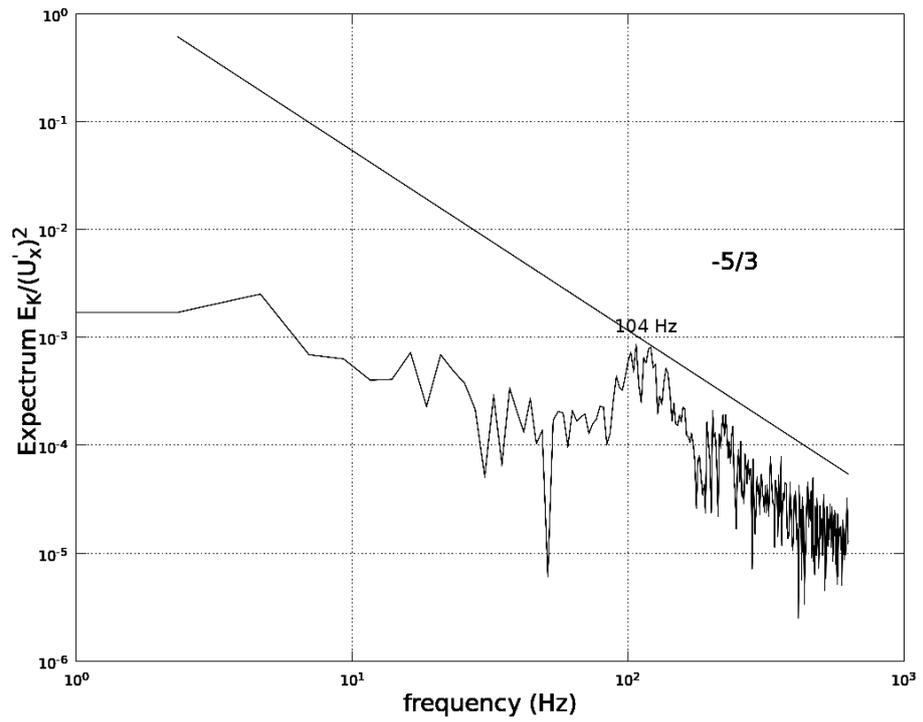


c

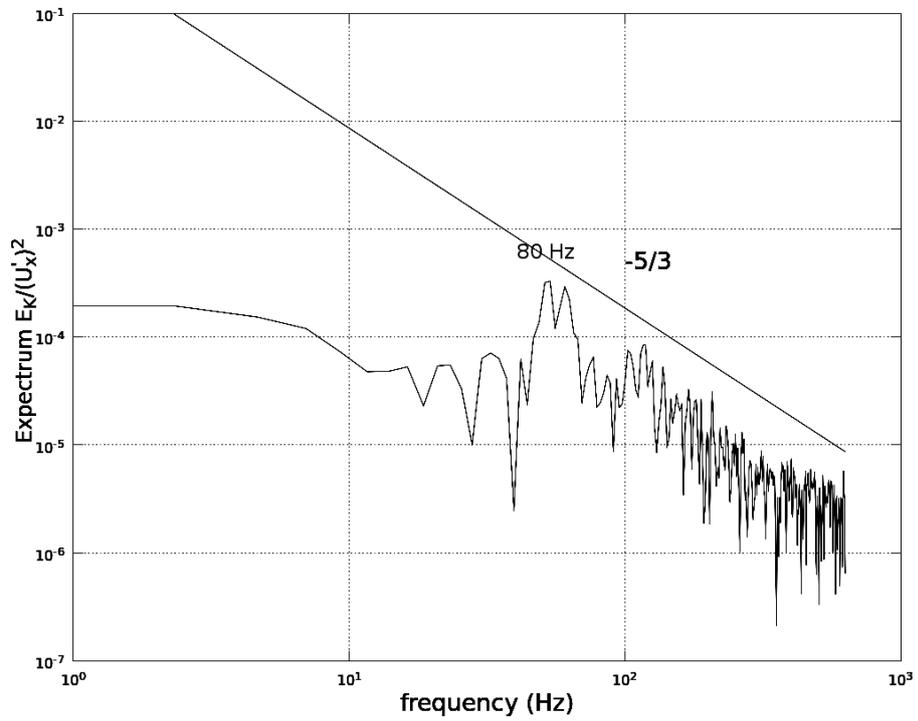


d

Figura 5.11 - Espectros de energia das componentes da velocidade transversal para simulações 2D. (c) U_y , $X/Xr = 1.4$, $Y/h = 0$; (d) U_y in $X/Xr = 1.4$, $Y/h = 0.41$.

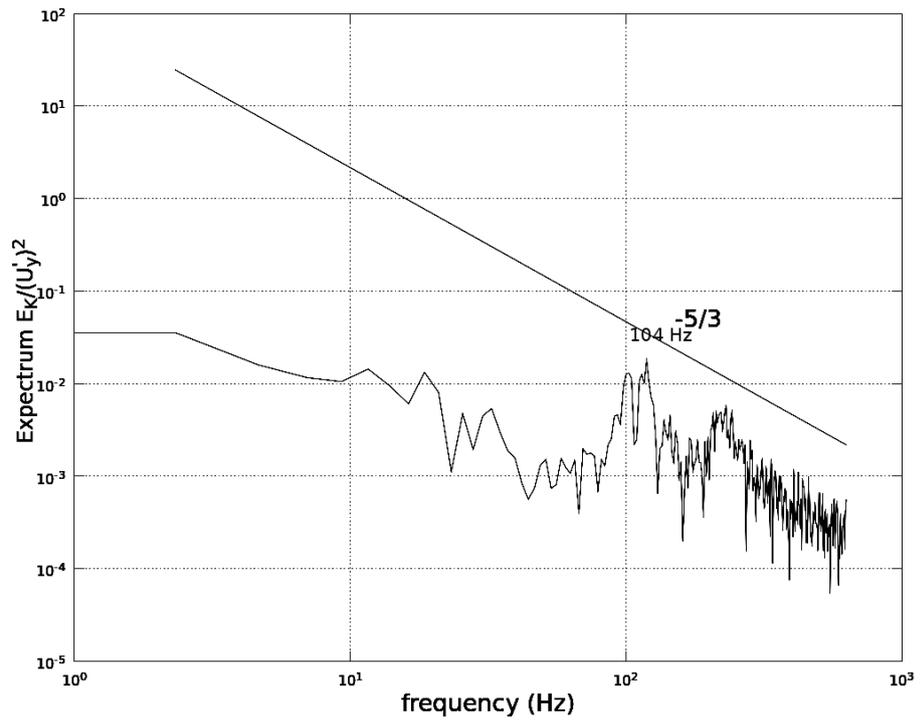


a

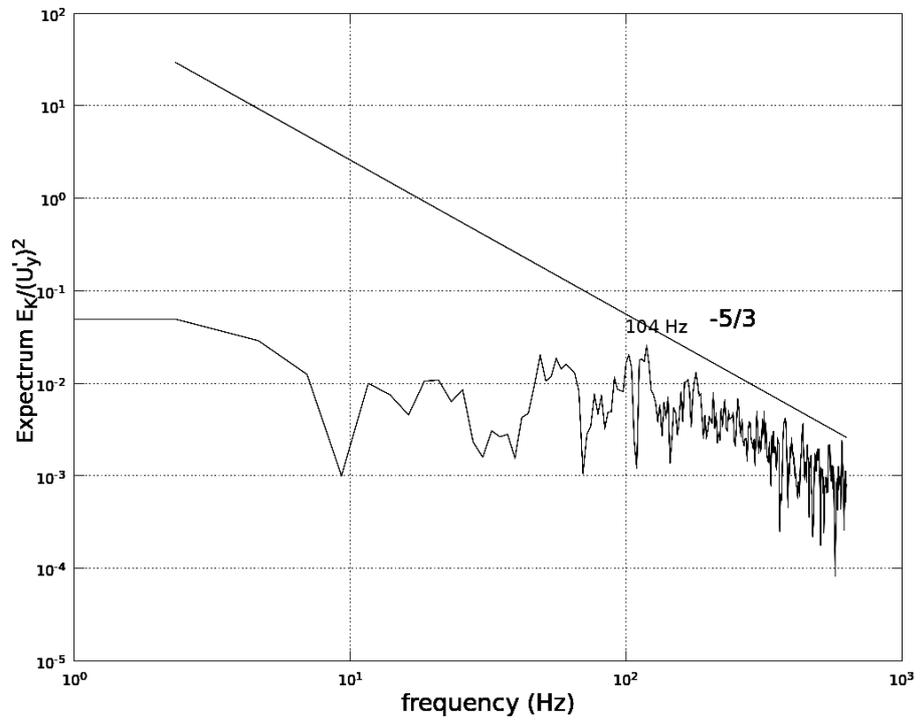


b

Figura 5.12 - Espectros de energia das componentes da velocidade longitudinal para simulações em 3D em (a) U_x , $X/Xr = 1.4$, $Y/h = 0$; (b) U_x ; $X/Xr = 1.4$, $Y/h = 0.41$.



c



d

Figura 5.13 - Espectros de energia das componentes da velocidade transversal para simulações em 3D em (c) Uy , $X/Xr = 1.4$, $Y/h = 0$; (d) Uy , $X/Xr = 1.4$, $Y/h = 0.41$.

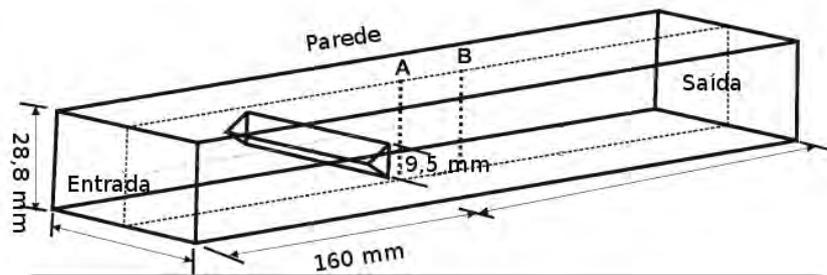


Figura 5.14 - Localização dos pontos A e B de medição dos parâmetros no canal.

Para a análise do campo de velocidade, três tipos de modelos de turbulência foram utilizados. Eles são o modelo de uma equação, o modelo dinâmico de uma equação e o modelo de Smagorinsky. Perfis das componentes da velocidade média filtrada, longitudinal $U_x(Y)$ e transversal $U_y(X)$ em $X/Xr = 0,8$ e $X/Xr = 1,4$ são mostrados nas Figs. 5.15, 5.16, 5.17 e 5.18. A medição dos perfis é feita no plano central do canal, como mostrado na Fig. 5.14, onde a estação A, que corresponde a $X/Xr = 0,8$, está localizada na região que contém a esteira e onde a recirculação é bem desenvolvida. Já a estação B, que corresponde a $X/Xr = 1,4$, se encontra fora da zona de recirculação e tem menor influência da bolha.

Os resultados obtidos numericamente em $X/Xr = 0,8$ estão em concordância com os resultados experimentais, capturando a região de recirculação. Entretanto o modelo dinâmico sobrestima a velocidade na região atrás do obstáculo e não consegue recuperar a velocidade negativa do escoamento. Na região externa a zona de recirculação, que vai desde a parte externa da esteira onde termina o bloqueio até a parede, todos os modelos recuperam os valores experimentais. A jusante, da região de recirculação em $X/Xr=1,4$ (Fig. 5.16), a distribuição da componente da velocidade longitudinal também está de acordo com os resultados experimentais. No entanto o modelo dinâmico mostra uma moderada subestimação na região da esteira. Nesta simulação, os modelos de Smagorinsky e de uma equação dão resultados mais próximos dos valores experimentais.

O perfil da componente transversal da velocidade instantânea daria uma ideia da posição onde os vórtices são gerados, mas como os perfis mostram valores da velocidade média, esses vórtices não correspondem aos vórtices de von Karman, é sim a um par de vórtices contra rotativos no bordo de fuga do obstáculo. A componente transversal da velocidade é subestimada por todos os modelos na região atrás do obstáculo ($Y/h < 0,6$) Fig. 5.17.

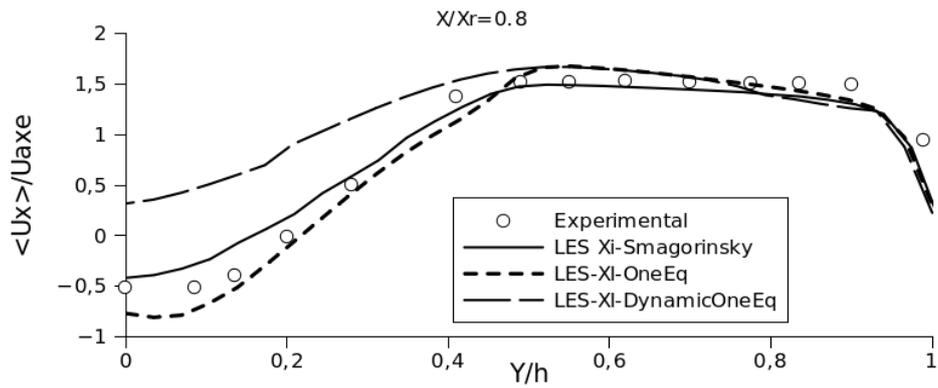


Figura 5.15 - Caso inerte. Perfis de velocidades longitudinais médias para os modelos de Smagorinsky, de uma equação e dinâmico de uma equação para U_x em $X/X_r = 0.8$.

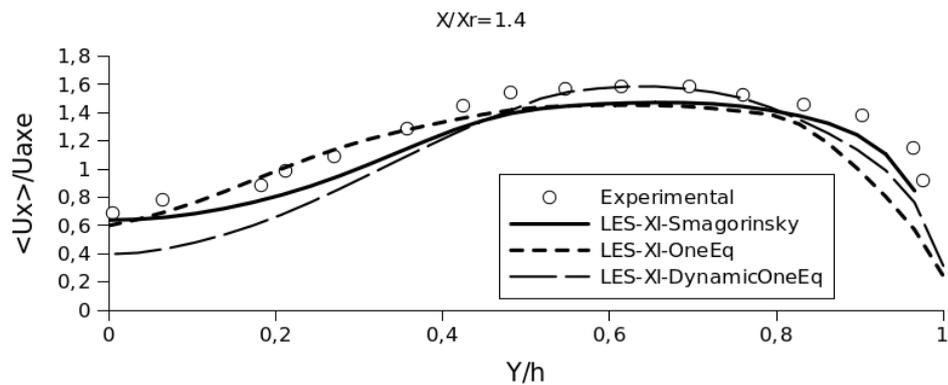


Figura 5.16 - Caso inerte. Perfis de velocidades longitudinais médias para os modelos de Smagorinsky, de uma equação e dinâmico de uma equação para U_x $X/X_r = 1.4$.

O modelo de Smagorinsky e o modelo de uma equação mostram um mínimo na curva de velocidade transversal em $Y/h = 0,4$. Isto está relacionado com a bolha de recirculação gerada pelo obstáculo e que provavelmente se encontra localizada a uma altura correspondente à localização transversal da borda do obstáculo sobre a linha A . Isto é mostrado pelos dados experimentais. O modelo dinâmico mostra uma menor aproximação na região da bolha.

Para a zona acima e abaixo da bolha de separação, até próxima da parede ($Y/h > 0,6$), os modelos registram uma melhora em relação à comparação com os resultados experimentais. O modelo de Smagorinsky é o que apresenta melhores resultados,

obtendo velocidades um pouco maiores do que as observadas no experimento. No entanto, os resultados se encontram dentro dos limites do erro experimental. À jusante, em $X/Xr = 1,4$ Fig. 5.18, todos os modelos mostram melhor desempenho. Porém o modelo dinâmico é o que mais se aproxima dos dados experimentais. Erros de pouco significado ocorrem na medição experimental e podem ser a fonte das diferenças com as simulações. No entanto, melhores aproximações próximo à parede, são mostradas por todos os modelos.

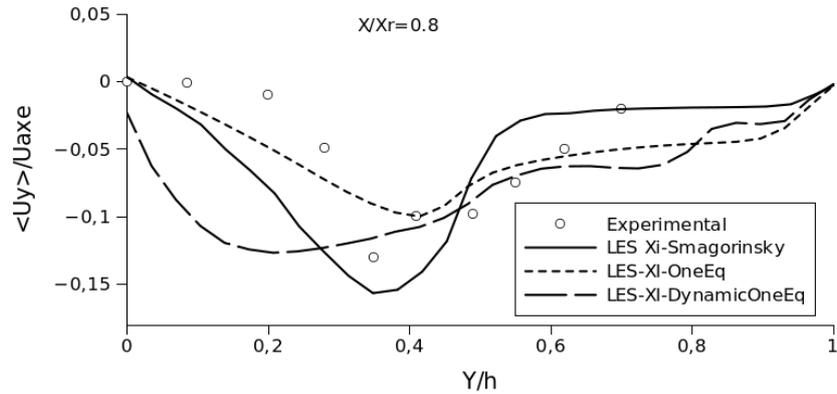


Figura 5.17 - Caso inerte. Perfis de velocidades normais médias U_y para modelo de Smagorinsky, de uma equação e dinâmico de uma equação em $X/Xr = 0.8$.

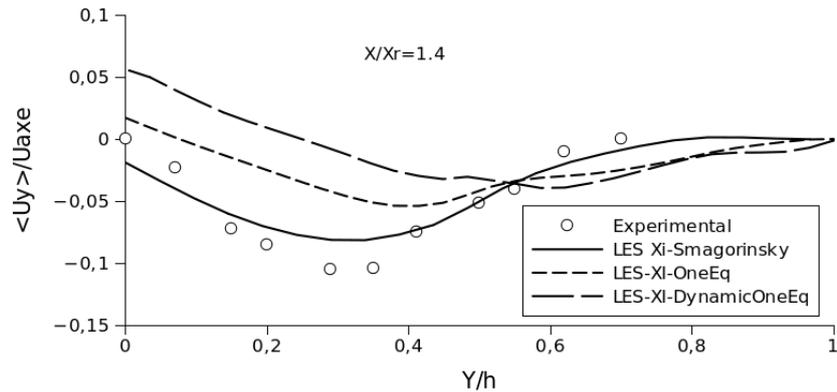


Figura 5.18 - Caso inerte. Perfis de velocidades normais médias U_y para modelo de Smagorinsky de uma equação e dinâmico de uma equação para em $X/Xr = 1.4$.

5.1.2.2 Escoamento reativo

Para o caso reativo 3-D, os resultados também são baseados nos três modelos SGS de turbulência, o de Smagorinsky, o de uma equação e o dinâmico de uma equação. Para o presente estudo do escoamento reativo, comparou-se os valores obtidos experimentalmente por Sanquer (SANQUER, 1998) para o caso com diedro triangular com 33 % de bloqueio do canal, para uma razão de equivalência de 0,65, correspondente ao experimento $r1 - 65$ de Sanquer.

Primeiramente, obteve-se os valores das propriedades termo-físicas com vista a obter o valor da temperatura. Em seguida, derivou-se as outras propriedades. Os resultados para o propano com uma razão de equivalência de 0,65 foram obtidos mediante um cálculo da rotina *adiabaticFlameT*. A rotina de cálculo é mostrada no anexo B.

As condições de contorno foram mantidas como no caso inerte e um ponto de ignição foi localizado a 0,05 m, na linha central do canal, atrás do obstáculo, como mostra a Fig. 5.19. Ele foi ligado no tempo 0,28 seg. e tem a finalidade de distribuir a variável de regressão b . Este ponto de ignição foi imposto como condição de contorno durante alguns instantes do processo. A partir de um dado instante, a ignição foi suspensa quando a esteira reativa estava caracterizada e a reação se manteve.

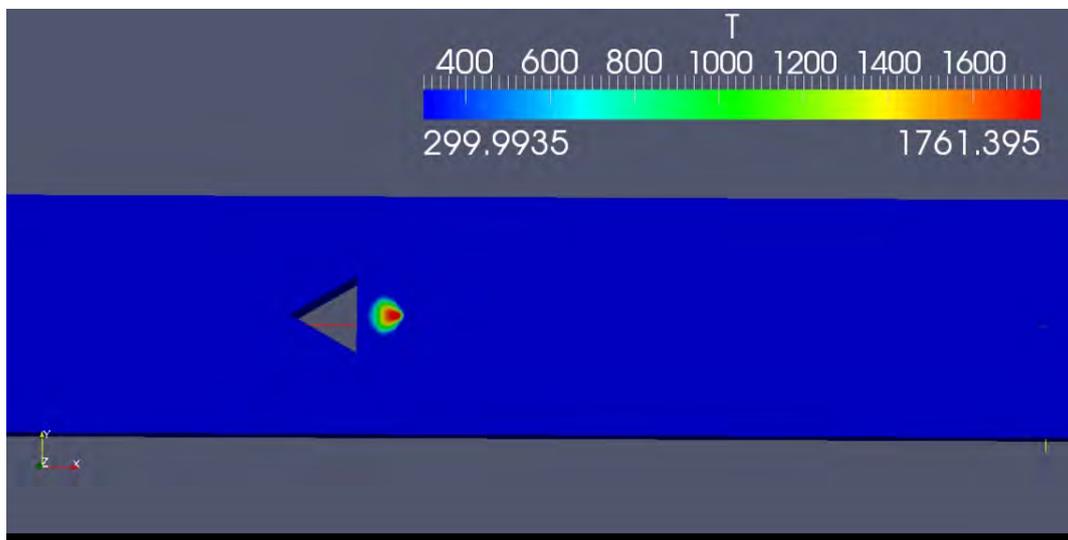


Figura 5.19 - Ponto de ignição para escoamento reativo.

A análise da propagação de ondas de pressão, relacionada a excitação acústica, não é foco desta tese, mas é importante salientar que resultados obtidos nesse sentido

são fonte para realizar pesquisas posteriormente. Usualmente, os campos de instabilidade de chama produzidos em combustão são de três tipos (LIEUWEN; ZINN, 2005): Rotacionais, acústicos e entrópicos. Nesse sentido, a análise da pressão, como potencial fonte de perturbação, é mostrado na Fig. 5.20, onde se observa que os modos acústicos estão associados ao campo de vorticidade. Altos níveis de flutuação da pressão são alcançados como produto da instabilidade de chama. Em todo caso, ondas de pressão são formadas na região da chama, que se propagam em direção transversal ao escoamento, interagindo com as paredes sólidas.



Figura 5.20 - Isocontornos de pressão para o caso reativo.

O espectro de energia cinética para o caso reativo é mostrado na Fig. 5.21. As séries de tempo da velocidade foram tomadas em $X/Xr = 1$ e $Y/h = 0$. Como no caso inerte, a simulação recuperou a taxa de decaimento da energia de $-5/3$, mostrando que a malha é adequada também para a simulação com escoamento reativo. Um pico no espectro de energia pode ser observado em 94 Hz, que é um valor próximo do obtido experimentalmente por Sanquer (1998), que foi de 89 Hz.

Perfis de velocidade longitudinal e transversal em duas diferentes posições na direção longitudinal ($X/Xr = 0,8$ e $X/Xr = 1,4$) são apresentados nas Figs. 5.22, 5.23, 5.24 e 5.25. Novamente, resultados numéricos dos modelos de sub-malha de Smagorinsky, de uma equação, e dinâmico de uma equação foram comparados com dados experimentais.

A distribuição da velocidade longitudinal em $X/Xr = 0,8$ é apresentada na Fig. 5.22. Comparado ao escoamento inerte a expansão volumétrica causada pela geração de calor foi incrementada na zona de recirculação. Como pode ser apreciado, a velocidade no centro do canal ficou negativa e bem próxima do valor experimental

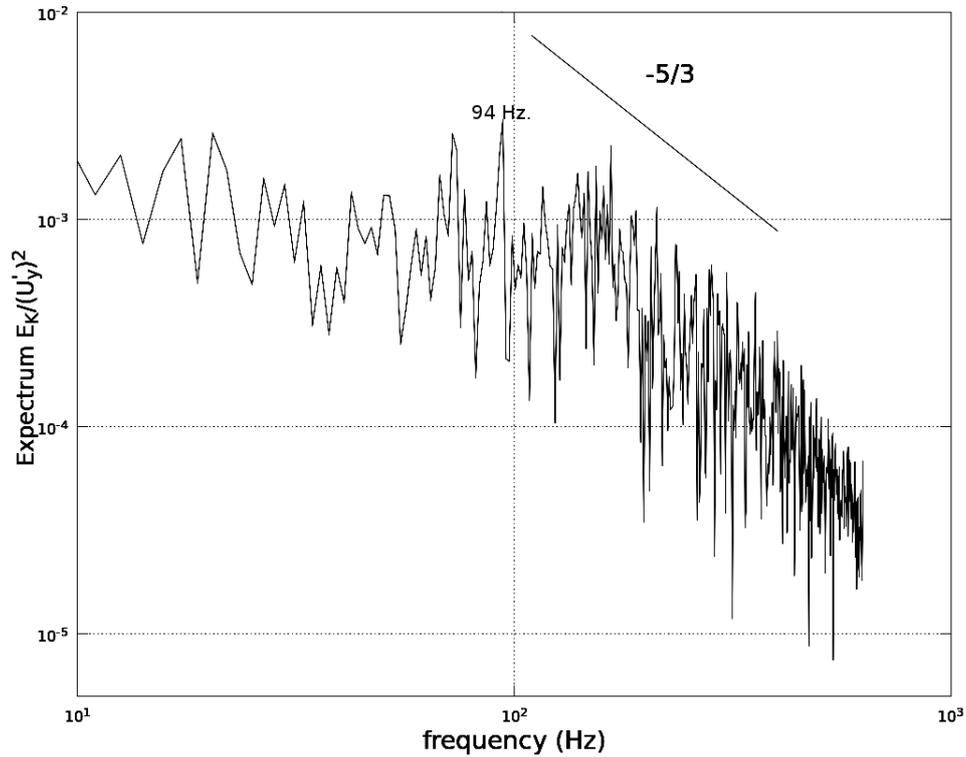
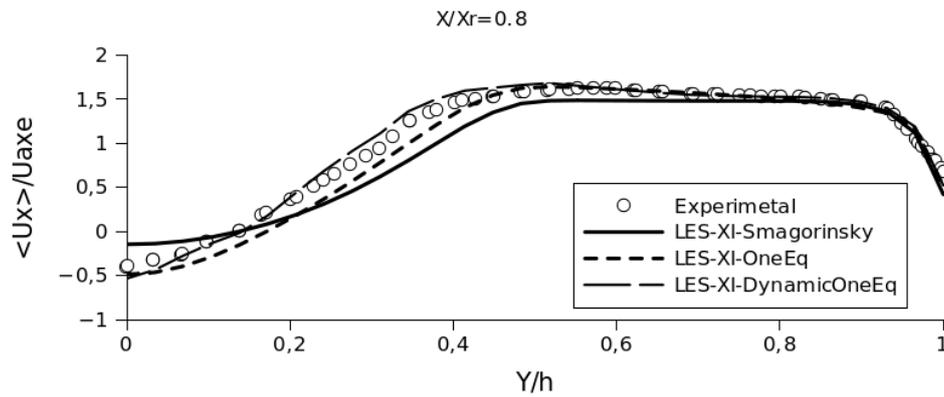


Figura 5.21 - Espectros de energia da componente da velocidade longitudinal para simulações em 3D em $X/Xr = 1$ e $Y=0$.

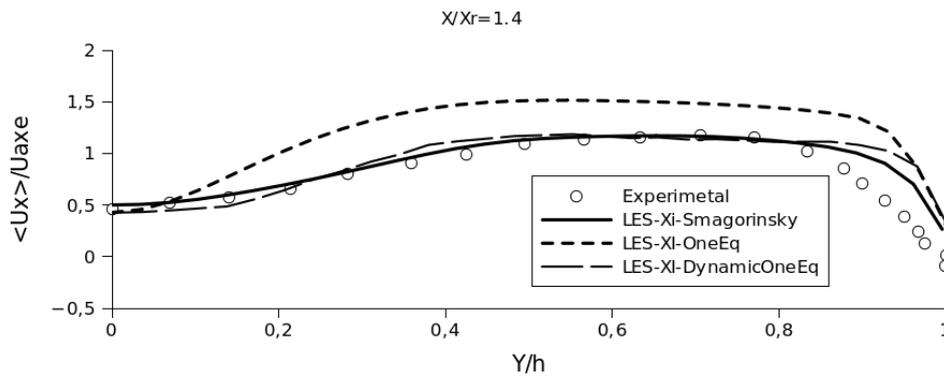
nos três modelos. Em $X/Xr = 1,4$, os resultados das simulações, para o perfil da componente da velocidade longitudinal, também resultam muito próximos do experimental, como se pode ver na Fig. 5.23. No entanto, o modelo de uma equação sobrestimou a distribuição da velocidade, indicando um leve desvio. Como pode ser apreciado nos dois gráficos para a velocidade longitudinal, os três modelos melhoram suas predições perto da parede.

Os valores da componente da velocidade transversal em $X/Xr = 0,8$ são apresentados na Fig. 5.24. As grandes estruturas rotacionais criadas pelo obstáculo diminuíram em intensidade, conforme afastavam-se deste. Geralmente a magnitude da componente da velocidade transversal é tão baixa quanto no caso inerte pela redução dos vórtices. Isso é resultado do aumento dos efeitos viscosos pelo aumento de temperatura. Uma característica do escoamento reativo é a repentina diminuição da velocidade transversal na frente de chama entre $Y/h = 0,6 - 0,7$, efeito não observado no escoamento inerte. Esta queda é mostrada fracamente pelos modelos de Smagorinsky e de uma equação. Já o modelo dinâmico não mostra esse efeito.



(a)

Figura 5.22 - Caso reativo. Perfis de velocidade longitudinal média para modelo de Smagorinsky, de uma equação e dinâmico de uma equação para U_x em $X/Xr = 0.8$.

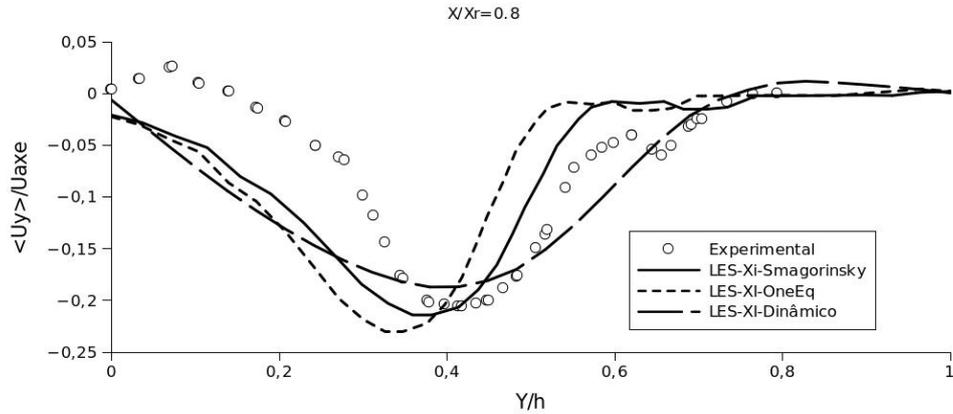


(a)

Figura 5.23 - Caso reativo. Perfis de velocidade longitudinal média para modelo de Smagorinsky, de uma equação e dinâmico de uma equação para U_x em $X/Xr = 1.4$.

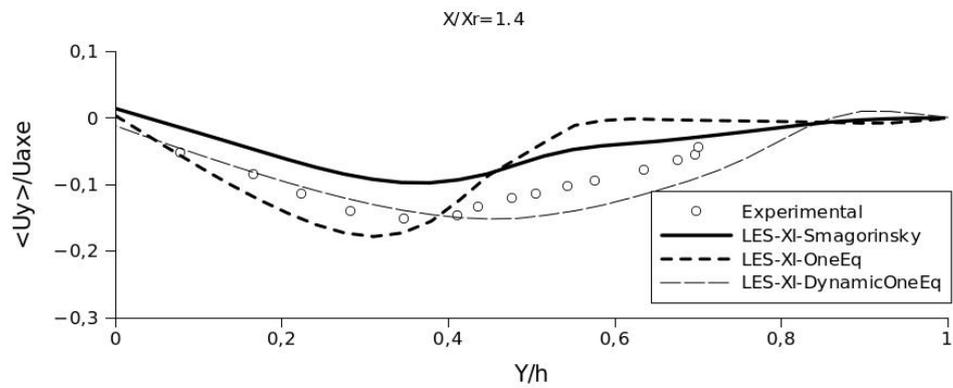
Os três modelos mostram uma subestimação da componente transversal da velocidade em relação ao experimental na região da bolha atrás do obstáculo ($Y/h < 0,4$). Por outro lado, na região fora da esteira, aproximando-se da parede, a tendência melhora e o modelo dinâmico mostra um melhor desempenho nos resultados em comparação ao modelo de Smagorinsky e de uma equação. Esses resultados não são conclusivos para determinar qual modelo é mais apropriado para a simulação no caso reativo. Este mesmo comportamento é também observado para a componente da velocidade transversal em $X/Xr = 1,4$ na Fig. 5.25. Neste ponto, a zona em que a componente da velocidade transversal tinha uma queda por causa da frente de chama desaparece. Todos os modelos de turbulência usados tem um desempe-

no bom em geral e capturam a tendência da distribuição da velocidade observada experimentalmente.



(a)

Figura 5.24 - Caso reativo. Perfis de velocidade normal média para modelo de Smagorinsky, de uma equação e dinâmico de uma equação Uy em $X/X_r = 0.8$.



(a)

Figura 5.25 - Caso reativo. Perfis de velocidade normal média para modelo de Smagorinsky, de uma equação e dinâmico de uma equação para Uy em $X/X_r = 1.4$.

O perfil da variável de avanço, calculado pelo modelo dinâmico, é apresentado nas Figs. 5.26 e 5.27 para duas seções. A simulação captura o comportamento geral. Apesar do fato de a simulação sobrestimar a variável de avanço dentro da zona de chama, na frente de chama em $c = 0,05$ com $Y/h = 0,6$ os valores coincidem com o resultado experimental para $X/X_r = 0,35$ e subestimam os valores em $X/X_r = 1,4$.

No entanto, Sanquer (1998) menciona que o valor experimental resultante deve estar deslocado para a esquerda da posição atual.

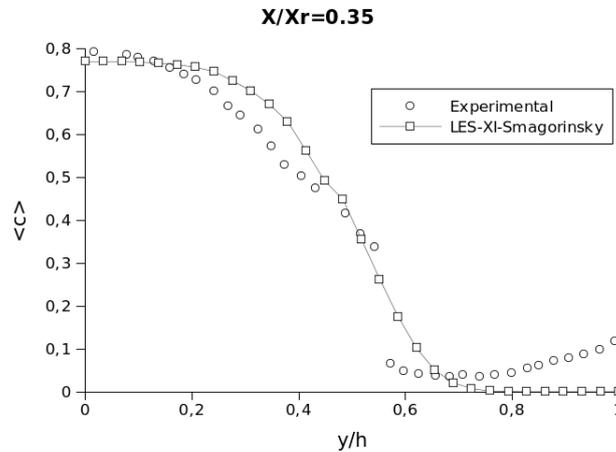


Figura 5.26 - Perfil da variável de avanço em $X/Xr = 0,35$.

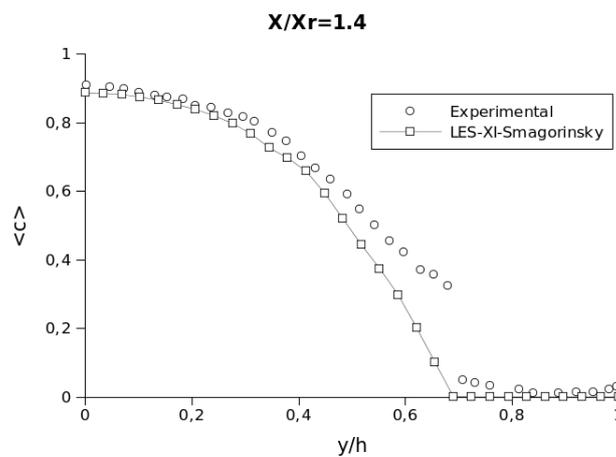


Figura 5.27 - Perfil da variável de avanço em $X/Xr = 1,4$.

Na Fig. 5.28, a chama mostra uma região pouco enrugada e o acompanhamento da propagação da esteira a jusante é bem desenvolvida, também. A razão para isto acontecer é determinada pelo número de Karlovitz e de Damköhler, que neste caso corresponde a $Da = 4.5$ e $Ka = 1.3$ e se encontra na região de chama enrugada delgada (ver Fig.2.7).

A distribuição da vorticidade para o caso reativo pode ser apreciada na Fig. 5.29.

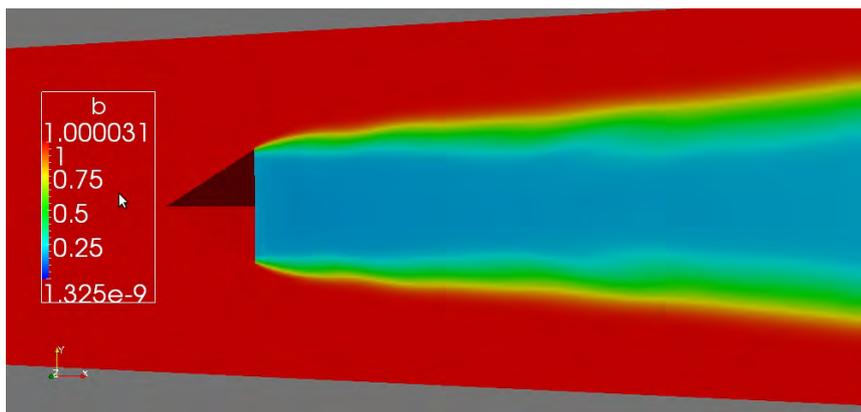


Figura 5.28 - Isocontornos da variável de avanço.

Nela, mostra-se a estrutura dos vórtices no plano (X, Y) para o centro do canal. Como na discussão de Park e Ko (2011), a reação química estabiliza os efeitos da emissão de vórtices. McMurthy et al. (1985) mostraram que a combustão ocorre rapidamente no núcleo dos vórtices, provocando uma queda na densidade por expansão térmica. Como o momento angular é conservado, um incremento na área do vórtice resulta numa diminuição na sua intensidade. O grande torque baroclínico resultante e o gradiente de pressão enfraquecem fortemente responsável pelos vórtices de von Karman. Como resultado, um par de vórtices estacionários aparece nas bordas do obstáculo a jusante, de forma simétrica, correspondentes aos observados por Fureby e Moller (1995) e consistentes com os dados experimentais de Fureby e Lofstrom (1994) e Veynante et al. (1996).

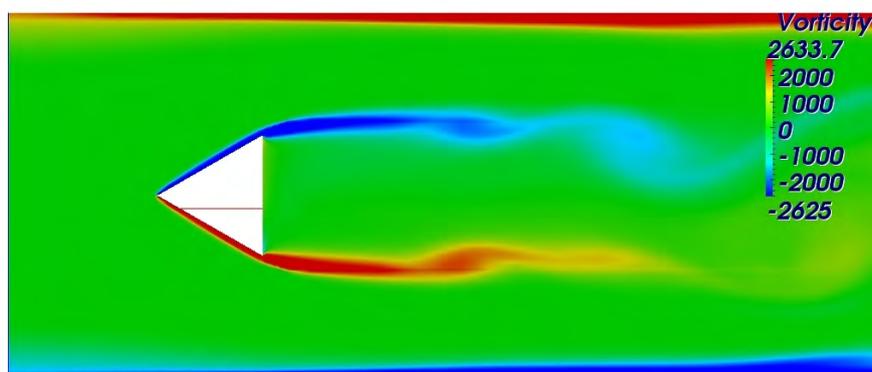


Figura 5.29 - Vorticidade para o caso reativo.

No caso reativo, o característico desprendimento de vórtices alternados atrás do

obstáculo desaparece, sendo estes deslocados a jusante, como um fraco esticamento da chama. A vorticidade perto da zona de bloqueio é esticada no caso reativo, a expansão da esteira de vórtices é menor que no caso inerte, o que corresponde ao comportamento descrito por Park e Ko (2011).

Para o caso reativo, um valor de 1730 K foi obtido para a temperatura média da chama em $X/Xr = 0,8$ com o modelo dinâmico. A temperatura adiabática de chama, para uma razão de equivalência de 0,65, corresponde a 1750 K para o C4H8. As Fig. 5.30 e 5.31 mostram a distribuição na direção normal, para um perfil correspondente à simulação de chama de pré-mistura.

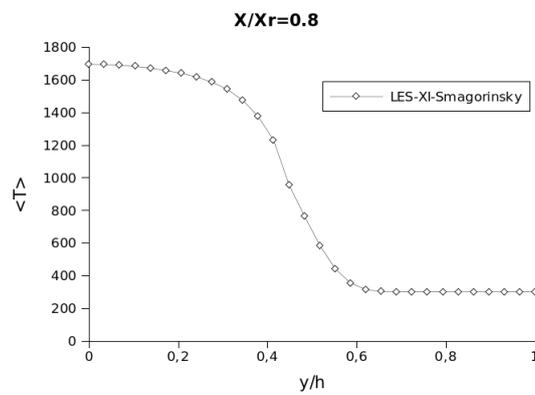


Figura 5.30 - Perfil de temperatura média em X=0,35 m.

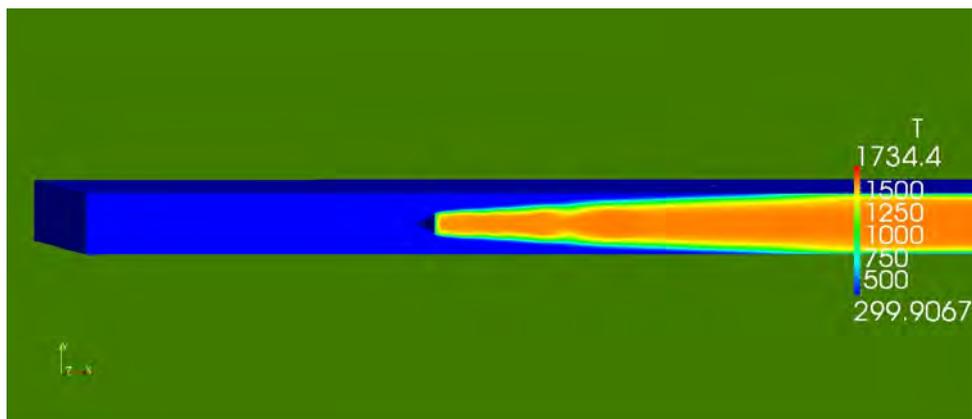


Figura 5.31 - Isocontornos da temperatura.

5.2 Modelo PaSR Não Pré-misturado

Na presente seção são apresentados resultados de simulações de chamas de difusão. O modelo utilizado corresponde ao reactingFoam, mas com alteração do modelo de turbulência. O código original utiliza uma abordagem RANS para a análise turbulenta, já o testado neste trabalho foi modificado para SGE. Os resultados numéricos da simulação são comparados com os resultados experimentais de Sidney do experimento SANDIA HM1, que tem dados experimentais disponíveis na internet ([SYDNEY UNIVERSITY OF, 2010](#)). O queimador de corpo rombudo, ou queimador piloto HM1, fornece uma chama adequada para o estudo da turbulência com interações químicas. Ele contém uma grande semelhança com combustores utilizados em muitas aplicações industriais. Sua geometria é, portanto, adequada para um estudo computacional, porque ele tem algumas das formas complexas associadas com combustores utilizados na prática, apesar de preservar as condições de contorno relativamente simples e bem definidas.

5.2.1 Condições de Contorno e Iniciais

O queimador corpo rombudo (com código HM1E no banco de dados de chama não pré-misturada turbulenta [TNF \(2011\)](#)) é um dos melhores entre os exemplos de queimadores que produz chamas de ensaio atmosférico. Ele tem uma geometria simples, é axi-simétrico e reproduz todas as características de um combustor real. O queimador é constituído por um corpo cilíndrico, rodeado por uma corrente de ar e é caracterizado por um orifício em seu centro por onde se injeta o combustível (ver Fig. 5.32, onde são reportadas as dimensões do queimador). À jusante do corpo existe um campo de escoamento complexo, composto de uma ampla zona de recirculação, que garante a presença de gases quentes o suficiente para estabilizar a chama (ver Fig. 5.33).

O queimador é alimentado com uma mistura de CH_4 e H_2 (1:1 em volume) como combustível, tendo um valor de 0,04662 para a razão de mistura estequiométrica.



Na equação global estequiométrica 5.4, levando em conta a razão de mistura definida como:

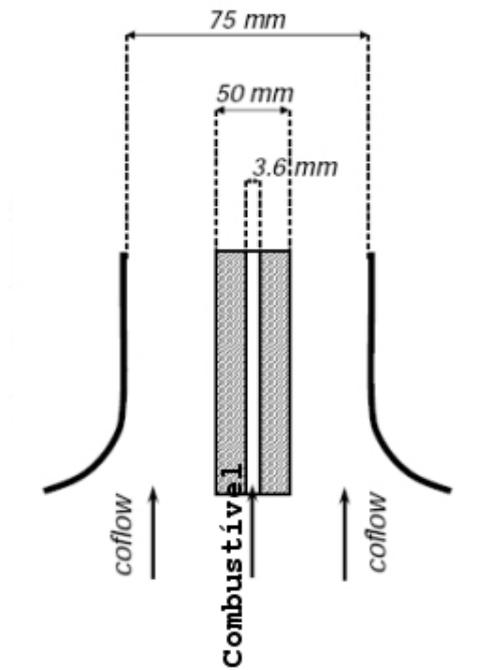


Figura 5.32 - Esquema do queimador corpo rombudo SANDIA HM1.

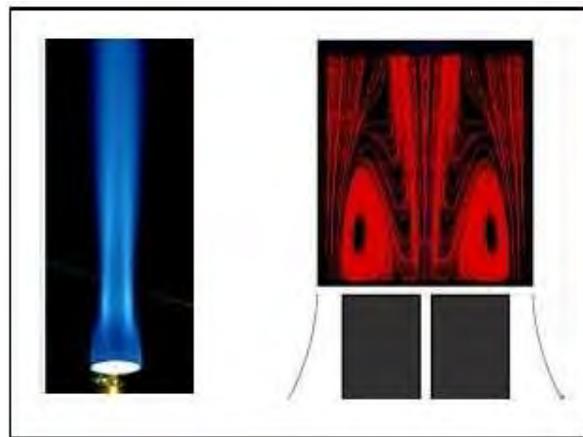


Figura 5.33 - Representação esquemática das zonas de recirculação e propagação do queimador corpo rombudo SANDIA HM1.

$$f_{mix} = \frac{\text{massa de combustível}}{\text{massa de oxidante}}, \quad (5.5)$$

e razão de mistura estequiométrica:

$$f_s = \frac{\text{massa de combustível estequiométrica}}{\text{massa de oxidante estequiométrica}}, \quad (5.6)$$

a razão de equivalência é:

$$\phi = \frac{f_{mix}}{f_s}. \quad (5.7)$$

Teríamos para f_s :

$$f_s = \frac{16}{2,5[32+3,76(28)]} = 0,04662. \quad (5.8)$$

Esta chama representa um caso teste suficientemente complexo. Apenas a extensão da zona de recirculação é dificilmente reproduzível com modelos de turbulência de duas equações, mas é a chave para a estimativa da estabilização da chama. Baixos valores da razão de mistura estequiométrica podem causar fortes discrepâncias no campo de temperatura, mesmo que pequenos erros na fração de mistura ocorram (ANDREINI, 2004). Hossain et al. (2001) demonstraram que a transferência de calor por radiação não é capaz de induzir grandes efeitos sobre o campo de temperatura, correspondendo a uma mudança menor do que 50 K nas simulações realizadas com o modelo de troca radiativa. Esses resultados não são mostrados neste trabalho, mas devemos esperar uma diferença entorno de 50 K na simulação atual. A simulação abrange 3 zonas:

1. - A zona de recirculação onde os efeitos de mistura turbulenta ocorrem.
2. - A zona de extinção ou zona de garganta, a jusante da zona de recirculação, onde se reiniciam os processos de fluxo uniforme.
3. - A zona do jato, que se encontra mais distante do orifício de injeção, onde a chama se reacende e se propaga livremente.

As malhas utilizadas para as simulações são mostradas nas Figs. 5.35 e 5.36. Uma é axi-simétrica e a outra uma cunha de 60 graus em 3D com condições cíclicas. A primeira contém 98.930 volumes e na segunda o número é de 582.600 volumes. O espectro de energia cinética para o caso 3D, foi obtido somente para o caso reativo. Ele é mostrado na Fig. 5.34. As séries de tempo da velocidade foram tomadas em $X = 40$ mm e $Y/h = 0$. A simulação recupera a taxa de decaimento da energia de

-5/3, mostrando que a malha é adequada para a simulação com escoamento reativo turbulento.

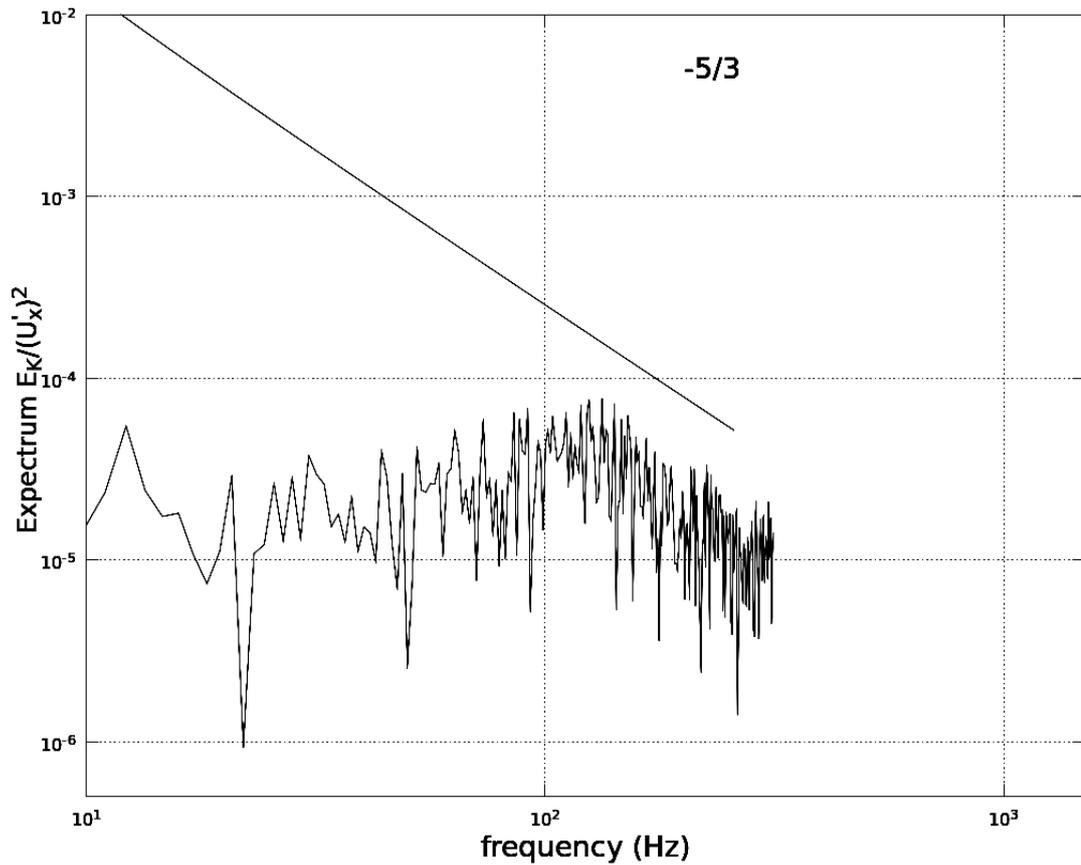


Figura 5.34 - Espectro de energia cinética para o queimador SANDIA HM1. Espectros de energia das componentes da velocidade longitudinal para simulações em 3D em $X=40$ mm e $Y=0$.

As condições de contorno da temperatura e velocidade são obtidas do experimento e são mostradas na tabela 5.2.1.

O mecanismo cinético químico reduzido utilizado para esta simulação é o mesmo que utilizado por Azevedo (2007). Ele é composto de 34 espécies e 47 reações para a decomposição do metano.

Tabela 5.2 - Condições de contorno de entrada para o experimento do queimador corpo rombudo.

ENTRADA	$v[m/s]$	$k[m^2/s^2]$	$\epsilon[m^2/s^3]$	$T[K]$
Combustível	118	208.88	1.638×10^5	300
Ar	40	1.895	224.72	300

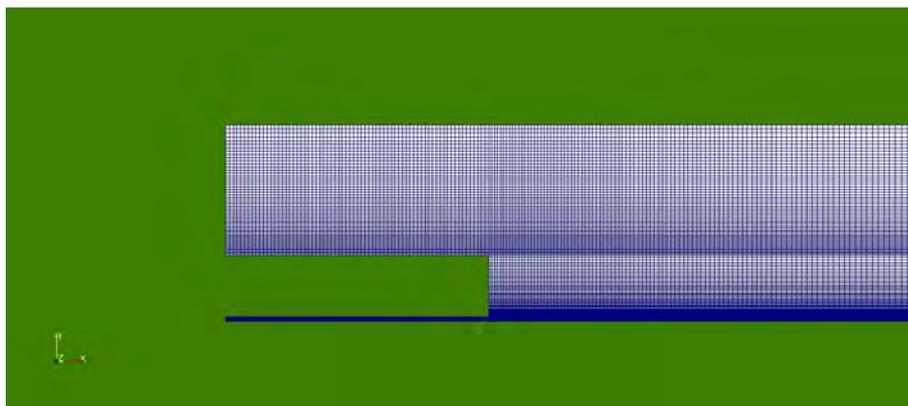


Figura 5.35 - Malha axi-simétrica para o experimento SANDIA corpo rombudo HM1.

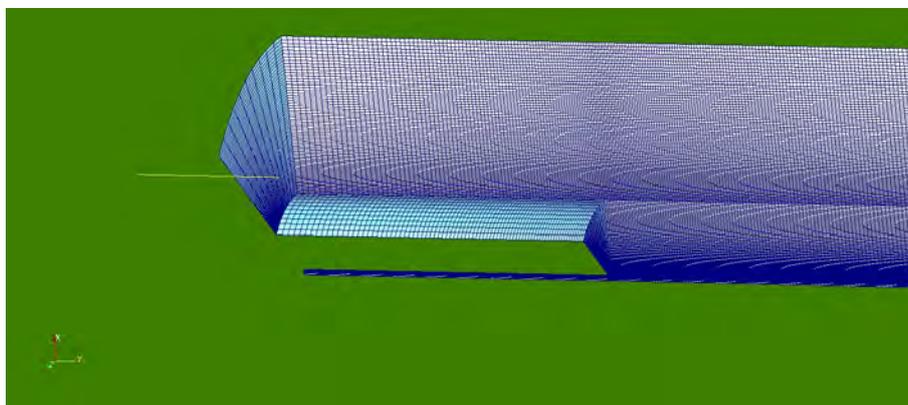


Figura 5.36 - Malha 3-D para o experimento SANDIA corpo rombudo HM1.

5.2.2 Os Mecanismos da Química Detalhada

No cálculo da química detalhada do escoamento reativo laminar, tipicamente participam de 20 a 40 espécies e de 100 a 200 reações elementares, deveriam ser consideradas. Isto permite uma descrição realista da ignição e combustão para vários combustíveis para a captura da produção de poluentes. É claro que para realizar esses cálculos é necessária uma grande capacidade computacional, ainda mais utilizando-

se modelos de turbulência do tipo SGE.

Uma solução um tanto discutível é a construção de um mecanismo químico reduzido, que utiliza valores tabelados (TURÁNYI, 1994), apesar de manterem as principais características do problema sem resolver, ou resolve parcialmente a cinética química, que terá de ser alcançada com iterações temporais (PETERS; ROGG, 1993). O propósito de utilizar esses mecanismos reduzidos é criar um sistema de equações algébricas não lineares ao invés de utilizar um sistema de equações diferenciais ordinárias rígido, substituindo este pela aproximação PaSR.

Para o presente trabalho, o mecanismo cinético químico utilizado foi o POA (Pedro-Azevedo), criado por Domingo Azevedo (AZEVEDO, 2007) e que contém 34 espécies e 46 reações. Ele foi testado originalmente com o mecanismo completo GRI 3.0 e obtém-se uma boa aproximação com dados experimentais para o experimento de um queimador para combustão de chama pré-misturada.

5.2.3 Análise do Mecanismo Reduzido

O mecanismo usado neste trabalho foi o POA, determinado por Azevedo (AZEVEDO, 2007), o mecanismo foi elaborado com base em outro mecanismo reduzido proposto por Romero, o ROM (ROMERO, 1998). No trabalho de Azevedo (2007), ele foi testado com 2 tipos diferentes de combustível; 100% CH_4 e 50% CH_4 e 50% H_2 , e com 6 valores de razão de equivalência, que vão de 0,7 a 1,2, além dos seguintes parâmetros de comparação:

- A temperatura dos gases,
- A velocidade dos gases,
- As frações de CH_4 , O_2 , CO , CO_2 , H_2O , H_2 e OH e
- As frações normalizadas de NO , HCN e NH_3 .

Para validar os resultados do mecanismo, foram analisados o POA e o ROM em função da distância axial a um queimador em função do tempo de residência. Os resultados apresentados por Azevedo (2007) mostraram-se bastante adequados quando comparados com o mecanismo ROM. O mecanismo apresenta, na maior parte das vezes, perfis mais concordantes com os mecanismos detalhados, sendo que os piores resultados apresentados pelo mecanismo ROM foram com uma razão de equivalência de 0,7.

Tendo as referências de mecanismo POA sido testados por Azevedo (2007) com o mesmo teor de combustível num queimador, testou-se esse mecanismo em comparação com o mecanismo completo para verificar seu desempenho. O mecanismo POA de 36 espécies e 34 reações (ver anexo A) e o mecanismo completo do GRIMECH 3.0 (GOLDEMBERG et al., 2010) são descritos no anexo A. Eles foram testados no código CANTERA (GOODWIN, 2010), software para química cinética, termodinâmica e processos de transporte, do tipo aberto e usado para calcular chamas de difusão unidimensional não pré-misturadas. O CANTERA permite a obtenção de velocidade, temperatura e perfis de espécies químicas, para modelar a fase gasosa química desses mecanismos a um custo computacional razoável. Embora a maioria dos sistemas de combustão apresentem chamas turbulentas, para o teste do mecanismo é frequente utilizarem-se rotinas que descrevem chamas laminares não pré-misturadas para estudar a cinética química de um processo de combustão. Este tipo de chama é, efetivamente, unidimensional e bastante estável, o que pode permitir medições numéricas detalhadas de perfis de espécies químicas, temperatura ou velocidade do escoamento. Desta forma, a possibilidade de simular processos de transporte e de cinética química nestas chamas é muito importante para a interpretação de ensaios de combustão e da compreensão do processo de combustão.

As condições iniciais foram as mesmas impostas no experimento HM1 e os resultados podem ser vistos nas figuras 5.37 e 5.38. Para distinguir a que mecanismo corresponde cada curva desses gráficos, foram colocadas extensões para cada escalar, sendo que para o GRIMECH 3.0, usou-se a extensão G30 e, para o mecanismo reduzido POA, a extensão 36. Como pode ser apreciado, a temperatura e as concentrações de CO_2 , OH e H_2O tem um comportamento semelhante entre os dois mecanismos usados na simulação. Já no caso do CO , existe uma diferença marcante, sendo que o mecanismo POA subestima em até 0,01 o valor do GRIMECH 3.0.

A temperatura adiabática de chama, determinada pelo próprio CANTERA, alcança o valor de 2200 K e os dois mecanismos têm resultados muito próximos. Este é um valor acima do resultado observado experimentalmente no ponto mais próximo da saída de combustível ($X = 13mm$). Nos casos do $H_2O(0,18)$ e $OH(0,07)$ os valores dos dois mecanismos não diferem muito entre si, mas sempre ficam acima do valor obtido experimentalmente. Especialmente aquele correspondente ao OH , que no experimento só atinge o valor de 0,045. Nos casos do CO e CO_2 os resultados estão abaixo dos valores correspondentes ao experimental. No caso do CO a diferença não é muito grande, tendo em conta que os valores obtidos para o experimento alcançam valores entorno de 0,05 – 0,06. Como se mostra na Fig. 5.37, o valor alcançado para

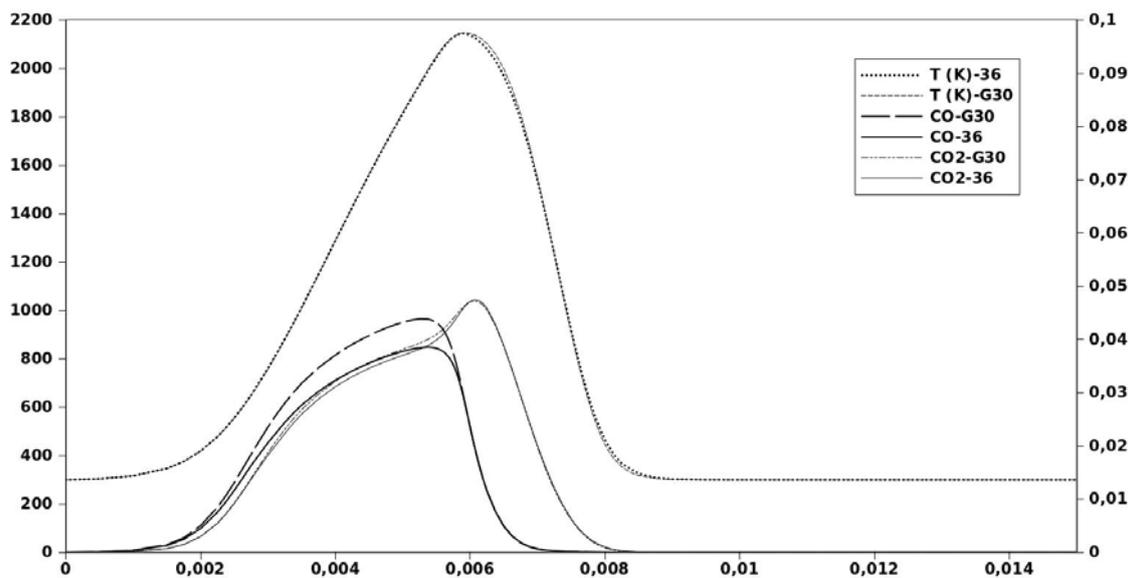


Figura 5.37 - Perfis radiais de T, CO, CO_2 obtidos usando os mecanismos GRIMECH 3.0 completo e POA 36 espécies para uma chama contracorrente com o modelo CANTERA.

o CO está acima de 0,04 para o mecanismo completo GRIMECH 3.0, mas para o mecanismo POA o valor é de 0,038, o que resulta em uma subestimação dos valores na simulação SGE, como se verá mas adiante. Já no caso do CO_2 , os mecanismos têm valores próximos entre si e entorno de 0,045, mas diferem do experimental que alcança um valor de 0,078. Isto também se reflete nas simulações com SGE.

5.2.4 Resultados Numéricos

As simulações numéricas serão realizadas de maneira sistemática para variáveis importantes, obtidas no experimento da Universidade de Sidney, para o queimador tipo SANDIA. O modelo que utiliza SGE-PaSR e os resultados são comparados em 6 posições ao longo da chama. Como se vê na Fig. 5.39, essas zonas estão repartidas em:

- zona de recirculação
- zona de início do jato,
- zona onde o jato se desenvolve livremente.

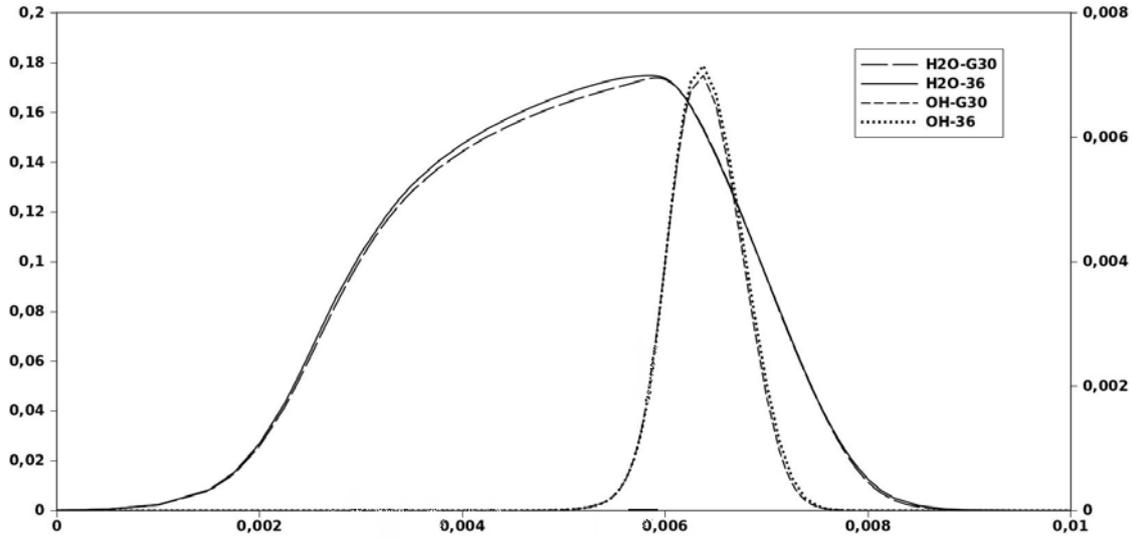


Figura 5.38 - Comparação do perfil radial de H_2O e OH entre os mecanismos cinéticos GRIMECH 3.0 completo e POA 36 espécies para chama contracorrente, efetuados no CANTERA.

Como mostra a Fig. 5.39, esses pontos estão localizados em $X/D_B = 0,26$ ou $X = 13$ mm, $X/D_B = 0,6$ ou $X = 30$ mm, $X/D_B = 0,9$ ou $X = 45$ mm, $X/D_B = 1,3$ ou $X = 65$ mm, $X/D_B = 1,8$ ou $X = 90$ mm e $X/D_B = 2,4$ ou $X = 120$ mm. D_b corresponde ao valor do diâmetro do injetor do jato e é igual a 50 mm, como mostrado na fig 5.32. Os valores obtidos nesses pontos serão comparados com os valores experimentais apresentados no TNF7, que estão disponíveis no portal da Universidade de Sidney e no portal do TNF (2011). Dados de simulações, feitas por outros centros e apresentados no mesmo portal, características dos modelos utilizados por esses centros, são apresentados na tabela 5.3.

Tabela 5.3 - Modelos de simulação utilizados para comparar com resultados numéricos do modelo PaSR.

	Abordagem	Mecanismo	Domínio
Universidade de Stanford	SGE	GRI 2.11	320x160x64
Universidade de Cornell	PDF	ARM2	25p/volx129X97
LITEC CSIC, Zaragoza TU Delft, Netherlands	RANS	GRI 3.0	160x128x80
TU-Darmstadt	SGE	97 espécies, 629 reações	4 DBB (ax.), 4.4 DBB (rad.)
PaSR-RANS	RANS	GRI 3.0 reduzido	

Primeiramente, serão analisadas a velocidade média absoluta e suas componentes longitudinal e transversal. Logo após, serão analisados os valores da temperatura e, finalmente, os valores das frações mássicas dos escalares CO , CO_2 , H_2O , OH e fração de mistura de CH_4 . Com os resultados destes valores se pode ter uma noção do que o novo modelo implementado no presente trabalho pode fazer, em termos de predição em dispositivos de combustão que apresentam estas características de chama.

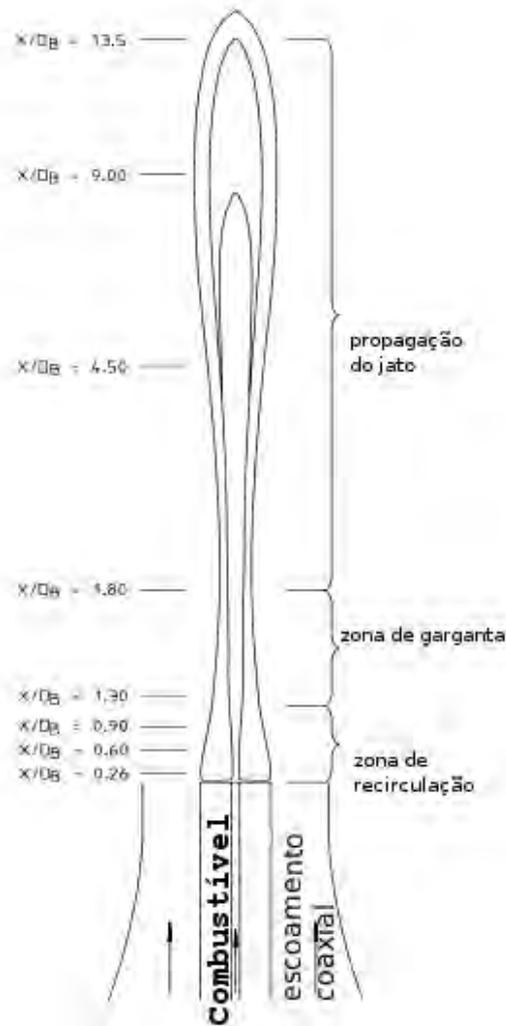


Figura 5.39 - Localização de medições típicas para corpo rombudo.

5.2.4.1 Distribuição de velocidade

Em primeiro lugar, são analisados valores da velocidade axial em perfis radiais, como mostrado nas Figs. 5.40 e 5.41. Neles, os valores experimentais são apresentados com círculos, os valores para o presente trabalho PaSR são mostrados em linhas pretas contínuas; com linhas entrecortadas grandes são apresentados resultados obtidos pelo laboratório de Delft Zaragoza; com linhas entrecortadas pequenas os valores da simulações do laboratório de Cornell e os valores da universidade de Stanford são representados com pontos. São comparados os resultados da simulação com os perfis experimentais radiais das componentes de velocidade axial em cinco locais diferentes.

A simulação prediz a velocidade com bastante precisão. Na região próxima da entrada, o decaimento da velocidade do jato de combustível é muito bem predita, indicando que a grade é suficientemente resolvida nesta região. Em todos os locais considerados, a largura da região de recirculação é bem predita também, o que indica que a dinâmica essencial da chama esta bem representada. Como pode ser apreciado, os valores para o modelo PaSR, na posição acima do queimador em $X = 15$ mm, ficam sobrestimados até próximo da linha de centro do perfil, para depois subestimá-los longe da linha de centro, ao contrário dos outros resultados simulados numericamente que subestimam estes valores no centro do perfil para sobrestimar na região externa. Nos pontos centrais da zona de recirculação em $X = 30$ mm e $X = 45$ mm, o comportamento da velocidade para a simulação SGE-PaSR é mais preciso nos primeiros 0,3 cm do raio do canal, mas ele sobrestima na parte central até 0,6 cm seguindo a direção radial, para depois subestimar na zona externa do jato. No entanto, a simulação feita neste trabalho acompanha os resultados obtidos por outros autores e apresenta melhores resultados do que eles em algumas regiões.

Nos outros pontos analisados, os resultados tendem a subestimar os valores da velocidade no centro do perfil para se aproximar dos valores experimentais até a zona externa do jato, o que é um bom sinal de que o comportamento melhora nos pontos onde o jato começa a se desenvolver fora da zona de turbulência.

Para a velocidade radial, apresentada nas Figs. 5.42 e 5.43, o comportamento do modelo PaSR-SGE concorda com os resultados SGE obtidos em Stanford e com os resultados RANS obtidos em Cornell, mas em comparação com os resultados obtidos na Alemanha (TU-Darmstadt), apresentados em triângulos, apresenta melhor precisão.

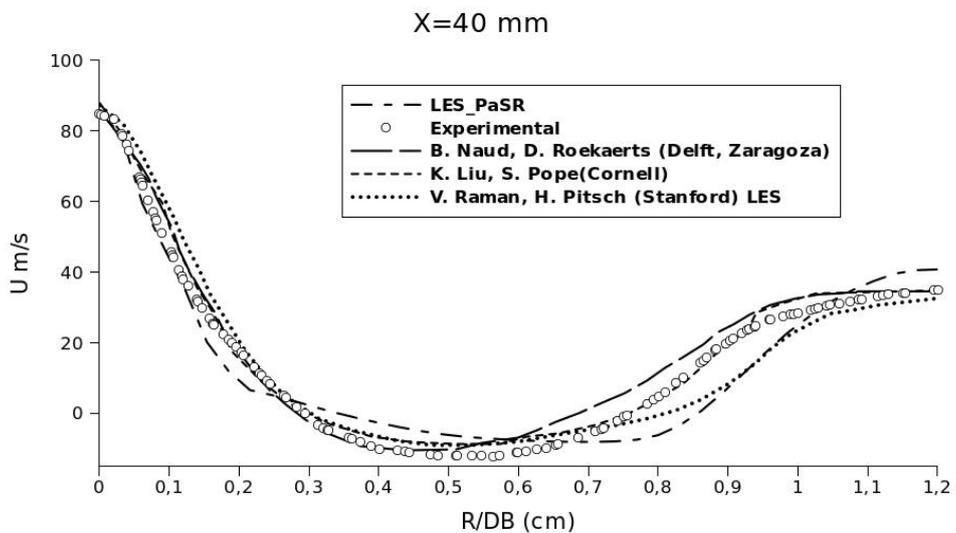
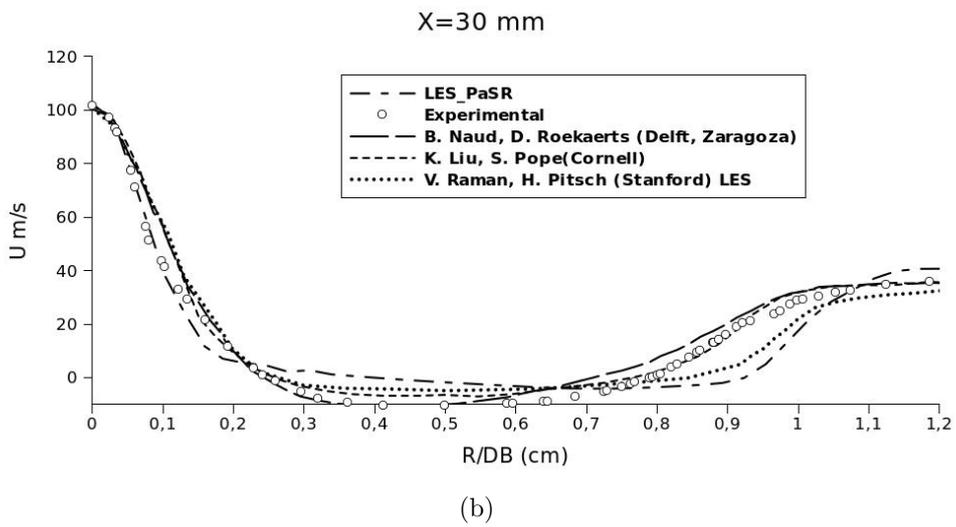
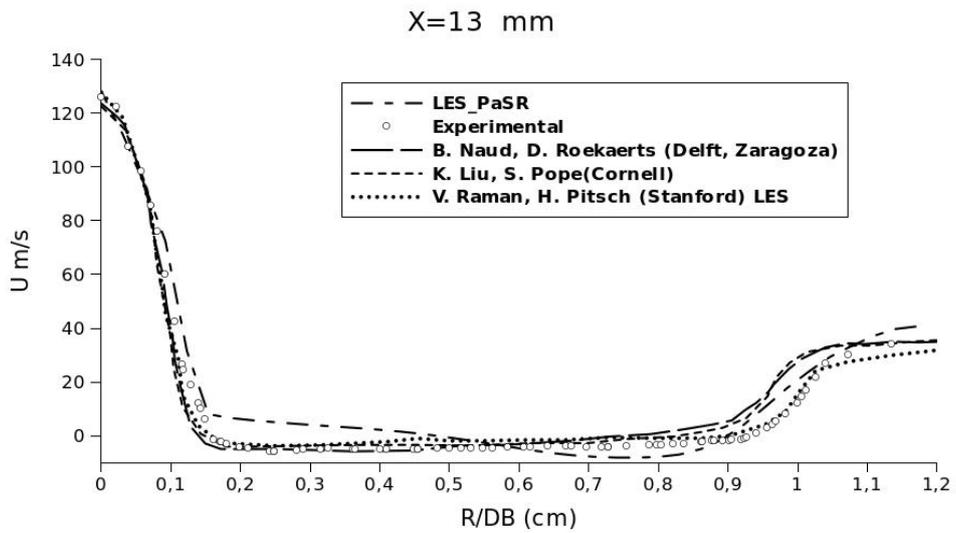


Figura 5.40 - Comparações de perfis de velocidade axial em a) $X = 10$ mm, b) $X = 20$ mm e c) $X = 30$ mm.

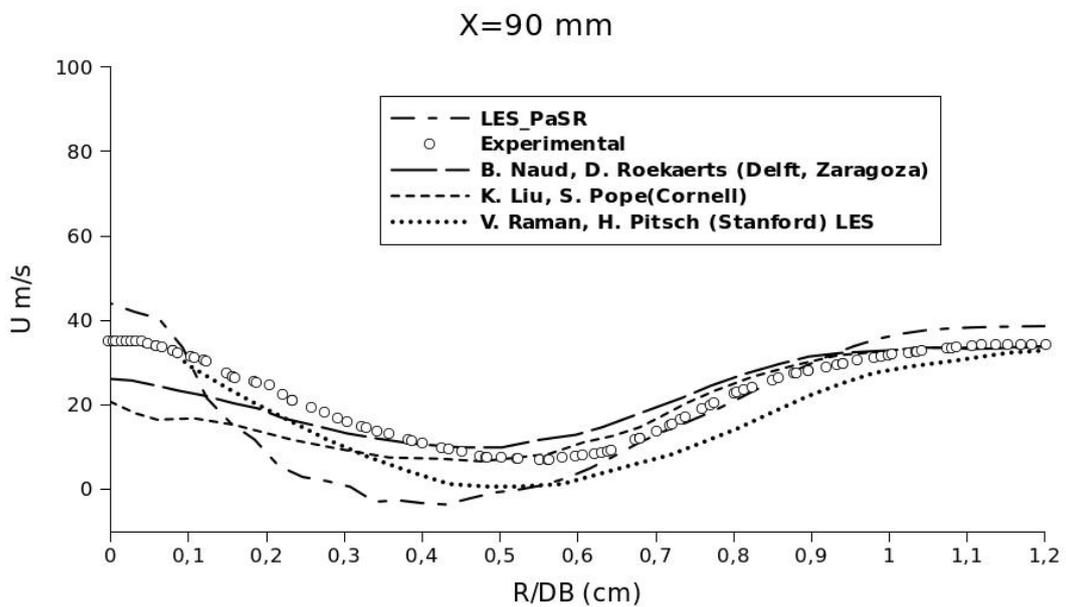
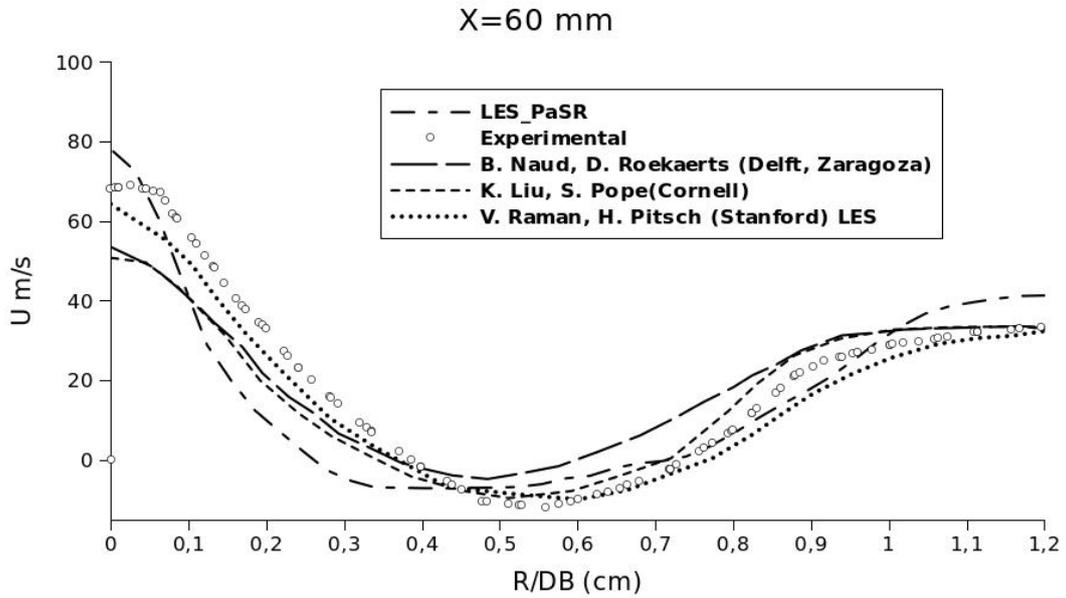


Figura 5.41 - Comparações de perfis de velocidade axial em d) $X = 50$ mm e d) $X = 90$ mm (continuação).

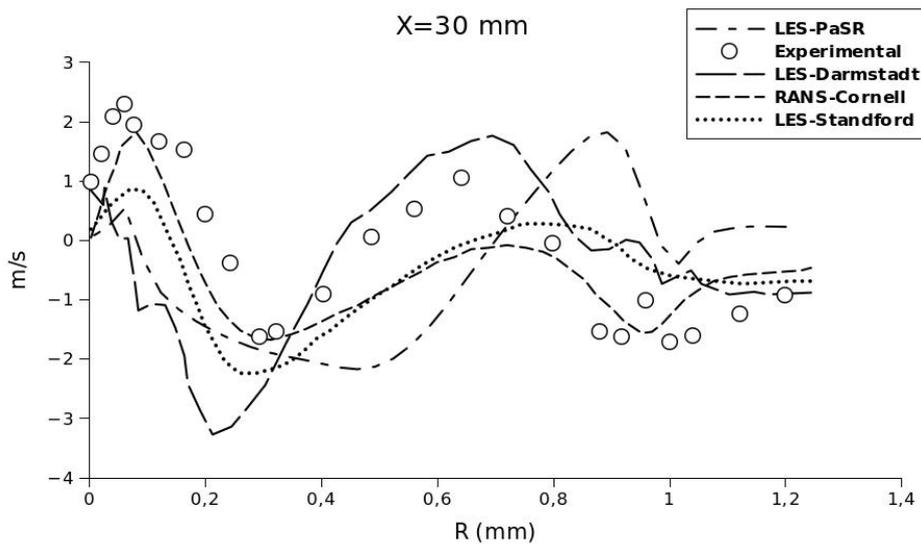
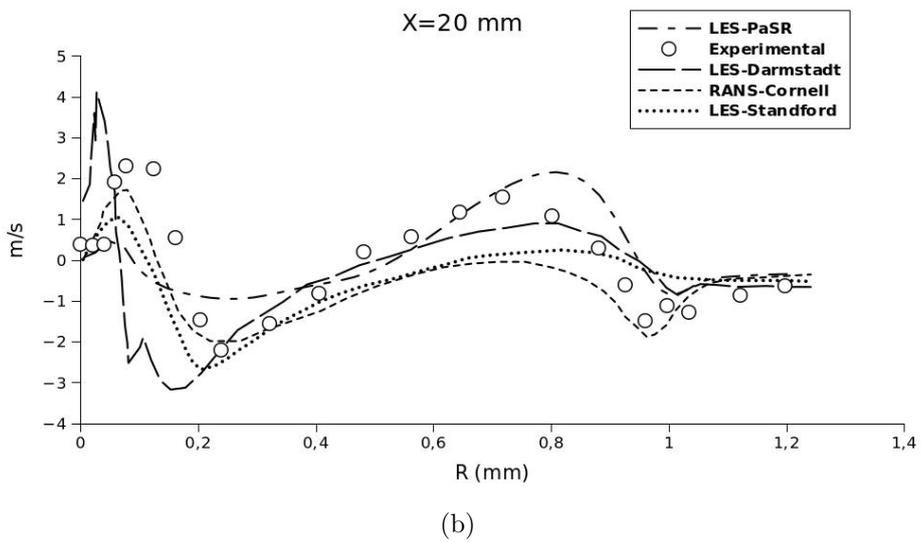
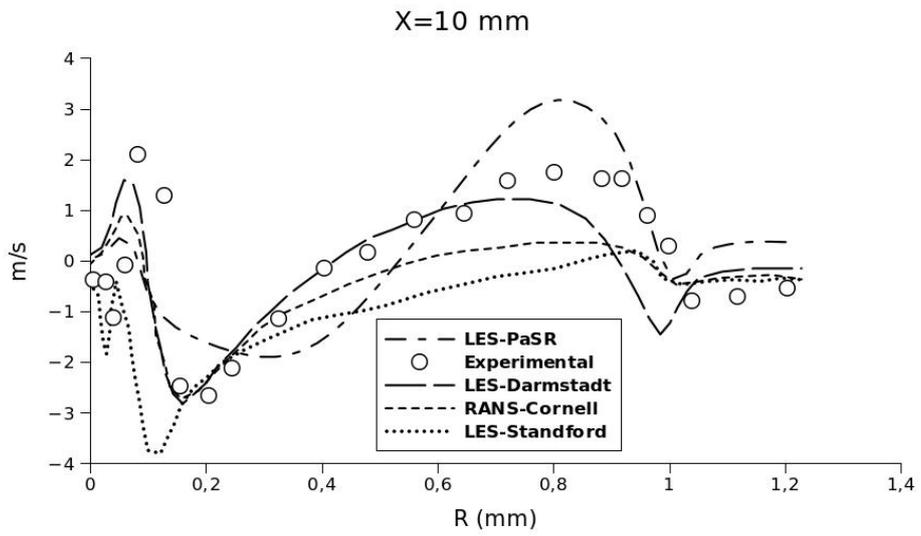
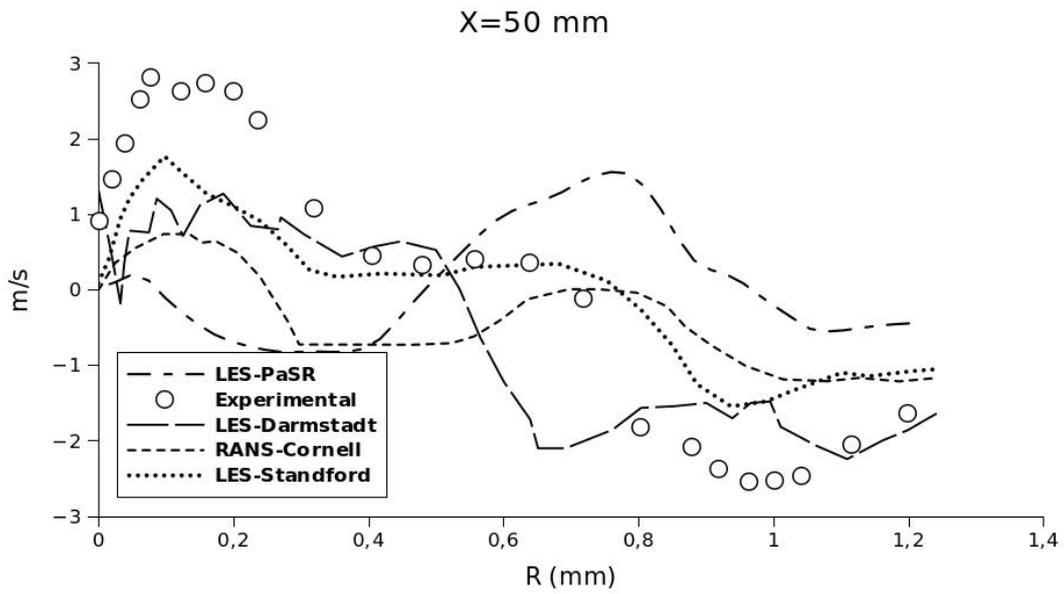
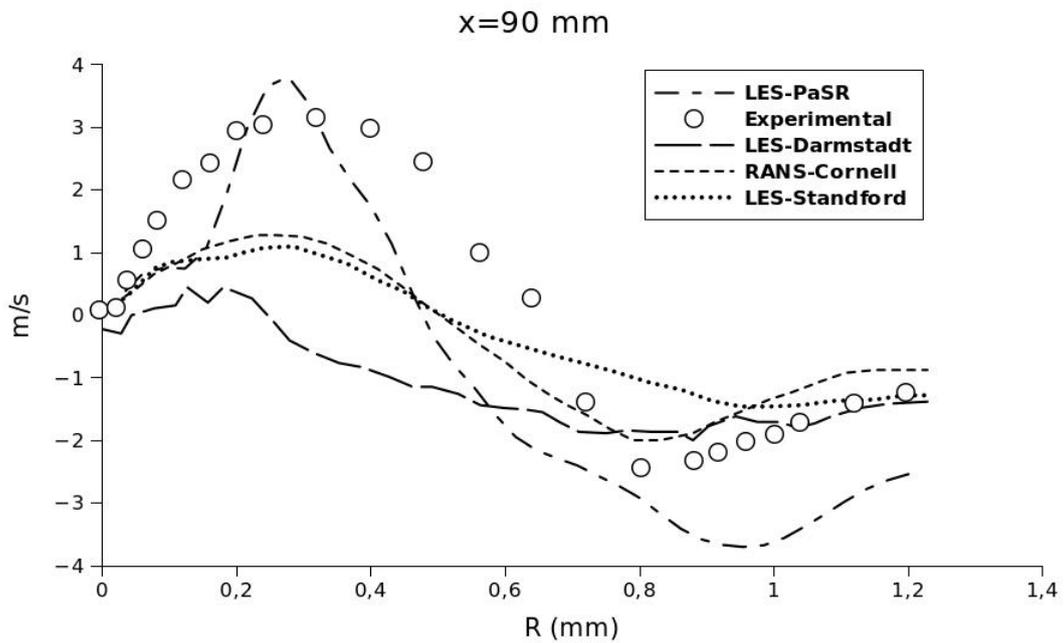


Figura 5.42 - Comparações de perfis de velocidade radial em a) $X = 10$ mm, b) $X = 20$ mm e c) $X = 30$ mm.



(d)



(e)

Figura 5.43 - Comparações de perfis de velocidade radial em d) $X = 50$ mm e d) $X = 90$ mm.(continuação).

Os pontos de medição estão posicionados em $X = 3\text{mm}$, $X = 10\text{mm}$, $X = 20\text{mm}$, $X = 30\text{mm}$, $X = 50\text{mm}$ e $X = 90\text{mm}$, como se mostra nas Figs. 5.42 e 5.43. Em todos os pontos a velocidade concorda com os resultados experimentais, a exceção do ponto $X = 0,50$, onde a velocidade fica sobrestimada. Como pode ser observado, do gráfico quase todos os modelos tem um comportamento parecido, todos eles ficam próximos do resultado experimental, especialmente no início da zona de recirculação. Logo após $X = 30\text{ mm}$ eles começam a ficar diferentes, isto está relacionado com o modelo de turbulência e também com as condições iniciais do experimento.

Nos resultados da simulação PaSR-SGE, no início da camada externa de cisalhamento, os valores da velocidade radial são um pouco subestimados, o que retarda o aparecimento das instabilidades do escoamento, subestimando a frequência de desprendimento de vórtices. Isso alonga a zona de recirculação, o que explica a sobrestimação do comprimento médio de chama. Outras discrepâncias entre valores experimentais e numéricos podem ser principalmente devido às condições de contorno na entrada (RAMAN; PITSCH, 2005). Tendo isto em conta, as previsões atuais são capazes de capturar a estrutura de chama e as características essenciais do escoamento.

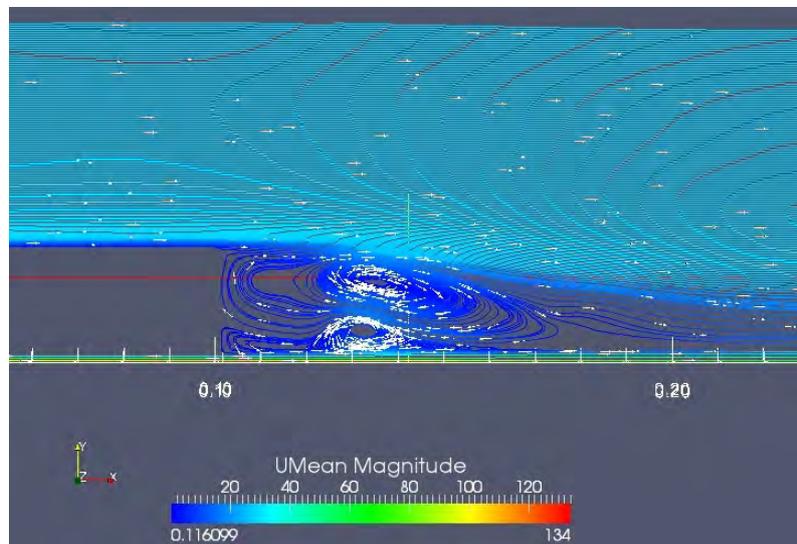


Figura 5.44 - Campo vetorial da velocidade obtido com SGE no presente trabalho.

A Figura 5.44 apresenta os vetores de velocidade em corte longitudinal no centro do queimador, que podem ser comparados com a simulação RANS de Mangani et al. (2007), mostrado na fig. 5.45. A principal vantagem nesta forma de visualização é a

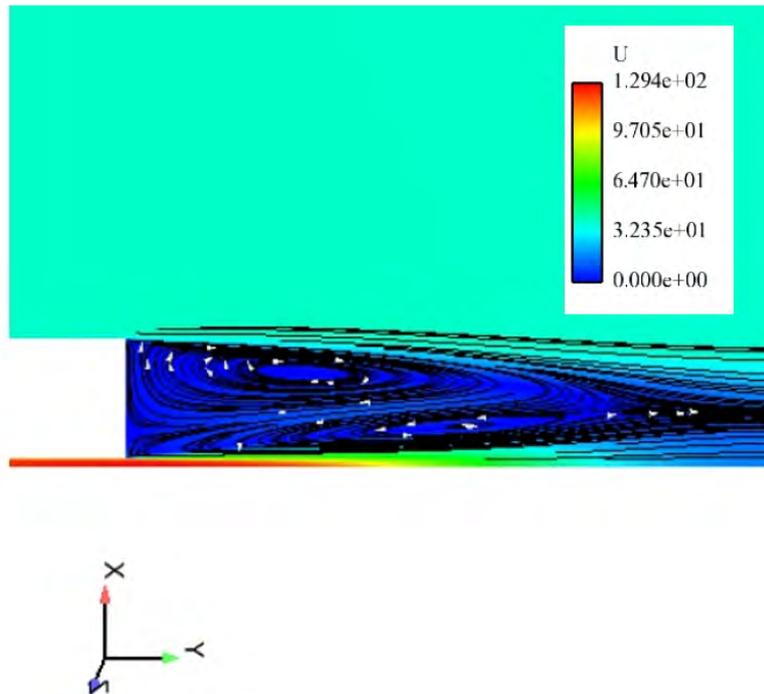


Figura 5.45 - Campo vetorial da velocidade obtido com simulação RANS (MANGANI et al., 2007).

possibilidade de se observar, simultaneamente, a direção e intensidade do escoamento reativo, para uma adequada percepção dos vetores presentes na zona de recirculação.

5.2.4.2 Distribuição de temperatura

Na Fig. 5.46 são apresentados os isocontornos de temperatura instantânea para dois tempos diferentes e, como pode ser apreciado, a complexa estrutura turbulenta tem uma forte influência na zona da garganta do jato. Portanto, é necessário ter uma malha bem refinada para poder capturar os gradientes que são desenvolvidos nessa região.

As Figuras 5.47 e 5.48 mostram a distribuição de temperatura ao longo da direção radial em diferentes posições longitudinais. Esses pontos equivalem a $X/D_B = 0,26$ ou $X = 13$ mm, $X/D_B = 0,6$ ou $X = 30$ mm, $X/D_B = 0,9$ ou $X = 45$ mm, $X/D_B = 1,3$ ou $X = 65$ mm e $X/D_B = 1,8$ ou $X = 90$ mm. O perfil de temperatura mostra um pico perto da camada externa de cisalhamento em $X = 13$ mm (Fig. 5.47 (a)). Mesmo que a fração de mistura média seja prevista com a maior precisão possível, o perfil de temperatura reflete o que as reações desenvolvem, otimizando a interface entre a zona de recirculação e a zona do escoamento do oxidante.

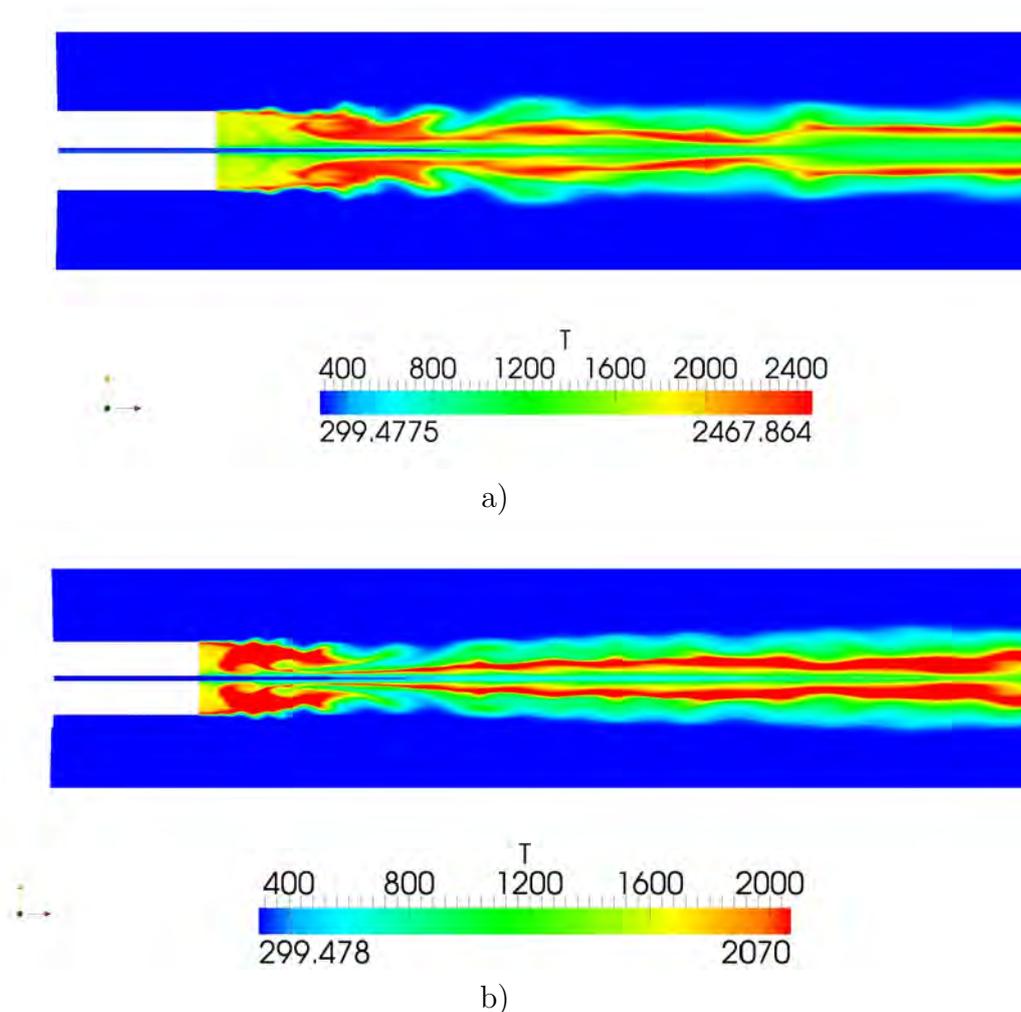


Figura 5.46 - Isocontorno de temperatura instantânea a) $t = 20$ milissegundos e b) $t = 58$ milissegundos.

O perfil de temperatura mostra uma sobrestimação no início do jato livre logo após a garganta na Fig. 5.48 (e) em $X=90$ mm. Melhores resultados são obtidos na zona média da recirculação. A temperatura na parte externa da camada de cisalhamento é bem capturada, tal como o planalto resultante da zona de recirculação onde se gera produtos de combustão quentes. Na figura 5.47 (b), o pico aparece mais fraco na borda do queimador, indicando que a chama está queimando fortemente aderida ao retentor. O processo de queima, uma vez realizada a ignição, é bem sucedido na simulação. Quando se realiza o experimento, ocorrem mais casos de extinção. Em geral, o modelo sobrestima a temperatura em quase todas as regiões de medição, provavelmente pelo uso do mecanismo usado para a simulação, principalmente logo após a zona da garganta. Outro fator importante é a velocidade que, ao ser superestimada pelo modelo de turbulência, gera maior fração de mistura e temperaturas

maiores.

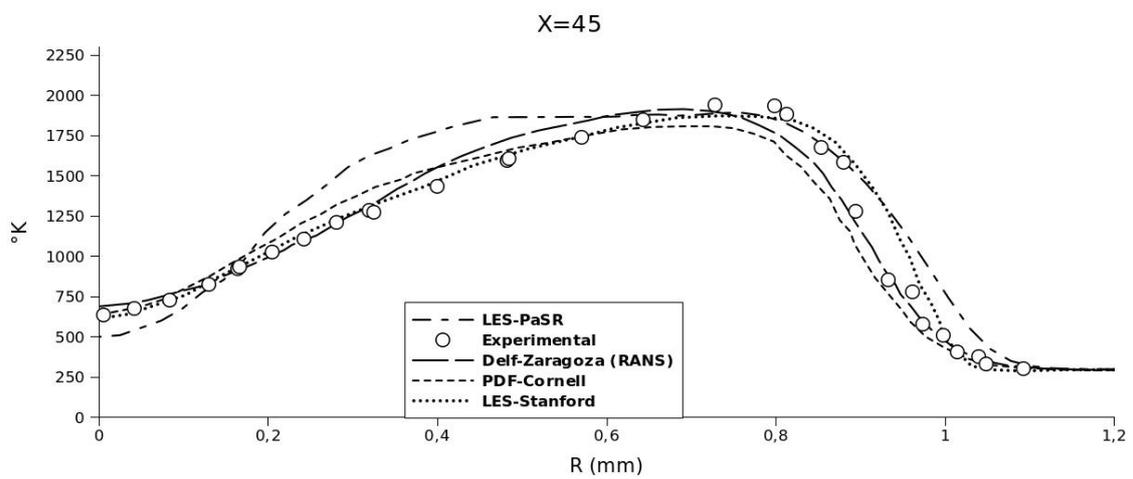
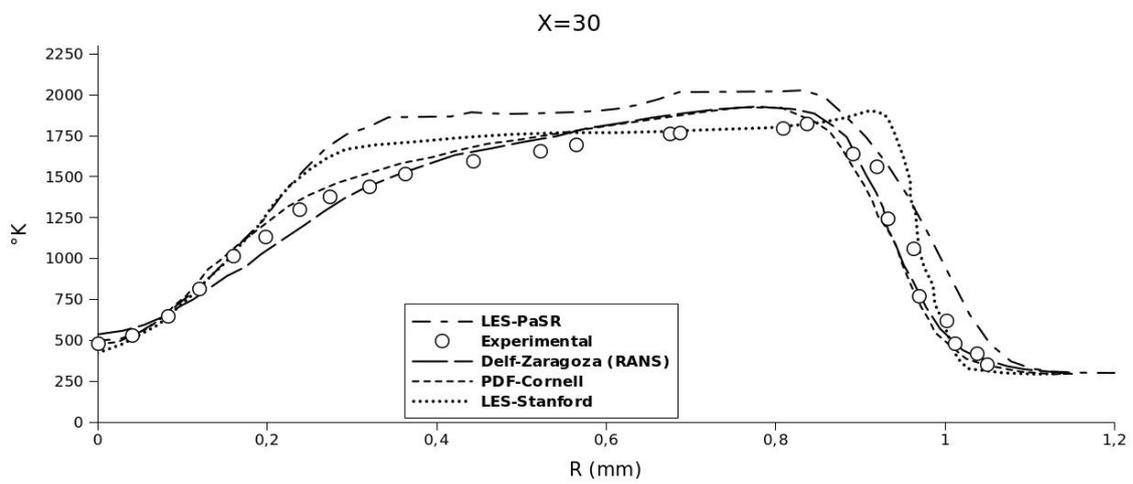
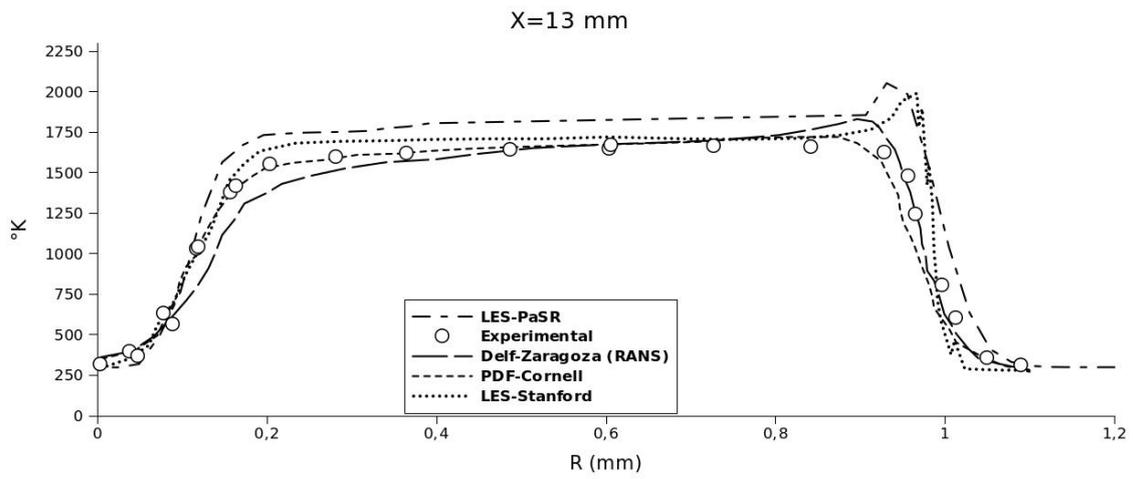


Figura 5.47 - Comparações de perfis de temperatura radial em a) $X = 13$ mm, b) $X = 30$ mm e c) $X = 45$ mm.

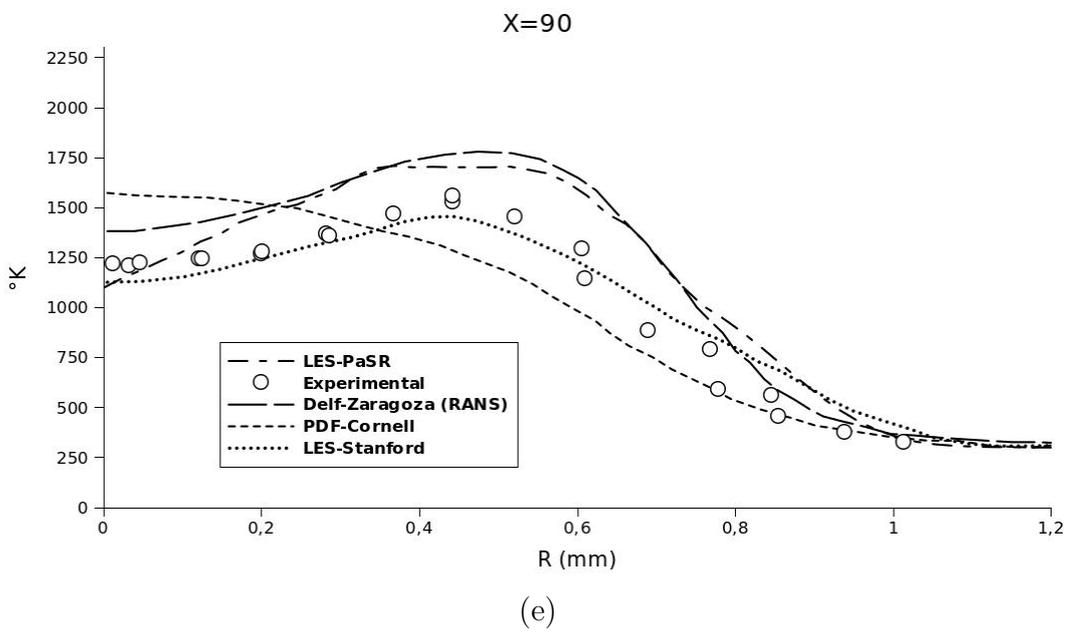
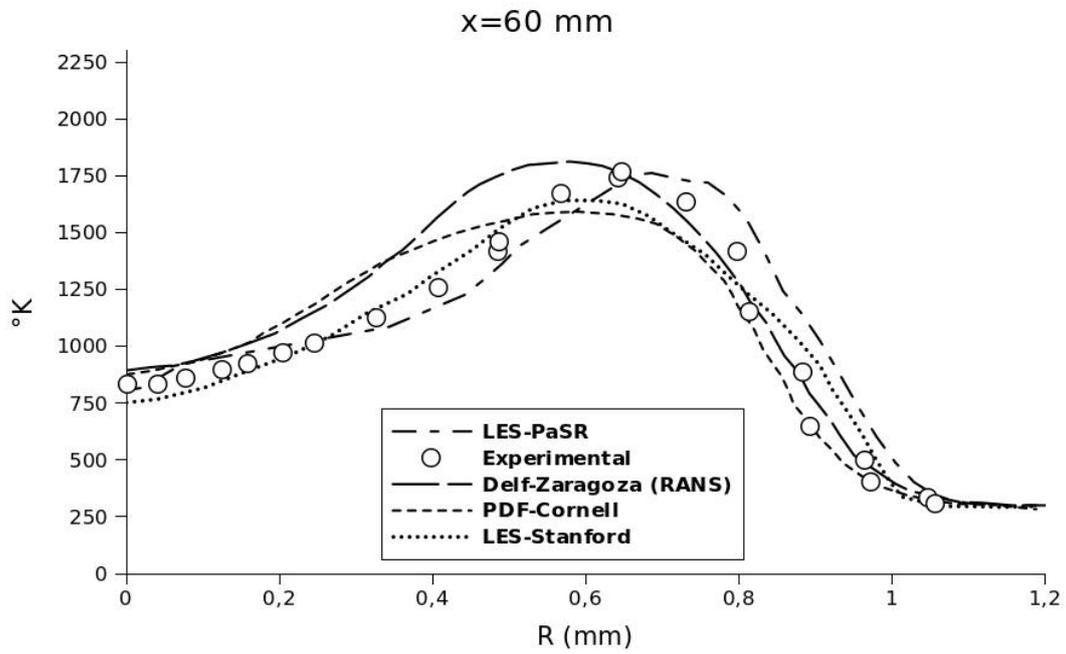


Figura 5.48 - Comparações de perfis de temperatura radial em d) $X = 65$ mm e d) $X = 90$ mm.(continuação).

5.2.4.3 Fração de mistura de CH_4

A fração de mistura mede a mistura de reagentes e está principalmente relacionada com os movimentos de grandes escalas do escoamento. As figuras 5.49 e 5.50 mostram o comportamento decrescente da fração de mistura ao longo da direção axial.

Os valores da fração da mistura do combustível são mostrados para as mesmas posições apresentadas para a temperatura. Na Fig. 5.49 (a) se pode observar que, na posição inicial em $X=13$ mm, o comportamento da fração mássica de CH_4 é muito próximo do experimental. O comportamento obtido com o atual modelo tem melhor desempenho do que o do modelo de Darmstadt. Na posição seguinte, em $X=30$ mm, o comportamento da simulação SGE-PaSR mantém a mesma tendência mostrada na primeira análise, mas com um melhor resultado na parte central e na região externa do perfil, quando comparado aos outros modelos. A partir da medição em $X=45$ mm, o perfil para a simulação SGE-PaSR mostra uma subestimação com relação aos outros modelos na zona que vai desde 0 até 0,4 cm, e em $X=60$ mm subestima desde 0,4 cm na direção radial, até 0,8 cm. Para a posição $X=90$, a simulação SGE-PaSR subestima a maior parte do perfil experimental, provavelmente por uma diminuição na quantidade de CH_4 levada pela corrente do combustível nesta zona. No entanto, o modelo tem melhor desempenho do que o de Cornell e acompanha a mesma tendência do modelo de Darmstadt. Como pode ser apreciado na análise global, o modelo simulado no presente trabalho acompanha o resultado experimental, desde a parte mais próxima ao queimador, tendo uma tendência a sobrestimar a fração da mistura a partir da zona da garganta, para subestimar a fração de mistura, na região de jato livre.

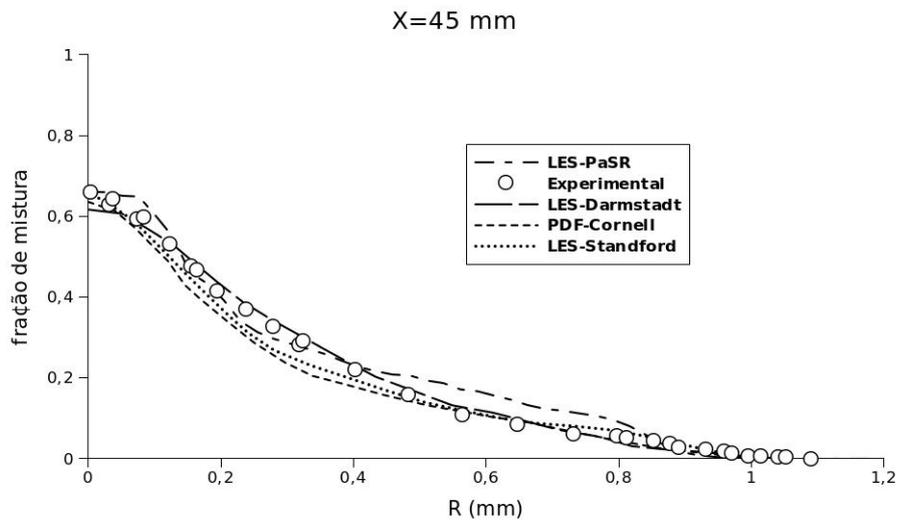
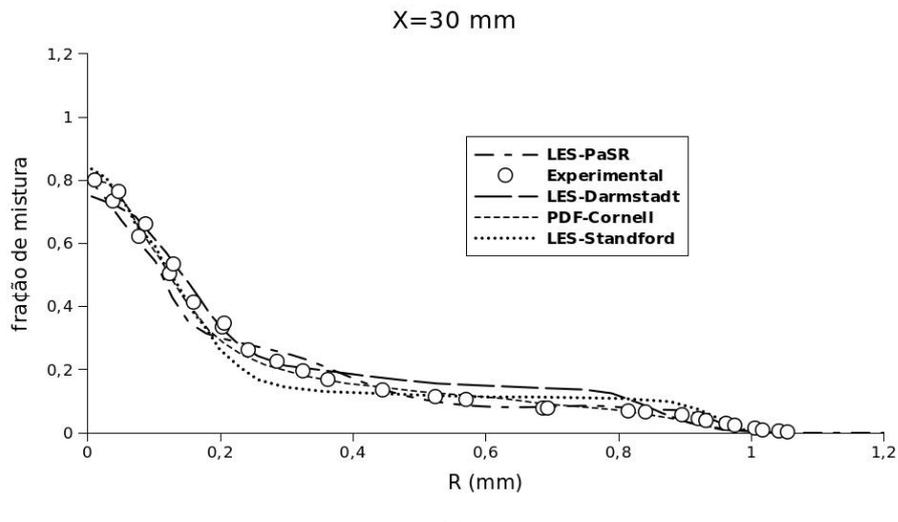
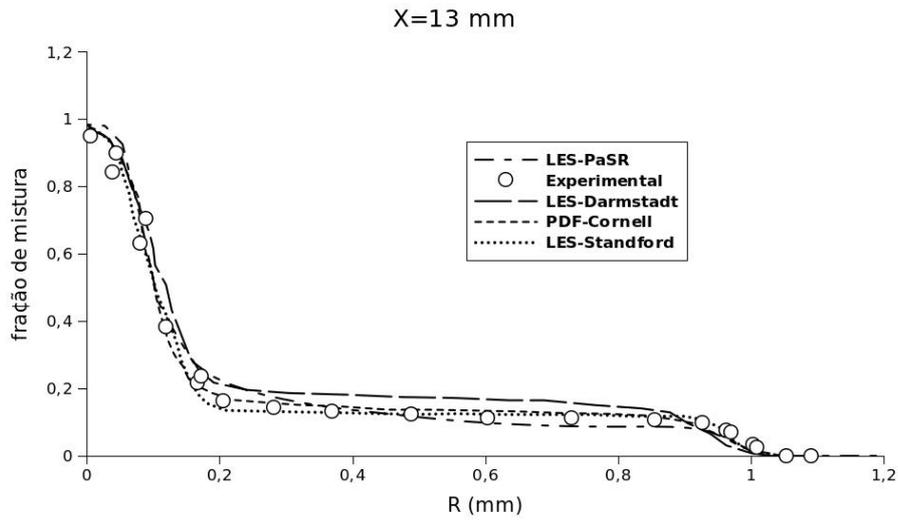


Figura 5.49 - Comparações de perfis de fração de mistura radial em a) $X = 13$ mm, b) $X = 30$ mm e c) $X = 45$ mm.

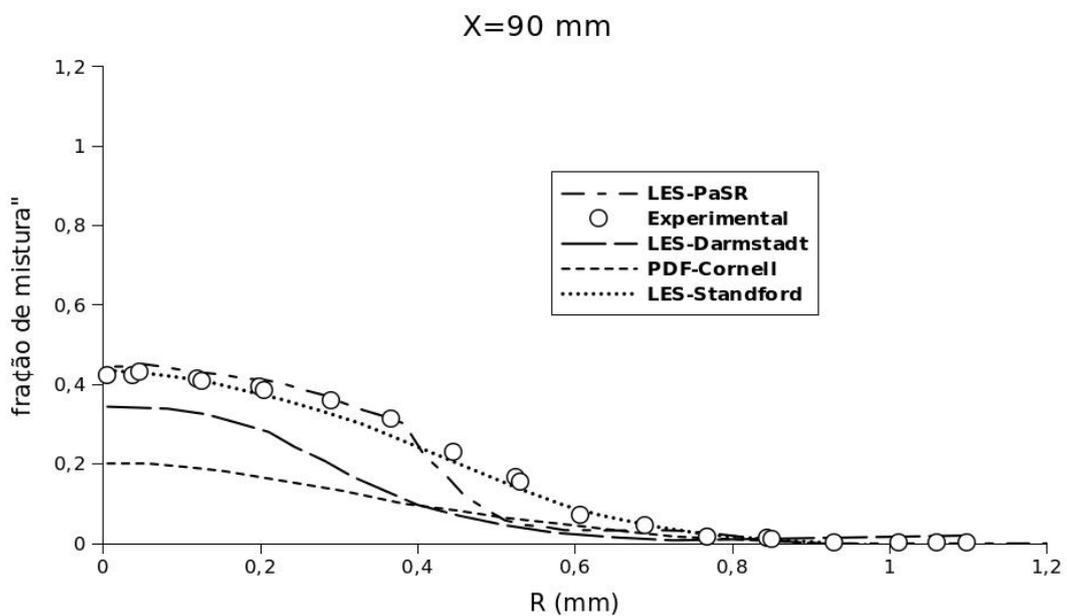
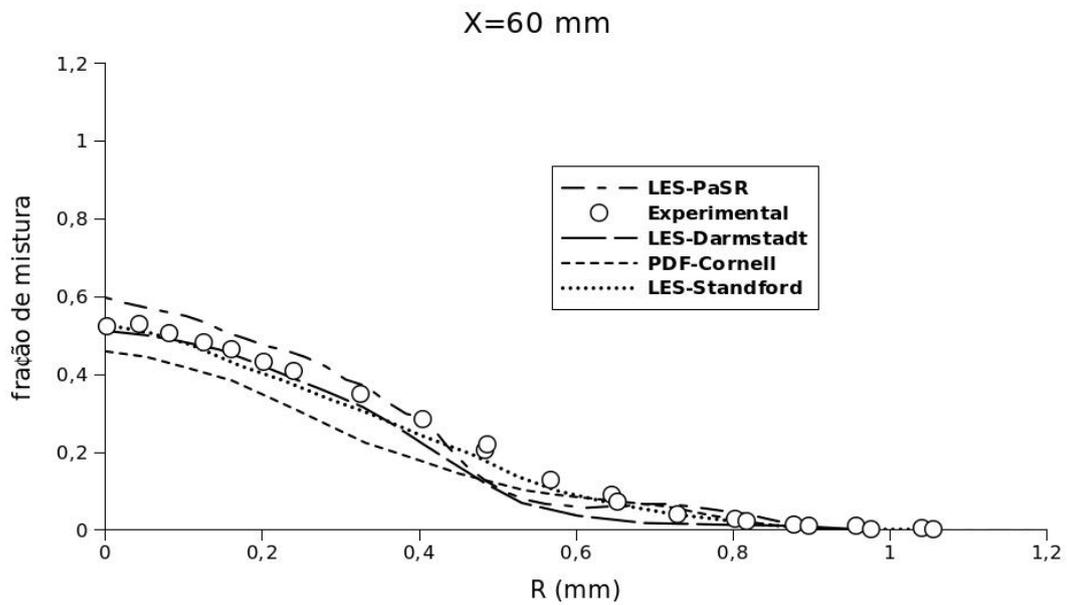


Figura 5.50 - Comparações de perfis de fração de mistura radial em d) $X = 65$ mm e d) $X = 90$ mm.(continuação).

5.2.4.4 Fração mássica de H_2O

Para a análise da fração mássica, deve-se levar em consideração a alternância dos vórtices, fenômeno que associado a interface entre escoamento turbulento e laminar e que é um ponto importante para muitos escoamentos de interesse prático, como o caso do experimento HM1. Devido à alternância, os resultados podem apresentar diferentes níveis de mistura, dependendo das condições iniciais adotadas (DINESH et al., 2010). Como se observa nos resultados para a vorticidade da Fig. 5.51, um jato turbulento exibe comportamento alternado na região próxima à borda externa do escoamento. O enfraquecimento dos vórtices, quando a camada de cisalhamento está parcialmente desenvolvida, é esperado, resultando em uma taxa mais lenta de arraste e de crescimento axial. Uma maior intermitência nos resultados para as frações mássicas ocorre com o aumento da distância ao bocal, e a razão para isso pode ser explicada pela diminuição da concentração média (LAWN, 2009).

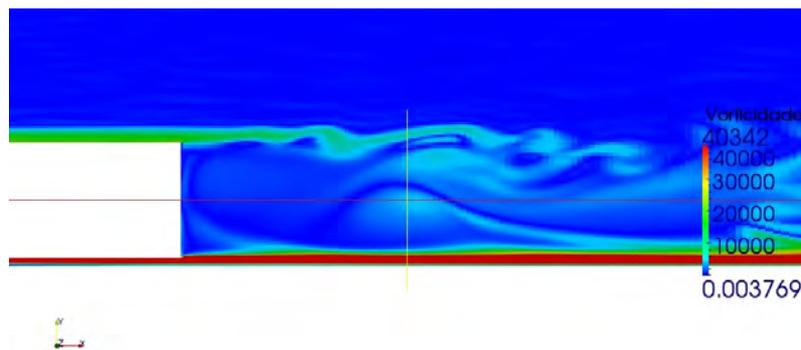


Figura 5.51 - Campo de vorticidade na saída do queimador.

Para o H_2O , os perfis radiais são tomados nas mesmas posições axiais mostradas para a temperatura. As figuras 5.53 e 5.54 mostram uma boa concordância com os resultados experimentais e com os outros resultados obtidos numericamente, pois todos eles conseguem capturar bem o comportamento deste escalar (NAVARRO-MARTINEZ; KRONENBURG, 2007). Porém, o presente caso apresentou sobrestimação em vários pontos das medições tomados experimentalmente. Isto se da por conta do mecanismo empregado para a simulação que, como se viu na seção 5.2.3, quando testado com o CANTERA, deu uma diferença significativa com relação ao resultado experimental. Uma outra razão é que a água é um escalar representativo e abundante na composição da chama, mas o modelo de turbulência de sub-malha não consegue

decompor a água completamente em outras espécies, como se pode ver na Fig.5.52. Outra tendência que pode ser apreciada é a subestimação na parte externa do jato seguindo a direção radial, especificamente na zona de garganta e na região onde se desenvolve o jato livre $X = 90$ mm. No entanto, modelos como o PaSR-RANS e o modelo de Cornell apresentam esta mesma tendência.

Para a comparação da fração mássica de água e das frações mássicas de CO_2 , CO , e OH se deve tomar as seguintes descrições: os valores experimentais são apresentados com círculos, os valores para o presente trabalho PaSR-SGE são mostrados com linhas traço-ponto, com linhas de traço longo são apresentados resultados do modelo PaSR-RANS (GSCHAIDER et al., 2010), com linhas de traço curto os valores da simulações de Cornell e os valores obtidos de Stanford são representados com pontos.

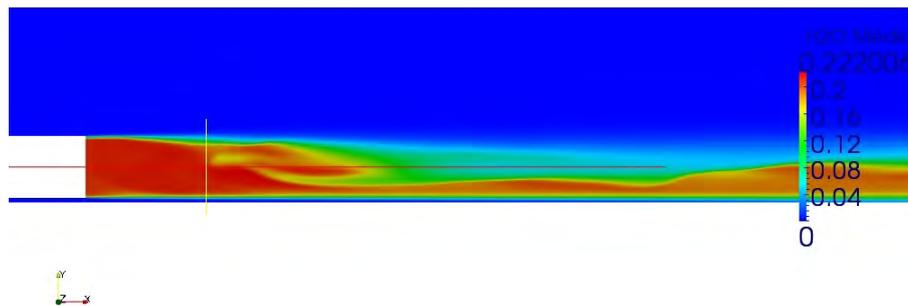


Figura 5.52 - Concentração de H₂O médio na chama do queimador.

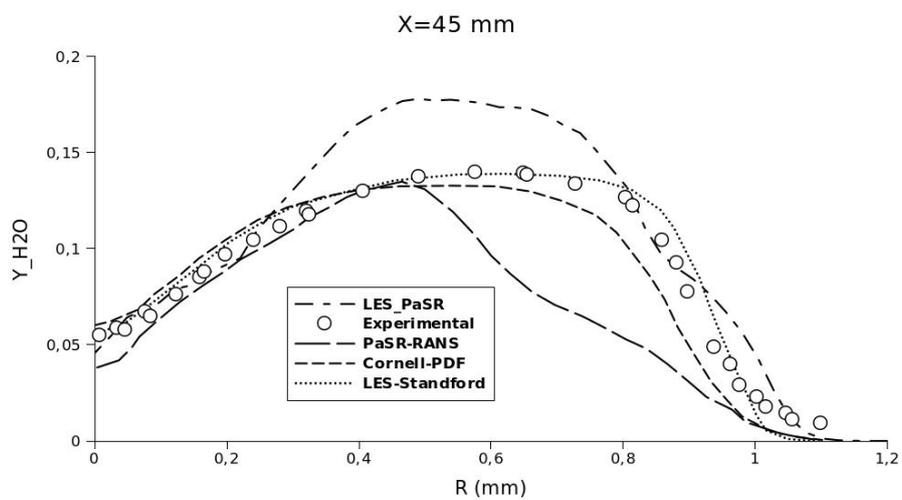
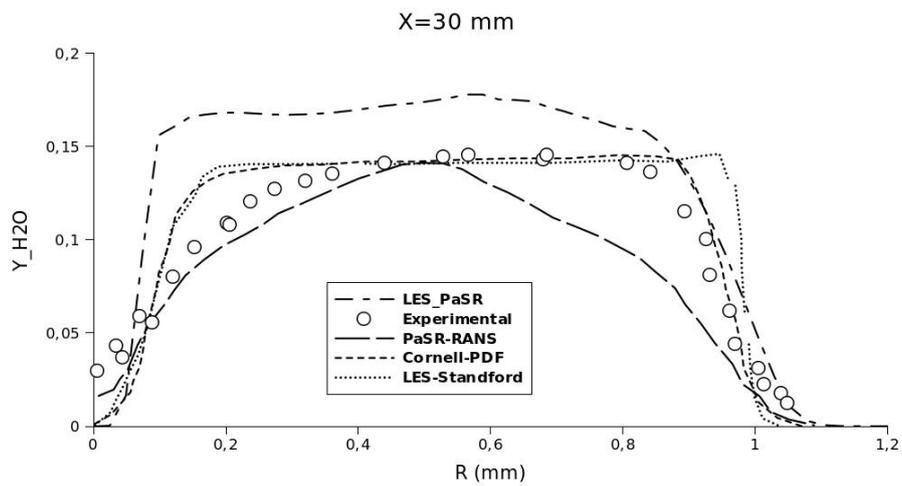
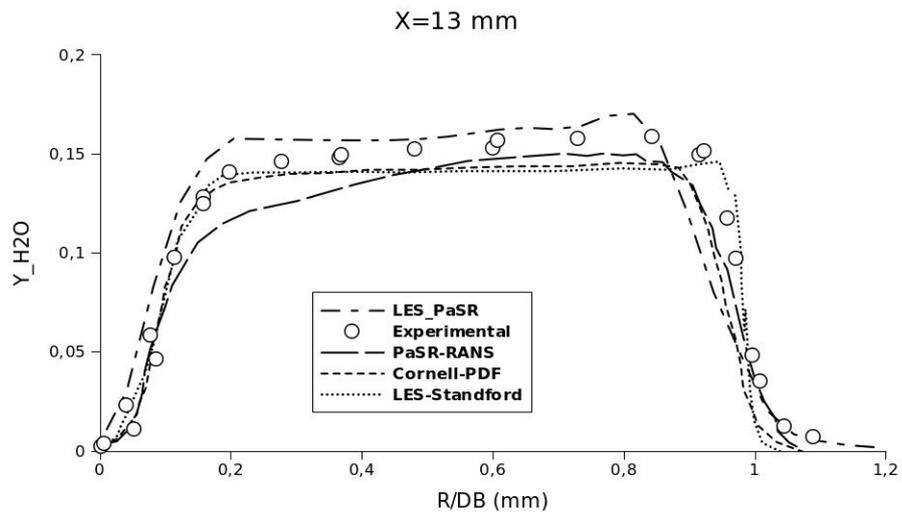


Figura 5.53 - Comparações de perfis de fração mássica de H_2O radial em a) $X = 13$ mm, b) $X = 30$ mm e c) $X = 45$ mm.

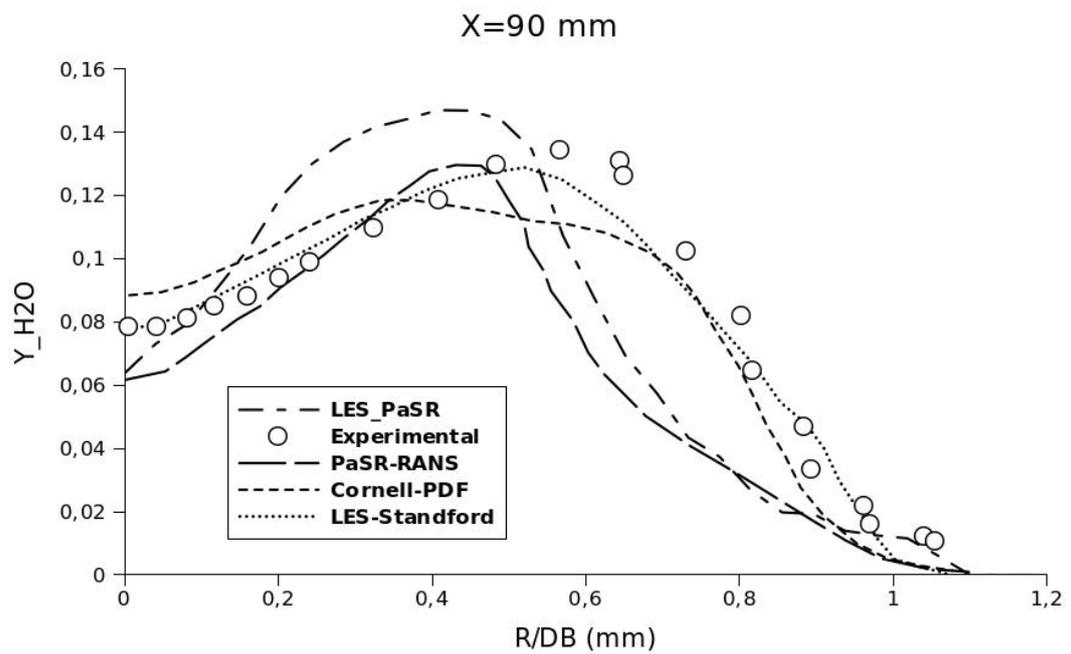
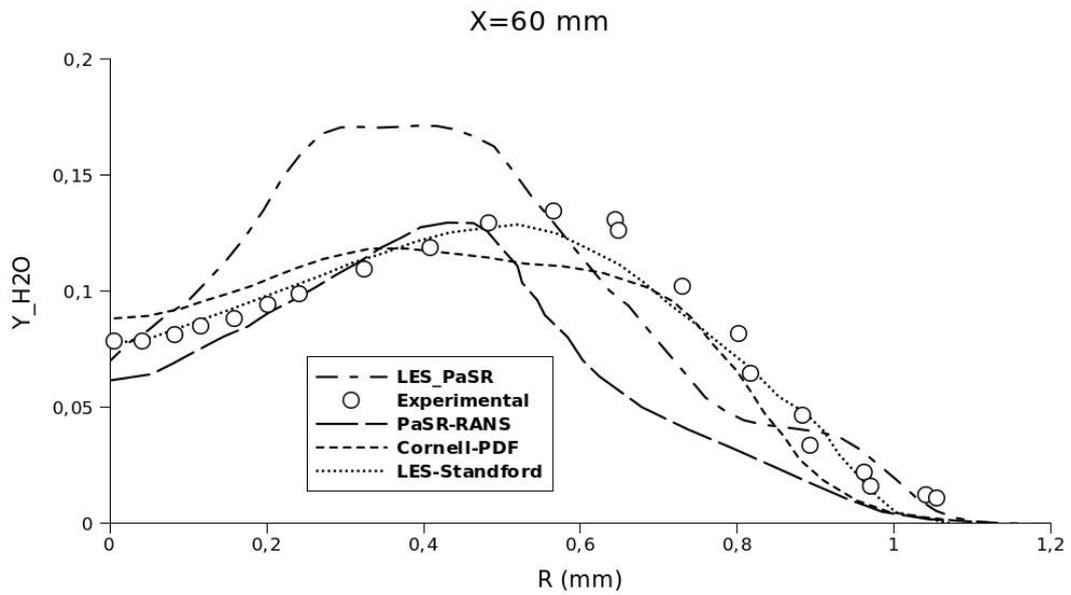


Figura 5.54 - Comparações de perfis de fração mássica de H_2O radial em d) $X = 65$ mm e e) $X = 90$ mm.(continuação).

5.2.4.5 Fração mássica de CO

Para o CO , obteve-se resultados com tendências similares aos encontrados para H_2O . O resultado simulado com PaSR-LES apresentam uma leve subestimação em $X = 13$ mm. Isto se explica pelo fato dos modelos de química rápida não representarem bem regiões onde a mistura não é bem determinada. O resultado simulado com PaSR-LES se aproxima da curva experimental na zona central de recirculação, no entanto, sobrestima na parte exterior da camada cisalhante. Em $X = 65$ mm, o perfil está muito próximo do perfil experimental, tendo melhor desempenho que os outros modelos SGE. Em todos os locais considerados, os erros nas previsões são muito pequenos, considerando as incertezas experimentais ou numéricas, elas podem chegar até 8% no CO (AZEVEDO, 2007). Em locais à jusante há uma ligeira sobrestimação da fração mássica de CO na linha central. A formação e destruição de CO são diretamente afetadas pela turbulência devido à sua escala de tempo químico relativamente longa. Como pode ser visto na Fig. 5.55 e 5.56, as frações mássicas de CO são apresentadas para diferentes locais a jusante. Os resultados são bons, no entanto a simulação subestima o valor perto da zona de injeção do combustível, melhorando à jusante, na parte externa da camada cisalhante. Valores para o CO perto do bocal são menos sensíveis à modelagem de dissipação escalar. Uma explicação do motivo pelo qual o CO passa de uma subestimação nos primeiros trechos da zona de recirculação para uma sobrestimação nas regiões de garganta e início do jato livre é dada pela pouca habilidade dos mecanismos cinéticos para transformar CO para CO_2 por oxidação. A captura deste processo ocorre, então, um pouco depois, resultando em níveis de predição do CO diferentes do experimental, levando então a uma amplificação dos níveis do escalar e, por conseguinte do comprimento da chama (NAVARRO-MARTINEZ; KRONENBURG, 2007).

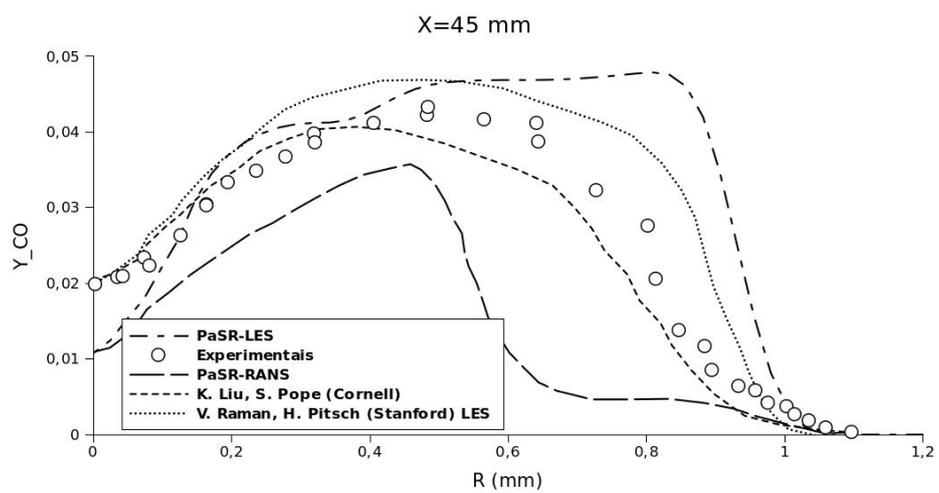
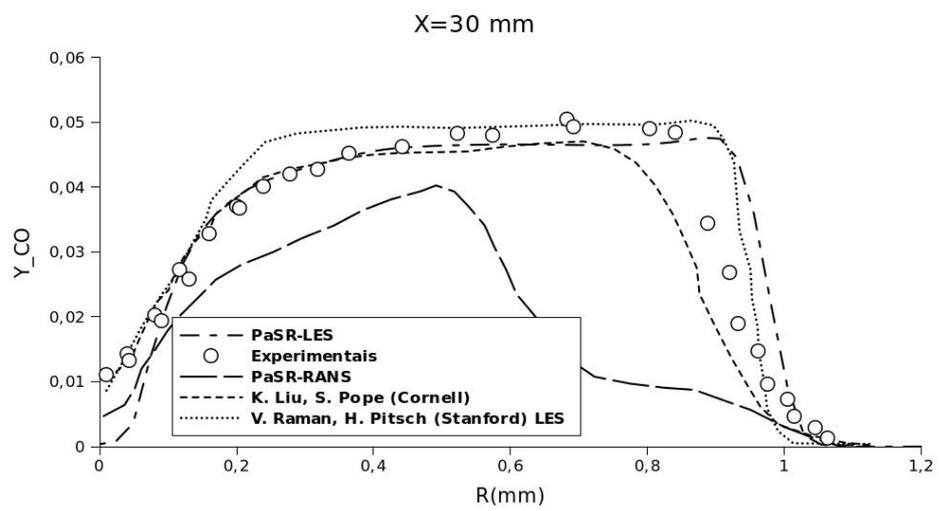
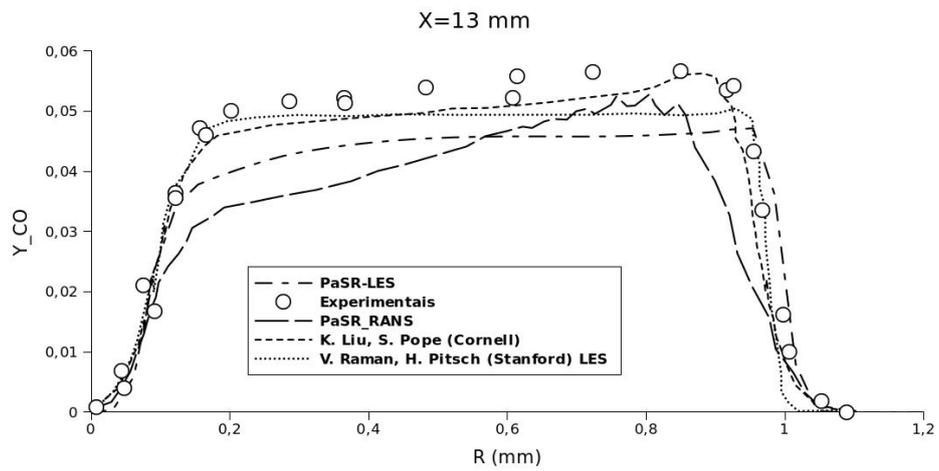
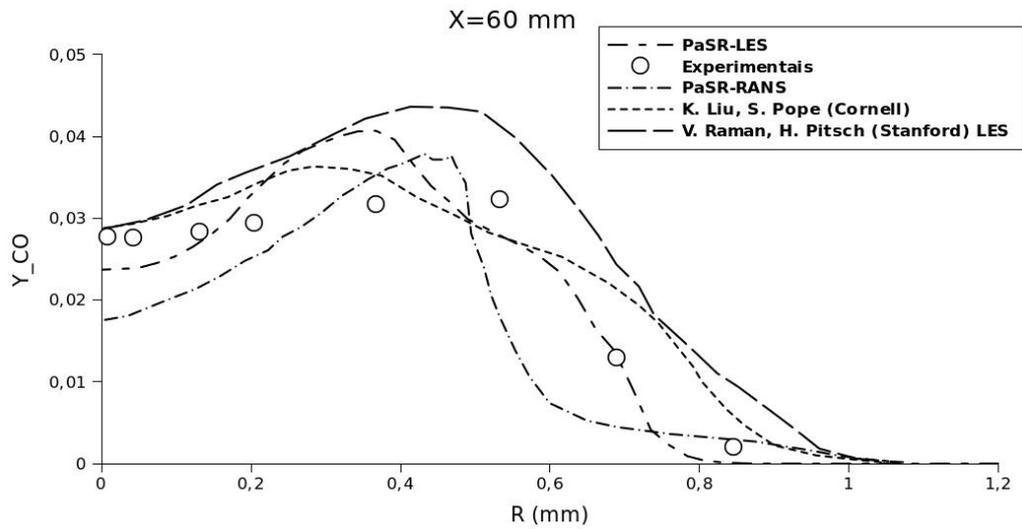
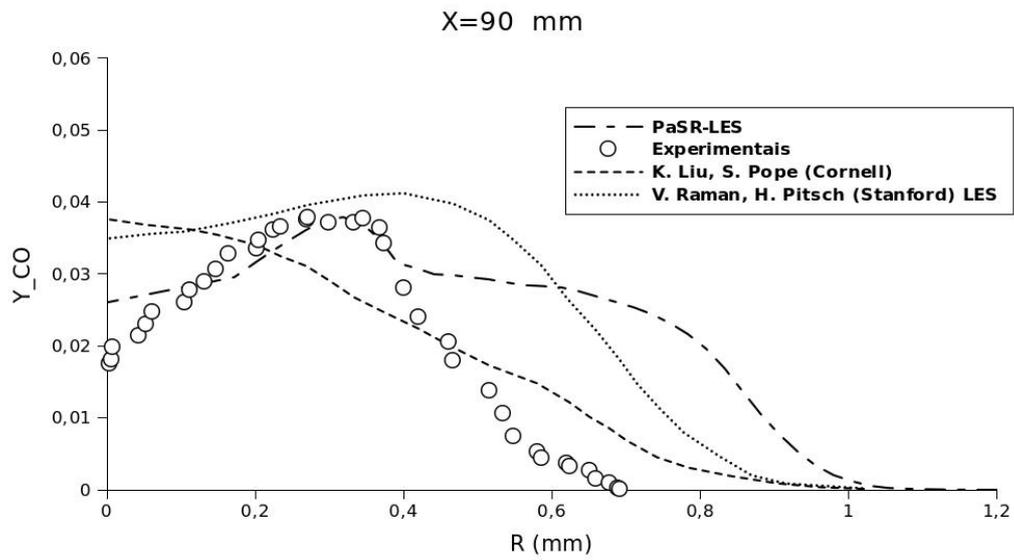


Figura 5.55 - Comparações de perfis de fração mássica de CO radial em a) $X = 13$ mm, b) $X = 30$ mm e c) $X = 45$ mm.



(d)



(e)

Figura 5.56 - Comparações de perfis de fração mássica de CO radial em d) $X = 65$ mm e d) $X = 90$ mm.(continuação).

5.2.4.6 Fração mássica de CO_2

Perfis radiais de CO_2 são bem previstos por quase todos os modelos, apesar de que uma ligeira sobre predição pode ser observada em modelos tipo PDF, em locais próximas ao jato. No presente trabalho, como demonstrado na seção 5.2.3, a cinética do mecanismo empregado subestima o CO_2 e isto é refletido nos resultados numéricos, como pode ser apreciado na Fig. 5.57 e Fig. 5.58. A fração mássica de CO_2 agindo como uma variável de progresso, concorda bem com os experimentos para a maioria das regiões da chama. Na camada de cisalhamento interna entre o jato e a zona de recirculação, a concentração de CO_2 é superestimada. Nas posições mais altas, começando a partir de $X = 90$ mm (Fig. 5.58(e)), a chama é demasiada estreita, tendo então muita concentração de CO_2 perto do eixo. Mas em geral, os perfis de CO_2 mostram boa concordância para todas as posições axiais consideradas. Observa-se que os perfis seguem as previsões de temperatura até $X = 90$ mm. Nas outras posições a jusante, curiosamente, as tendências são revertidas perto da linha central. Qualquer subestimação da temperatura leva a uma superestimação nos perfis de CO_2 . Isto indica que uma possível mudança no mecanismo da reação controla a produção de CO_2 .

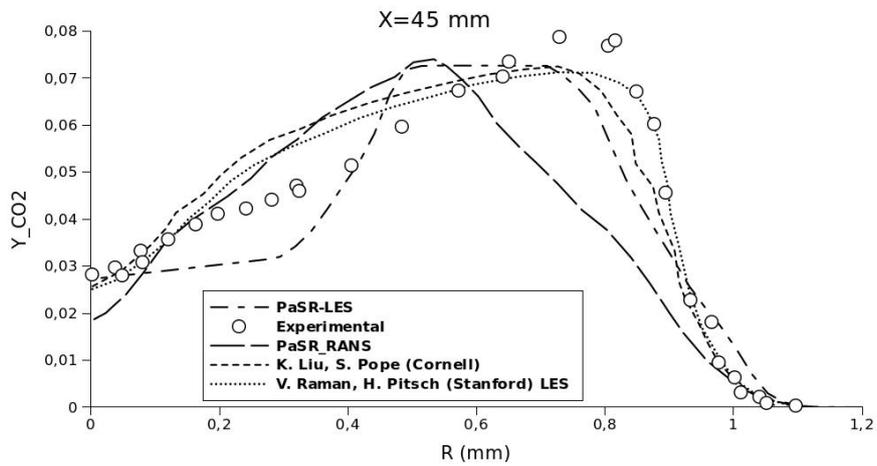
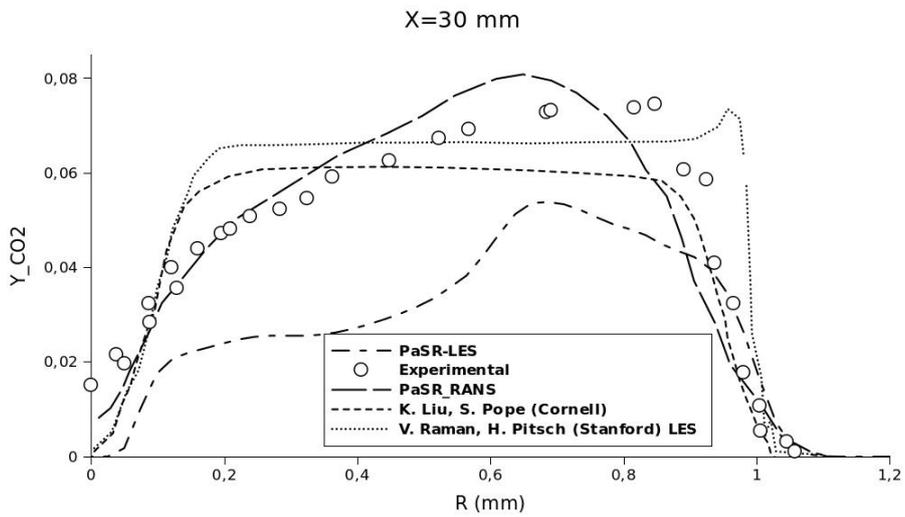
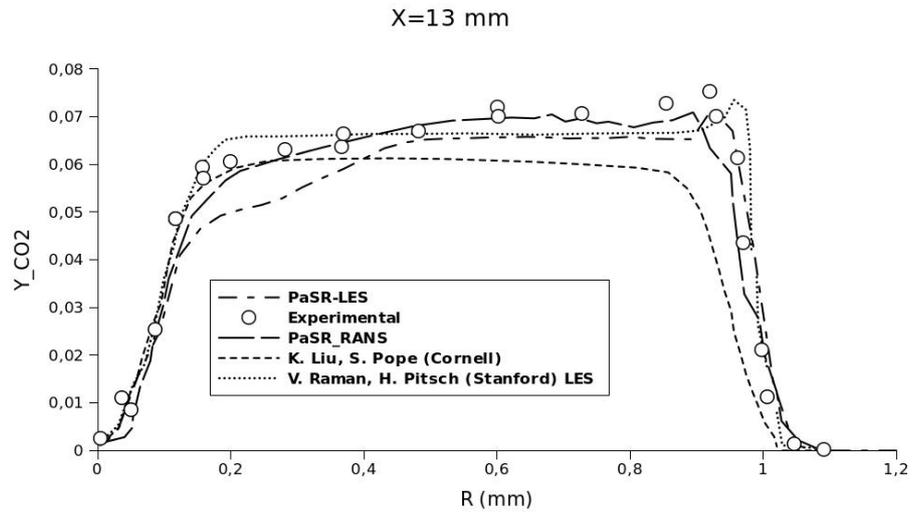


Figura 5.57 - Comparações de perfis de fração mássica de CO_2 radial em a) $X = 13$ mm, b) $X = 30$ mm e c) $X = 45$ mm.

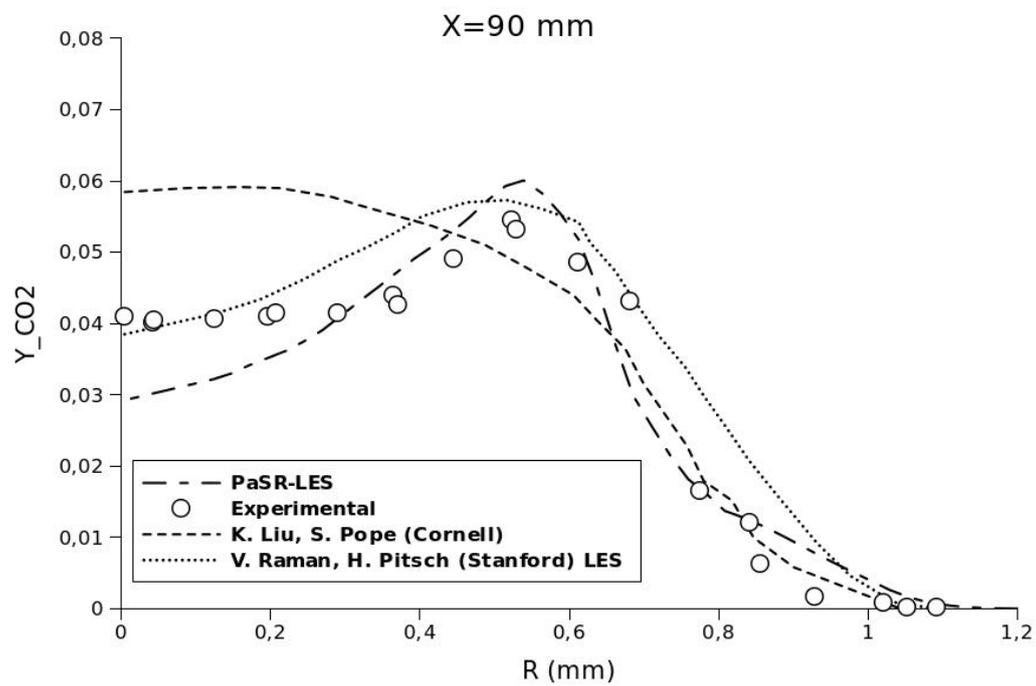
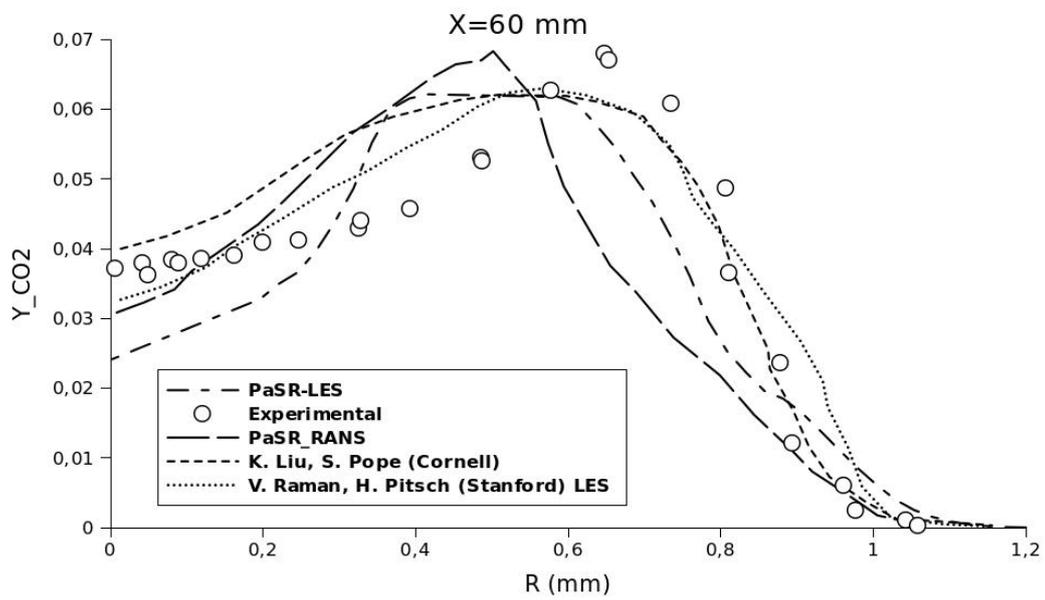


Figura 5.58 - Comparações de perfis de fração mássica de CO_2 radial em d) $X = 65$ mm e d) $X = 90$ mm.(continuação).

5.2.4.7 Fração mássica de OH

O perfil de OH para a simulação numérica é muito mais difícil de coincidir nas comparações com os resultados experimentais. Todas as simulações da maioria dos modelos têm erros, mas, como mostrado nas Figs. 5.59 e 5.60, o modelo de simulação PaSR-RANS é o que tem o maior desvio e menor aproximação com os resultados experimentais. O modelo PaRS-SGE sobrestima OH no ponto $X = 13$ mm (Fig. 5.59 (a)), mas tem bom desempenho e características consistentes com o experimental e também são comparáveis em qualidade com os resultados de simulações SGE em TNF7. Raman e Pitsch (RAMAN; PITSCH, 2005) atribuem esta sobrestimação a pequenos erros na variação da fração de mistura e Navarro e Kronenburg (NAVARRO-MARTINEZ; KRONENBURG, 2007) mostraram que os valores de dissipação, que estão perto do estequiométrico, são muito pequenos na zona de recirculação e pequenos erros no modelo de dissipação podem, portanto, influenciar diretamente as previsões de OH. Temperatura e espécies resultantes são geralmente bem previstos pelos modelos, com exceção da posição $X/D_B = 0,26$, onde os dados médios experimentais de OH e H_2O ficam abaixo dos simulados. Isso se dá por duas razões: no experimento consideram-se medidas das grandes escalas completamente queimadas e ocorre mistura entre produtos da zona de recirculação quentes e oxidante frio (NAVARRO-MARTINEZ; KRONENBURG, 2007).

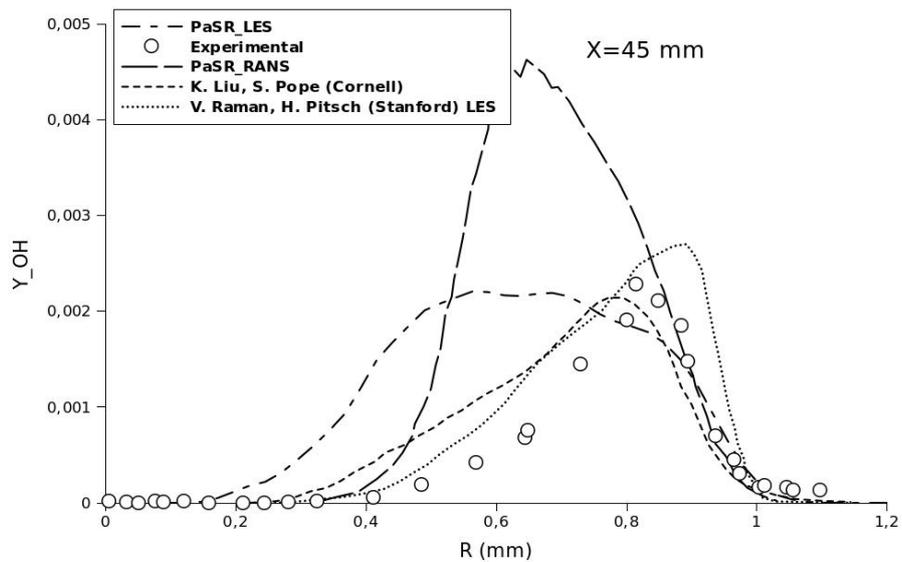
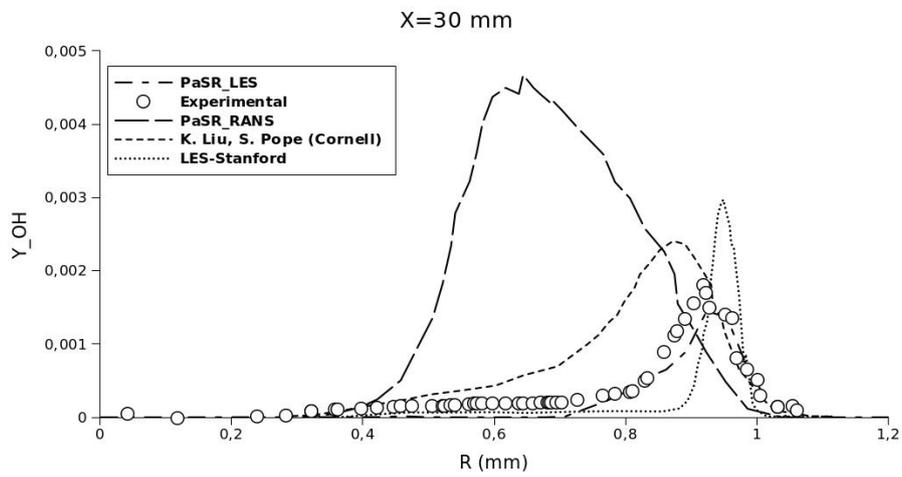
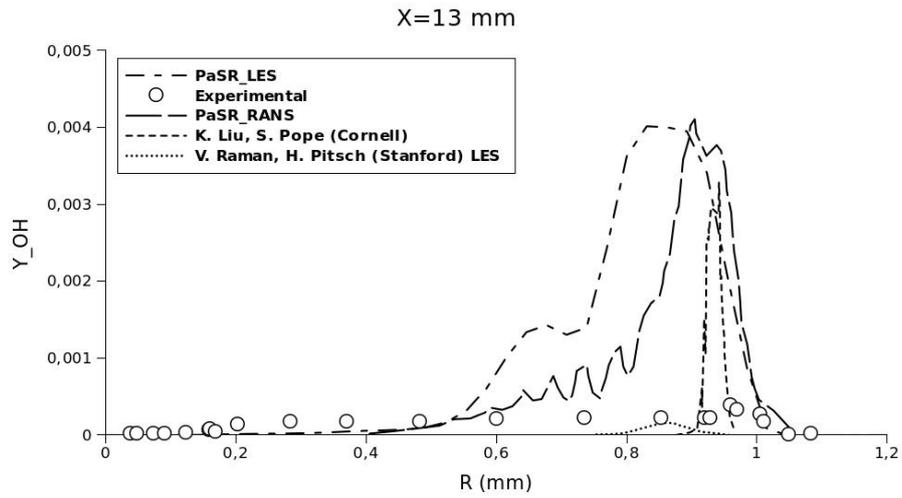


Figura 5.59 - Comparações de perfis de fração mássica de OH radial em a) $X = 13$ mm, b) $X = 30$ mm e c) $X = 45$ mm.

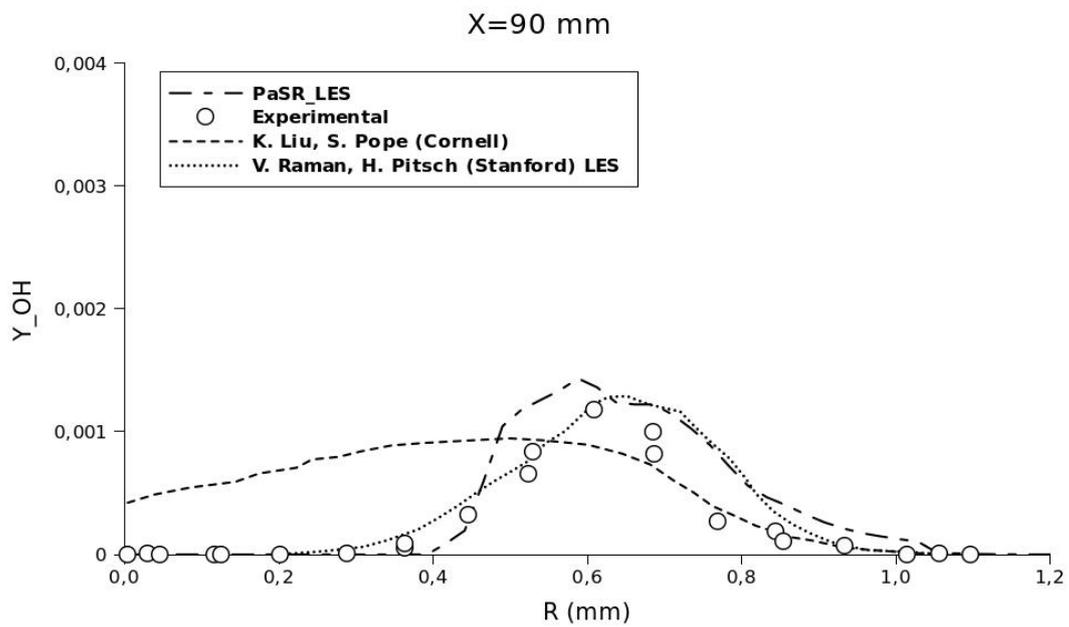
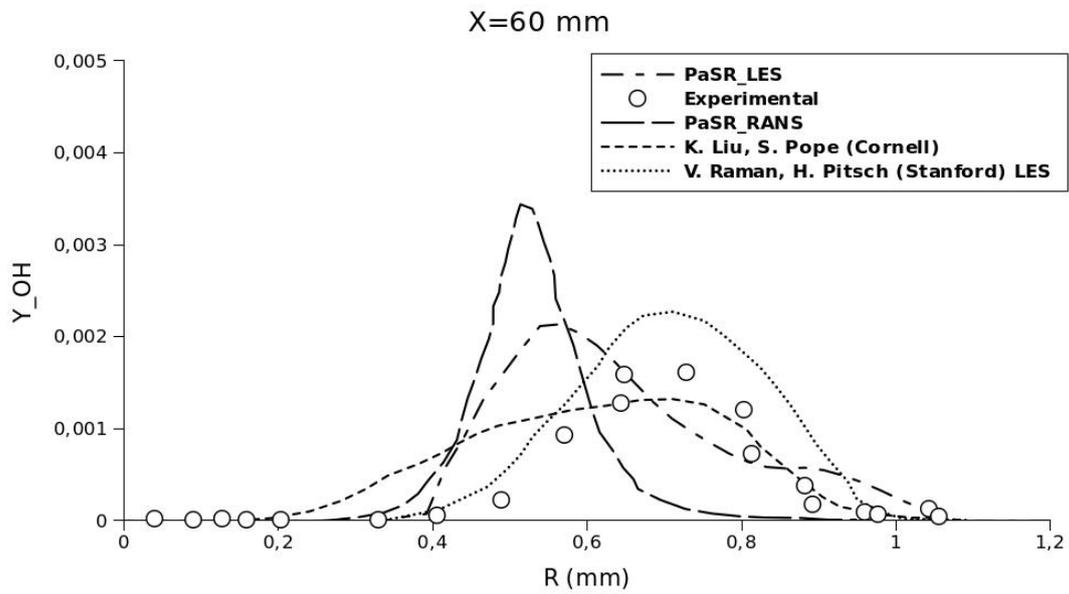


Figura 5.60 - Comparações de perfis de fração mássica de OH radial em d) $X = 65$ mm e d) $X = 90$ mm.(continuação).

6 CONCLUSÕES E TRABALHOS FUTUROS

Neste trabalho foi analisado um modelo numérico modificado, que simula chamas de difusão turbulentas com química detalhada. Foi utilizada uma modelagem de turbulência baseada em simulação de grandes escalas. O experimento do queimador da Universidade de Sidney denominado SANDIA foi reproduzido numericamente, utilizando-se o modelo desenvolvido.

O modelo de turbulência SGE implementado no código OpenFoam foi inicialmente validado, simulando-se o experimento de Sanquer (1998) para uma chama de pré-mistura num canal com bloqueio. Os resultados numéricos mostram que o modelo de turbulência é capaz de reproduzir os dados experimentais, tanto para escoamento inerte como para escoamento reativo.

Os resultados da análise espectral mostraram um decaimento de $-5/3$, correspondente à faixa inercial da cascata de energia turbulenta e um pico de energia correspondente à emissão de vórtices. Esses picos correspondem aproximadamente aos valores observados experimentalmente. Os valores obtidos para a zona de recirculação estão dentro daqueles esperados e o número de Strouhal está muito perto do valor experimental. Esses valores também estão próximos dos resultados obtidos com o modelo RANS, usado para comparação.

Os resultados para o campo de velocidades são bastante similares aos resultados experimentais, tanto nas simulações inertes quanto reativas. A componente longitudinal da velocidade apresentou melhores resultados do que a componente de velocidade na direção transversal. Na componente longitudinal, a variável de avanço se encontra próxima dos valores experimentais e, nas regiões em que se tem discrepância, esses valores caem nos limites de erro do experimento. Entre os modelos de turbulência usados, o de Smagorinsky foi o que deu resultados mas próximos do experimental.

Validado o modelo de turbulência, foram feitas simulações de chamas turbulentas de difusão, utilizando-se o código modificado reactingFoam, que na sua versão original utiliza um modelo de turbulência do tipo RANS. O modelo denominado reator parcialmente misturado (PaSR), apresentou bons resultados quando comparado com resultados experimentais do queimador SANDIA. As variáveis comparadas foram as velocidades longitudinal e normal, a temperatura e as frações em massa de CH₄, CO, CO₂, OH e H₂O.

Na comparação da velocidade, a simulação mostrou uma concordância com os re-

sultados experimentais. No entanto, a componente radial não apresentou resultados muito próximos do experimental na zona de garganta do jato. Este resultado é atribuído ao fato de, nesta zona, a turbulência ser mais intensa. Os resultados da temperatura mostram sobrestimação em várias zonas do jato, principalmente na zona do início e após o final da zona de recirculação, isto pode ser devido ao fato do modelo desprezar os termos radiativos.

A análise da concentração de H₂O apresenta uma sobrestimação em todas as seções do jato. Isto é reflexo do mecanismo usado na simulação, visto que a água é um escalar representativo e de grande concentração e pelo fato da parte turbulenta do modelo não conseguir decompor completamente a água em outras espécies.

O CO₂ também aparece subestimando com relação aos resultados experimentais, mas alcança os valores experimentais na zona média da recirculação. Isso indica que o modelo de turbulência funciona melhor com espécies de porte menor. Um mecanismo mais completo melhoraria também a simulação, pois com o mecanismo POA o CO₂ mostrou uma deficiência na simulação com o código CANTERA. No entanto, deve-se levar em conta o custo computacional para se utilizar um mecanismo mais completo.

A simulação de CO mostrou melhor concordância com os valores experimentais, sendo os resultados melhores do que aqueles obtidos com o modelo PaSR-RANS e o modelo SGE de Stanford, em quase todas as seções de medição. Para o escalar OH a diferença em relação aos resultados experimentais é significativa. Isso também é observado com resultados da maioria dos outros modelos. Pode-se observar que o comportamento do modelo é melhor sucedido com relação ao modelo PaSR-RANS e mantém a tendência do modelo de Stanford que sobrestima o valor em todas as regiões de medição do jato. O escalar hidroxilo, por ser bem menor, resulta também ser o mais difícil de capturar pelo modelo de sub-malha.

Da simulação para chama de difusão, pode-se concluir que o modelo é capaz de descrever a física da chama razoavelmente bem. Considerando a complexidade do escoamento, a simulação resolve quantitativamente muitos dos perfis experimentais. A natureza tridimensional do jato deve ser levada em conta para o refinamento adequado da malha, principalmente na direção azimutal.

Como recomendação para trabalhos futuros, sugere-se implementar o termo de radiação no modelo PaSR. Como se pode comprovar dos resultados da temperatura, existe uma sobre estimação da temperatura da ordem de 100 K, que pode ser resul-

tado da não inclusão da radiação.

Para melhorar os resultados obtidos para o CO e H_2O , seria interessante trabalhar com um mecanismo de cinética-química mais completo; isto garantiria uma melhor estimativa do passo químico no modelo.

Por limitações de tempo, não se fez rodadas com os outros modelos de turbulência e outros modelos numéricos na simulação para chamas não pré-misturadas. Seria interessante ver o desempenho dos modelos de uma equação, dinâmico de uma equação para esquemas de discretização temporal de segunda ordem e espacial de segunda ordem ou maior.

Como se viu nos resultados para a pressão para chamas de pré-mistura, o modelo de turbulência SGE, junto com modelo de combustão, proporcionam as ferramentas necessárias para explorar o campo de flutuação da pressão. Estas flutuações de pressão estão associadas ao problema de instabilidade de chama. Este fenômeno é produzido pela interação entre o campo de vorticidade e o campo acústico. Ele pode provocar, muitas vezes, a perda de sistemas propulsores. Uma última proposta para trabalhos futuros seria utilizar o modelo desenvolvido neste trabalho para se estudar instabilidade de chamas.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- ABE, K.; KONDOH, T.; NAGANO, Y. Predicting fluid flow and heat transfer in separating and reattaching flows. flow field calculations. **International Journal of Heat Mass Transfer**, v. 37, p. 139–151, 1994. 7
- AKULA, R. A.; SADIKI, A.; JANICKA, J. Large eddy simulation of bluff-body stabilized flame by using flame surface density approach. In: EUROPEAN CONFERENCE ON COMPUTATIONAL FLUID DYNAMICS, 2006. **Proceedings...** [S.l.]: ECCOMAS CFD, 2006. 11, 13
- ANDERSON JR., J. D. **Computational Fluid Dynamics, the basic with applications**. US: McGraw-Hill, 1995. 94
- ANDREINI, A. **Sviluppo di Modelli Numerici per L'Analisi Della Combustione Turbolenta Premiscelata Nelle Turbine a Gas**. Ph.D. Thesis — Università degli Studi di Firenze, Dipartimento di Energetica, Firenze, 2004. 132
- ANGELBERGER, C.; VEYNANTE, D.; EGOLFOPOULOS, F. Les of chemical and acoustic forcing of a premixed dump combustor. **Flow Turbulence and Combustion**, v. 65, p. 205–222, 2000. 9
- AZEVEDO, P. M. D. **Estudo da formação e destruição de óxidos de azoto em chamas de hidrogénio e/ou hidrocarbonetos com ou sem presença de compostos azotados**. 296 p. Ph.D. thesis — Universidade do Porto, Porto, 2007. 133, 135, 136, 158, 190
- BAI, X.; FUCHS, L. Modeling of turbulent reactive flows past a bluff body: Assessment of accuracy and efficiency. **Computers and Fluids**, v. 23, n. 3, p. 507–521, 1994. 11
- BARDINA, J.; FERZIGER, J. H.; REYNOLDS, W. C. Technical report no. tf-19. **Boundary-Layer Meteorology**, 1983. 101
- BARLOW, R. S.; FIECHTNER, G. J.; CARTER, C. D.; CHEN, J. Y. Experiments on the scalar structure of turbulent $\text{CO}_2/\text{H}_2/\text{N}_2$ jet flames. **Combust. and Flame**, v. 120, n. 4, p. 549–569, 2000. 25
- BAUM, M.; POINSOT, T. J.; HAWORTH, D. C.; DARABIHA, N. Direct numerical simulation of $\text{H}_2/\text{O}_2/\text{N}_2$ flames with complex chemistry in two-dimensional turbulent flows. **Journal of Fluid Mechanics**, v. 281, p. 1–32, 1994. 108

BILGER, R. W. The structure of turbulent non premixed flames. in twenty-second symposium (inter- national) on combustion. **The Combustion Institute**, 1988. 38, 39

BOERSMA, B. J.; LELE, S. K. Large eddy simulation of compressible turbulent jets. **Center for Turbulence Research**, p. 365–377, 1999. 7

BOGER, M.; VEYNANTE, D. Advances in turbulence viii. p. 449–451, 2000. 10

BOGER, M.; VEYNANTE, D.; BOUGHANERN, H.; TROUVÉ, A. Direct numerical simulation nalysis of flame surface density concept for large eddy simulation of turbulent premixed combustion. in twenty-seventh symposium (international) on combustion. **The combustion Institute**, p. 917–925, 1988. 10

BORGHI, R. Turbulent combustion modelling. **Prog. Energy Combust. Sci.**, v. 14, p. 245–292, 1988. 38

_____. On the structure and morphology of turbulent premixed flames. **Rec. Adv. Aerosp. Sci.**, p. 117–138, 1998b. 33, 34

BORGHI, R.; DESTRIAU, M. Combustion and flames, chemical and physical principles. **Editions TECH-NIP**, 1998. ix, 11, 33, 34, 37

BRAY, K. C. **Turbulent flows with premixed reactants in turbulent reacting flows**. New York: Springer Verlag, 1980. 33, 34

BRAY, K. N. C.; LIBBY, P. A.; WILLIAMS, F. A. **Turbulent Flows with Premixed Reactants, in Turbulent Reacting Flows**. New York: Springer Verlag, 1980. 32

BRAY, K. N. C.; PETERS, N. **Laminar flamelets in turbulent flames. Turbulent Reacting Flows**. London: Academic Press, 1994. 38

BURKE, S.; SCHUMMAN, T. Diffusion flames. **Industr. Eng. Chem.**, v. 20, p. 998–1004, 1928. 3, 26

BUTLER, T. D.; O'ROURKE, P. J. A numerical method for two-dimensional unsteady reacting flow. in sixteen symposium (international) on combustion. **The Combustion Institute**, p. 1–263, 1977. 10

CALHOON, W. H.; MENON, S.; GOLDIN, G. Comparison of reduced and full chemical mechanisms for nonpremixed turbulent h₂-air jet flames. **Combustion Science and Technology**, v. 104, p. 115–141, 1995. 9

CANDEL, S. Combustion instabilities coupled by pressure waves and their active control. 24th symp.(international on combustion). **The Combustion Institute**, p. 1277–1296, 1992. 107

CANDEL, S. M.; POINSOT, T. J. Flame stretch and the balance equation for the flame area. **Combust. Sci. Technol.**, v. 70, p. 1–15, 1990. 10

CANT, R.; POPE, S.; BRAY, K. N. C. Modelling of flamelet surface-to-volume ratio in turbulent premixed combustion. In: **Twenty-third Symposium (International) on Combustion**. Pittsburgh: The combustion Institute, 1990. p. 809–815. 10

CANT, R. S.; BRAY, K. N. C. Strained laminar flamelet calculations of premixed turbulent combustion in a closed vessel. In: **Symposium (International) on Combustion**. [S.l.: s.n.], 1989. v. 22, p. 791–799. 32

CHAKRAVARTHY, V.; MENON, S. Subgrid modeling of premixed flames in the flamelet regime. **Flow, Turbulence and Combustion**, v. 65, p. 133–161, 2000. 9

CHAUDHURI, S.; KOSTKA, S.; TUTTLE, S. G.; RENFRO, M. W.; CETEGEN, B. M. Blow off mechanism of two dimensional bluff-body stabilized turbulent premixed flames in a prototypical combustor. **Combustion and Flame**, v. 158, p. 1358–1371, 2011. 12

CHENG, R. K. Conditional sampling of turbulence intensities and reynolds stress in premixed turbulent flames. **Combustion Science and Technology**, v. 41, p. 109–142, 1984. 11

CHENG, R. K.; SHEPHERD, I. G. The influence of burner geometry on premixed turbulent flame propagation. **Combustion and Flame**, v. 85, p. 7–26, 1991. 11

CHENG, R. K.; SHEPHERD, I. G.; GOKALP, I. A comparison of the velocity and scalar spectra in premixed flames. **Combustion and Flame**, v. 78, p. 205–221, 1989. 11

CHENG, W. L.; LIEN, F. S.; LESCHZINER, M. A. Low-reynolds-number eddy-viscosity modelling based on non-linear stress-strain/vorticity relations. **Engineering turbulence modelling and experiments**, v. 3, p. 91–100, 1996. 7

CHIEN, K. Y. Predictions of channel and boundary-layer flows with a low reynolds number turbulence model. **AIAA Journal**, v. 20, n. 1, p. 33–38, 1982. 7

COOK, A. W.; RILEY, J. J. Subgrid scale modeling for turbulent reacting flows. **Combustion and Flame**, v. 112, p. 593–606, 1992. 14

_____. A subgrid model for equilibrium chemistry in turbulent flows. **Phys. Fluids A**, v. 6, n. 8, p. 2868–2870, 1994. 14

_____. Direct numerical simulation of a turbulent reactive plume on a parallel computer. **J. Comp. Physics**, v. 129, n. 2, p. 263–283, 1996. 38

CUENOT, B.; EGOLFOPOULOS, F. N.; POINSOT, T. J. An unsteady laminar flamelet model for non-premixed combustion. **Combust. Theory Modelling**, v. 4, n. 1, p. 77, 2000. 39

CUENOT, B.; POINSOT, J. T. Effects of curvature and unsteadiness in diffusion flames, implications for turbulent diffusion combustion. In: **Twenty-Fifth Symposium (International) on Combustion**. [S.l.]: The combustion Institute, 1994. 38, 40

CUENOT, B.; POINSOT, T. J. Asymptotic and numerical study of diffusion flames with variable lewis number and finite rate chemistry. **Combustion and Flame**, v. 104, n. 1, p. 111–137, 1996. 26, 27, 28

DAMKÖHLER, G. Der einfluß der turbulenz auf flammengeschwindigkeit in gasgemischen. **Z. Elektrochem**, v. 46, p. 601–652, 1947. English translation NASA Technical Memorandum 1112. 32

DAVIS, S. R. **C++**. [S.l.]: Wiley Publishing, Inc., 2005. 75

DAVISON, L. **Turbulence modeling**. Chalmers, 2006. Technical Report MTF270. 8

DEADORFF, J. W. Trans. **ASME, J. Fluids Eng.**, v. 156, p. 55, 1973. 101

DIMARE, F.; JONES, W.; MENZIES, K. Large eddy simulation of a model gas turbine combustor. **Combustion and Flame**, v. 137, p. 278–294, 2004. 9

DINESH, K. K.; SAVILL, A. M.; JENKINS, K. W.; KIRKPATRICK, M. P. Les of intermittency in a turbulent round jet with different inlet conditions. **Computers & Fluids**, v. 39, p. 1685–1695, 2010. 154

DOORMAL, J. P. V.; RAITHBY, G. D. Enhancements of the simple method for predicting incompressible fluid flows. **Numerical Heat Transfer**, v. 7, p. 147–163, 1983. 91

DOURADO, W. M. **Desenvolvimento de um método Numérico em malhas Não-estruturadas Híbridas para Escoamentos Turbulentos em Baixo Número de Mach**. Tese (Doutorado em Engenharia Aeronáutica) — Instituto Tecnológico de Aeronáutica (ITA), São José dos Campos, 2003. 11, 18, 106, 112

EGGENSPIELER, G.; MENON, S. Combustion and emission modeling near lean blow-out in a gas turbine engine. **Progress in Computational Fluid Dynamics**, v. 5, p. 281–297, 2005. 9

ERIKSSON, P. The zimont tfc model applied to premixed bluff-body stabilized combustion using four different rans turbulence models. In: **Proceedings of ASME GT2007**. Montreal: ASME Turbo Expo 2007, 2007. v. 2. ASME Turbo Expo 2007. 11

ERLEBACHER, G.; HUSSAINI, M. Y.; SPEZIALE, C. G.; ZANG, T. A. Toward the large eddy simulation of compressible turbulent flows. **Journal of Fluid Mechanics**, v. 238, p. 155–185, 1992. 47, 62

FERZIGER, J. H.; PERIC, M. **Computational Methods for Fluid Dynamics**. New York: Berlin Heidelberg, 2002. 3rd. 7, 8, 78

FLETCHER, C. A. **Computational Techniques for Fluid Dynamics**. Berlin: Computational Physics, 1991. I and II, 2nd ed. 78

FRENDI, A.; SKARATH, G.; TOSH, A. Prediction of noise radiated by flow over a smooth square cylinder. In: **10th AIAA/CEAS Aeroacoustics Conference**. Manchester, UK: AIAA, 2004. ASME Turbo Expo 2007. 11

FRISCH, U. **Turbulence: the legacy of Kolmogorov**, A. N. New York: Cambridge University Press, 1996. 296 p. 2

FUREBY, C.; GOSMAN, A. D.; TABOR, G.; WELLER, H.; SANDHAM, N.; WOLFSHTEIN, M. Large eddy simulation of turbulent channel flows. **Physics Fluids A**, v. 3, p. 28, 1997c. 82

FUREBY, C.; LOFSTROM, C. Large eddy simulations of bluff-body stabilized flames. In: **Twenty-Fifth Symposium (International) on Combustion**. [S.l.]: The combustion Institute, 1994. p. 1257–1264. 128

FUREBY, C.; MOLLER, S. I. Large eddy simulations of chemically reactive flows applied to bluff body stabilized flames. **AIAA Journal**, v. 33, n. 12, p. 2339–2347, 1995. 65, 128

FUREBY, C.; TABOR, G.; WELLER, H. Differential subgrid stress models in large eddy simulations. **PHYSICS AND FLUIDS**, v. 9, p. 3578–3580, 1997. 8, 100, 101

FUREBY, C.; TABOR, G.; WELLER, H. G.; GOSMAN, A. D. A comparative study of subgrid scale models in homogeneous isotropic turbulence. **PHYSICS AND FLUIDS**, v. 9, n. 5, p. 1416–1429, 1997b. 102

GAO, F.; O'BRIEN, E. A large-eddy simulation scheme for turbulent reacting flows. **Proceedings of turbulent shear flows 11**, v. 3, p. 1282–1284, 1993. 14

GE, H.-w.; ZHU, M.; CHEN, Y.; GUTHEIL, E. Hybrid unsteady rans and pdf method for turbulent non-reactive and reactive flows. **Flow Turbulence Combustion**, v. 78, p. 91–109, 2007. 13

GERMANO, M. Differential filters for the large eddy numerical simulation of turbulent flows. **Physics of Fluids**, v. 29, n. 6, p. 1755–1757, 1986a. 9

_____. Differential filters of elliptic type. **Physics of Fluids**, v. 29, n. 6, p. 1757–1758, 1986b. 9

GERMANO, M.; PIOMELLI, U.; MOIN, P.; CABOT, W. H. A dynamic subgrid-scale eddy viscosity model. In: . [S.l.]: Proceedings of the Summer Program, 1990. p. 5–17. 47

_____. _____. **Physics of Fluids A**, v. 3, n. 11, p. 1760–1765, 1991. 9

GHOSAL, S. **On the large-eddy simulation of turbulent flows in complex geometries**. Center for Turbulence Research, 1993. Technical Report. 48

GHOSAL, S.; LUND, T. S.; MOIN, P.; AKSELVOLL, K. A dynamic localization model for large eddy simulation of turbulent flows. **Journal of Fluid Mechanics**, v. 286, n. 229, p. 229–255, 1995. 9, 102, 103

GOLDEMBERG, C.; BOWMAN, T.; HANSON, R. H.; SONG, S.; GARDINER, W. C.; VITALI, V. L. J.; ZHIWEI, Q. **GRIMECH 3.0**. 2010. Disponível em: <<http://www.me.berkeley.edu/gri-mech/>>. Acesso em: 15 jun. 2011. 136

GOODWIN, D. **CANTERA**. 2010. Disponível em: <<http://code.google.com/p/cantera/>>. Acesso em: 25 jan. 2012. 136

GSCHAIDER, F.; REHM, M.; SEIFERT, P.; MEYER, B. **Implementation of an Alternate Chemistry Library into OpenFOAM**. 2010. Disponível em:

<http://powerlab.fsb.hr/ped/kturbo/openfoam/Berlin2008/SessionVA/OSCIC-08_GschaiderRehm.pdf>. Acesso em: 25 jan. 2012. 155

GUERMOND, J. L.; ODEN, J. T.; PRUDHOMMEP, S. Mathematical perspectives on large eddy simulation models for turbulent flows. **Journal of Mathematical Fluid Mechanics**, v. 6, p. 194–248, 2004. 8

GULDER, O. L. Turbulent premixed flame propagation models for different combustion regimes. In: **Twenty-Third Symposium (International) on Combustion**. [S.l.]: The combustion Institute, 1990. p. 743–750. 59

HAWKES, E.; CANT, S. A flame surface density approach to large eddy simulation of premixed turbulent combustion. In: INST., P. C. (Ed.). **Proc. Combust. Inst.** [S.l.: s.n.], 2000. v. 28, p. 51–58. 10

HOSSAIN, M.; JONES, J. C.; MALALASEKERA, W. Modelling of a bluff-body nonpremixed flame using a coupled radiation/flamelet combustion model. **Flow, Turbulence and Combustion**, v. 67, p. 217–234, 2001. 132

HWANG, C. B.; LIN, C. A. Improved low reynolds number $k - \epsilon$ model based on direct numerical simulation data. **AIAA Journal**, v. 36, n. 1, p. 38–43, 1998. 7

IM, H. G.; LUND, T. S.; FERZINGER, J. H. Large eddy simulation of turbulent front propagation with dynamic subgrid-models. **Phys. Fluids**, v. 9, n. 12, p. 3826–3833, 1997. 10

ISSA, R. I. Solution of the implicitly discretized fluid flow equations by operator splitting. **Journal of Computational Physics**, v. 62, p. 40–65, 1986. 91, 92

JACOBS, D. A. H. **Central Electricity Research Laboratories**. [S.l.: s.n.], 1980. Technical Report. 80

JASAK, H. **Error Analysis and Estimation for the Finite Volume Method with Applications to Fluid Flows**. Thesis (PhD) — Imperial College of Science, Technology and Medicine, London SW7 2BX, 1996. 75, 80

JASAK, H.; WELLER, H.; NORDIN, N. In cylinder cfd simulation using a c++ object-oriented toolkit. **SAE**, n. 2004-01-0110, p. Technical Papers, 2004. 75

JAYATILLEKE, C. The influence of prandtl number and surface roughness on the resistance of the laminar sublayer to momentum and heat transfer. **Prog. Heat Mass Transfer**, v. 1, p. 193–321, 1969. 107

- JONES, W. P.; LAUNDER, B. E. The prediction of laminarization with a two-equation model of turbulence. **Int. J. Heat and Mass Transfer**, v. 15, p. 301–314, 1972. 7
- JOUGET, E. Mécanique des explosifs. **J. Mathématique**, Paris, v. 346, n. 6, p. 1905, 1917. 3
- JURETIC, F. **Error Analysis in Finite Volume**. Thesis (PhD) — Imperial College of Science, Technology and Medicine, London SW7 2BX, 2004. 75
- KARKI, K. C. **A Calculation Procedure for Viscous Flows at all Speed in complex Geometries**. Thesis (PhD) — University of Minnesota, Faculty of the Graduated School, Minnesota, 1986. 87
- KARLSSON, J. A. **Modeling Auto-Ignition, Flame Propagation and Combustion in Non-stationary Turbulent Sprays**. Thesis (PhD) — Chalmers University of Technology, Göteborg, 1995. 13
- KARLSSON, J. A.; CHOMIAK, J. **Physical and Chemical Effects in Diesel Spray Ignition**. Interlaken Switzerland: Twenty-One CIMAC, 1995b. Twenty-one Congress of CIMAC. 72
- KAWAI, S.; LELE, S. K. **Large-eddy simulation of jet mixing in a supersonic turbulent crossflow**. Center for Turbulence Research: [s.n.], 2008. 139-151 p. Annual Research Briefs. 14
- KEMPF, A. Les validation from experiments. **Flow, Turbulence and Combustion**, v. 80, p. 351–373, 2008. 14
- KERSTEIN, A. R. Linear-eddy modeling of turbulent transport: Part ii. application to shear layer mixing. **Combustion and Flame**, v. 74, n. 3-4, p. 397–413, 1989. 13
- KERSTEIN, A. R.; ASHURST, W.; WILLIAMS, F. A. Field equation for interface propagation in an unsteady homogeneous flow field. **Phys. Rev. A**, v. 37, n. 7, p. 2728–2731, 1988. 13
- KIEL, B.; GARWICK, L. K.; GORD, J. G.; MILLER, J.; LYNCH, A. A detailed investigation of bluff-body stabilized flames. **AIAA 2007-168**, 45th AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit 8 - 11 January, Reno, Nevada, 2007. 12
- KIM, J. S.; WILLIAMS, M. A. Extinction of diffusion flames with nonunity lewis numbers. **J. of Eng. Math.**, v. 31, p. 101–118, 1997. 27, 28

- KIM, W. W.; MENON, S. A new incompressible solver for large eddy simulations. **International Journal of Numerical Methods in Fluids**, v. 31, p. 983–1017, 1999. 64
- KJÄLDMAN, L.; BRINK, A.; HUPA, M. Micro mixing time in the eddy dissipation concept. **Combustion Science and Technology**, v. 154, p. 207–227, 2000. 72
- KLIMENKO, A.; BILGER, R. W. Conditional moment closure for turbulent combustion. **Progress in Energy and Combustion Science**, v. 25, p. 595–687, 1996. 69
- KNIKKER, R.; VEYNANTE, D.; MENEVEAU, C. A priori testing of a similarity model for large eddy simulations of turbulent premixed combustion. In: **Twenty-Nine Symposium (International) on Combustion**. Pittsburg, EUA: The combustion Institute, 2002. 11
- KUNDU, P. K.; COHEN, I. M. **Fluid Mechanics**An. [S.l.]: Elsevier academic press, 2004. Third edition. 4
- KUO, K. K. **Principles of Combustion**. USA: John Wiley and Son, INC., 2004. Second edition. 3, 18, 19
- LAM, C. K. G.; BREMHORST, K. A modified form of the $k - \epsilon$ model for predicting wall turbulence. **Journal of Fluids engineering**, v. 103, p. 456–460, 1981. 7
- LAWN, C. J. Lifted flames on fuel jets in co-flowing air. **Progress in Energy and Combustion Science**, v. 35, p. 1–30, 2009. 154
- LEDERLIN, T.; PITTSCH, H. Large-eddy simulation of an evaporating and reacting spray. **Center for Turbulence Research**, p. 479–490, 2008. 14
- LEE, Y. Y. **Nonpremixed reacting flows near extinction**. Thesis (PhD) — Cornell University, Cornell USA, 1994. 38
- LIBBY, P.; WILLIAMS, M. A. **Turbulent Reacting Flow**. New York: Academic Press, 1994. 1, 38
- LIEUWEN, T. C.; ZINN, B. T. Combustion instabilities: Basic concepts. in combustion instabilities in gas turbine engines: Operational experience. fundamental mechanisms, and modeling. **AIAA Progress in Aeronautics and Astronautics**, v. 210, p. 3–26, 2005. 123

LIU, Y.; LAU, K. S.; CHAN, C. K.; GUO, Y. C.; LIN, W. Y. Structures of scalar transport in 2d transitional jet diffusion flames by les. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 46, p. 3841–3851, 2003. 14

LIÑAN, A. The asymptotic structure of counterflow diffusion flame for large activation energies. **Acta Astronaut.**, v. 1, p. 1007, 1974. 20, 26, 27, 28, 39

MAHALINGAM, S.; CHEN, J. H.; VERVISCH, L. Finite-rate chemistry and transient effects in direct numerical simulations of turbulent nonpremixed flames. **Combustion and Flame**, v. 102, n. 3, p. 285–297, 1995. 39

MALALASEKERA, W.; VERSTEEG, H. K. **Computational Fluid Dynamics**. England: Longman Scientific, 1995. 4, 91

MANGANI, L.; BIANCHINI, C.; ANDREINI, A.; FACCHINI, B. **Development and Validation of C++ Object Oriented CFD CODE For Heat Transfer Analysis**. [S.l.]: ASME-JSME, 2007. 139-151 p. Thermal Engineering and Summer Heat Transfer. xii, 77, 145, 146

MANICKAM, B.; FRANKE, J.; MUPPALA, S. P.; DINKELACKER, F. Large-eddy simulation of triangular-stabilized lean premixed turbulent flames: Quality and error assessment. **Flow Turbulence Combustion**, v. 88, p. 563–596, 2012. 11, 13

MARBEL, F. E.; BROADWELL, J. E. **The coherent flame model of chemical reaction**. TRW-9-PU, project Squib Rep.: [s.n.], 1977. Technical Report. 10

MCMURTHY, P. A.; JOU, W. H.; RILEY, J. J.; METCALFE, R. W. Direct numerical simulations of a reacting mixing layer with chemical heat release. **AIAA Journal**, v. 26, n. 6, p. 962–970, 1985. 128

MENON, S. Active combustion control in a ramjet using large eddy simulations. **Combustion Science and Technology**, v. 84, p. 51–79, 1992. 47

MENON, S.; CALHOON, W. Subgrid mixing and molecular transport modeling for large-eddy simulations of turbulent reacting flows. In: COMBUSTION INSTITUTE, 26. **Proceedings...** [S.l.], 1996. p. 59–66. 9

MOIN, P.; SQUIRES, W.; CABOT, W.; LEE, S. A dynamic sub-grid scale model for compressible turbulence and scalar transport. **Journal of Fluid Mechanics**, v. 3, n. 11, p. 2746–2757, 1991. 47

MUELLER, C. J.; DRISCOLL, J. F.; REUSS, D. L.; DRAKE, M. C.; ROSALIK, M. E. Vorticity generation and attenuation as vortices convect through a premixed flame. **Combustion and Flame**, v. 112, 1998. 3

MURTHY, J. Y.; MATHUR, S. R. **Numerical methods in heat, mass and momentum transfer**. School of Mechanical Engineering Purdue University.: [s.n.], 2002. Technical Report ME 608. 91

NAVARRO-MARTINEZ, S.; KRONENBURG, A. Les-cmc simulation of a turbulent bluff-body flame. **Combustion and Flame**, v. 31, p. 1721–1728, 2007. 154, 158, 164

NORDIN, P. N. **Complex Chemistry Modeling of Diesel Spray Combustion**. Thesis (PhD) — Chalmers University, Chalmers, 2001. 72

OPEN SOURCE CFD. **USER GUIDE. The Open Source CFD Toolbox**. 2010. Disponível em: <<http://foam.sourceforge.net/docs/Guides-a4/UserGuide.pdf>>. Acesso em: 25 nov. 2012. 75, 191

PARK, N. S.; KO, S. C. Large eddy simulation of turbulent premixed combustion flow around bluff-body. **Journal of Mechanical Science and Technology**, v. 25, n. 9, p. 2227–2235, 2011. 10, 13, 128, 129

PATANKAR, S. V. **Numerical Heat Transfer and Fluid Flow**. USA: Taylor & Francis, 1998. 316 p. 91

PATANKAR, S. V.; SPALDING, D. B. A calculation procedure for heat, mass and momentum transfer in three-dimensional parabolic flows. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 15, p. 1787–1805, 1972. 87

PETERS, N. Laminar diffusion flamelet models in non-premixed turbulent combustion. **Progress in Energy and Combustion Science**, v. 10, n. 3, p. 319–339, 1984. 31

_____. Laminar flamelet concepts in turbulent combustion. In: **Twenty-Fifth Symposium (International) on Combustion**. Pittsburg, EUA: The combustion Institute, 1986. p. 1231–1250. 33, 34

_____. **Fifteen lectures on laminar and turbulent combustion**. Aachen, Germany: Ercoftac Summer School, 1992. Disponível em: <<http://www.itv.rwthachen.de/fileadmin/LehreSeminar/Combustion/SummerSchool.pdf>>. Acesso em: 15 de Julho de 2010. 33

_____. **Four lectures on turbulent combustion**. Aachen, Germany: Ercoftac Summer School, 1997. Disponível em: <<http://www.itv.rwthachen.de>>. Acesso em: 15 de Julho de 2010. 31

_____. The turbulent burning velocity for large-scale and small-scale turbulence. **J. Fluid Mech.**, v. 384, p. 319–339, 1999. 33, 34, 36

_____. **Turbulent Combustion**. [S.l.]: Cambridge University Press, 2000. 2, 10, 25, 31, 32, 34, 106

PETERS, N.; ROGG, B. **Reduced Kinetics Mechanism for Application in Combustion**. Berlin: Springer-Verlag, 1993. 135

PFUDERER, D.; HASSEL, E.; JANICKA, J. **Measurements and Computations of EKT-Flame (H3) and Sandia/ETHZ -Flame(H2He20)**. Heppenheim: Proceeding of 2nd. TNF Workshop, 1997. 3

PITSCH, H.; PETERS, N. A consistent flamelet formulation for non-premixed combustion considering differential diffusion effects. **Combustion and Flame**, v. 114, p. 26–40, 1998. 31

PITSCH, H.; STEINER, H. Large-eddy simulation of a turbulent piloted methane/air diffusion flame (sandia flame d). **Physics of Fluids**, v. 12, n. 10, p. 2541–2554, 2000. 14

POINSOT, T.; VEYNANTE, D. **Theoretical and Numerical Combustion**. Inc.: R. T. Edwards, 1997. 602 p. 6, 33

POINSOT, T. J.; VEYNANTE, D.; CANDEL, S. Quenching processes and premixed turbulent combustion diagrams. **Journal of Fluid Mechanics**, v. 228, n. 5, p. 561–606, 1991. 38, 61

POPE, S. B. The evolution of surface in turbulence. **Intern. J. Engrg. Sci.**, v. 26, n. 5, p. 445–469, 1988. 10

_____. **Turbulent Flows**. [S.l.]: Cambridge University Press, 2000. 48

PORUMBEL, I. M. **Large eddy simulation of bluff body stabilized premixed flame**. [S.l.]: AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit, 2006. 1-17 p. 13

RAMAN, V.; PITSCH, H. Large-eddy simulation of a methane-hydrogen flame using recursive refinement procedure. **Combustion and Flame**, v. 142, n. 4, p. 329–347, 2005. 145, 164

- RÉVEILLON, J.; VERVISCH, L. **Dynamic subgrid pdf modeling for non premixed turbulent combustion**: Direct and large eddy simulation ii. [S.l.]: Kluwer Academic Publishers, 1997. 311- 320 p. J.P. Chollet, P.R. Voke, and L. Kleiser, editors. [14](#)
- RÉVEILLON, J.; VERVISCH, L. Subgrid mixing modeling: A dynamic approach. **AIAA Journal**, v. 36, n. 3, p. 336–341, 1998. [13](#)
- RHIE, C. M.; CHOW, W. L. Numerical study of the turbulent flow past an airfoil with trailing edge separation. **AIAA Journal**, v. 21, p. 1525–1532, 1983. [92](#)
- ROBERTS, W.; DRISCOLL, J. F. A laminar vortex interacting with a premixed flame: measured formation of pockets of reactants. **Combustion and Flame**, v. 87, p. 245–256, 1991. [3](#)
- ROBERTS, W.; DRISCOLL, J. F.; DRAKE, M. C.; GOSS, L. P. Images of the quenching of a flame by a vortex: to quantify regimes of turbulent combustion. **Combustion and Flame**, v. 94, p. 58–69, 1993. [34](#)
- ROMERO, C. Reduced mechanism for nox formation in laminar premixed ch4 air flames. **Fuel**, v. 77, p. 669–675, 1998. [135](#)
- SAGHAFIAN, M.; STANSBY, P. K.; SAIDI, M. S.; APSLEY, D. D. Simulation of turbulent flows around a circular cylinder using nonlinear eddy viscosity modelling: steady and oscillatory ambient flows. **Journal of Fluids and Structures**, v. 17, n. 8, p. 1213–1236, 2003. [11](#)
- SANKARAN, V.; MENON, S. Subgrid combustion modeling of 3-d premixed flames in the thin-reaction-zone regime. In: **Proceeding...** Chicago: The combustion Institute, 2004. v. 30, p. 575–582. [9](#)
- SANQUER, S. **Experimental Study of a Bluff-Body Wake, in Presence of Combustion , in Fully Developed Turbulent Channel Flow: Turbulence Scales and Critical Analysis of Transport and Combustion Models**. Thesis (PhD) — Université de Poitiers, Poitiers, 1998. [x](#), [11](#), [15](#), [105](#), [106](#), [108](#), [109](#), [112](#), [113](#), [114](#), [122](#), [123](#), [127](#), [167](#)
- SAXENA, P.; WILLIAMS, F. A. Numerical and experimental studies of ethanol flames. In: **Proceeding...** [S.l.]: The combustion Institute, 2007. v. 31, p. 1149–1156. [14](#)
- SCHUMANN, U. Subgrid scale model for finite difference simulations in plane channels and annuli. **J. Comp. Phys.**, v. 18, p. 376–404, 1975. [8](#), [64](#), [101](#)

_____. Large eddy simulation of turbulent diffusion with chemical reactions in the convective boundary layer. **Atmos. Environ.**, v. 29, p. 1713–1729, 1989. 8

SHINJO, J.; MIJOBUCHI, Y.; OGAWA, S. Les of unstable combustion in a gas turbine combustor. **High Performance Computing**, v. 2858, p. 234–244, 2003. 9

SJUNNESSON, A.; HENRIKSSON, R.; LOFSTROM, C. Cars measurements and visualization of reacting flows in bluff-body stabilized flame. **AIAA PAPERS**, AIAA-92-3650, 1992. 11, 13

SJUNNESSON, A.; OLOVSSON, S.; SJOBLOM, B. **Validation Rig - A Tool for Flame Studies - A Tool for Flame Studies**. [S.l.: s.n.], 1991a. Technical Report 9370-3088. 11

_____. **Volvo Flygmotor internal**. [S.l.: s.n.], 1991b. Technical Report VFA9370-308. 11, 13

SMAGORINSKY, J. General circulation experiments with the primitive equations. **Monthly Weather Review**, p. 99–165, 1963. 8, 9, 47, 64, 102

SMOOKE, M. D.; MITCHEL, R. E.; KEYES, D. E. Numerical solution of two-dimensional axisymmetric laminar diffusion flames. **Comb. Sci. and Technology**, v. 67, p. 67–122, 1989. 3

STEINER, H.; BUSHE, W. K. **LES of non-premixed turbulent reacting flows with conditional source term estimation**. Center for Turbulence Research, 1998. 23-34 p. Technical Report. 14

STONE, C.; MENON, S. Open loop control of combustion instabilities in a model gas turbine combustor. **Journal of Turbulence**, v. 4, p. 20, 2003. 9

STOURSTROUP, B. **The C++ programming language**. USA: Addison Wesley, 1997. 74

SYDNEY UNIVERSITY OF. **BLUFF-BODY FLOWS AND FLAMES: Flow field data**. 2010. Disponível em:
<<http://sydney.edu.au/engineering/aeromech/thermofluids/bluff.htm>>. Acesso em: 25 nov. 2012. 15, 130

TABOR, G.; WELLER, H. Large eddy simulation of premixed turbulent combustion using xi flame surface wrinkling model. **Flow, Turbulence and Combustion**, v. 72, p. 1–28, 2004. 13, 15, 48, 49, 54, 56, 58

TIMOTHY, C. L. **Unsteady Combustion Physics**. New York: Cambridge University Press, 2012. 112

TNF. **Workshop on Measurement and Computation of Turbulent Nonpremixed Flames**. 2011. Disponível em: <<http://www.ca.sandia.gov/tdf/Workshop.html>>. Acesso em: 25 nov. 2012. 3, 4, 15, 105, 130, 138

URNS, S. R. **An Introduction to Combustion**. [S.l.]: McGraw Hill, 2006. Second ed. ISBN 978-007-126072-5. 29

TURÁNYI, T. Application of repro-modeling for the reduction of combustion mechanism. In: **Twenty-Fifth Symposium (International) on Combustion**. [S.l.]: The Combustion Institute, 1994. p. 949–955. 135

VERVISCH, L.; BIDAUX, E.; BRIEN, K.; KOLLMAN, W. Surface density function in premixed turbulent combustion modelling, similarities between probability density function and flame surface approach. **Physics of Fluids**, v. 7, n. 10, p. 2496–2503, 1995. 10

VEYNANTE, D. Large eddy simulation of turbulent combustion. **Conference on Turbulence and Interaction**, TI2006, p. 202, 2006. 13

VEYNANTE, D.; PIANA, J.; DUCLOS, J. M.; MARTEL, C. Experimental analysis of flame surface density models for premixed turbulent combustion. In: **Twenty-Sixth Symposium (International) on Combustion**. Naples: The Combustion Institute, 1996. p. 1249–1256. 65, 128

VEYNANTE, D.; TROUVE, A.; BRAY, K. N. C.; MANTEL, T. Gradient and counter-gradient scalar transport in turbulent premixed flames. **J. Fluid Mech.**, v. 332, p. 263 – 293, 1997. 38

VEYNANTE, D.; VERVISCH, L. Turbulent combustion modeling. **Progress in Energy and Combustion Science**, v. 28, n. 3, p. 193–266(74), 2002. 8, 21, 27, 28, 35, 40, 41, 42

VICQUELIN, R.; FIORINA, B.; DARABIHA, N.; VEYNANTE, D.; MOUREAU, V.; VERVISCH, L. **Coupling tabulated chemistry with large-eddy simulation of turbulent reactive flows**. Center for Turbulence Research, 2008. 237-249 p. Proceedings of the Summer Program. 14

- VILLASEÑOR, R.; PITZ, R. W. Interaction between chemical reaction and turbulence in supersonic non-premixed h₂-air combustion. **AIAA paper 91-0375**, n. 91-0375, 1991. 30
- VORST, H. A. V. D. Bi-cgstab: A fast and smoothly converging variant of bi-cg for the solution of nonsymmetric linear systems. **SIAM J. Sci. Stat. Comput.**, v. 13, n. 2, p. 631–644, 1992. 80
- WATANABE, H.; KUROSE, R.; HWANG, S. M.; AKAMATSU, F. Characteristics of flamelets in spray flames formed in a laminar counterflow. **Combustion and Flame**, v. 148, p. 234–248, 2007. 14
- WELLER, H. **The development of a new flame area combustion model using conditional averaging Thermo-Fluids Section Report TF 9307.** Thesis (PhD) — Imperial College of Science, technology and Medicine, London, 1993. 13, 48, 56, 58
- WELLER, H. G.; MAROONEY, C. J.; GOSMAN, A. D. A new spectral method for calculation of the time varying area of laminar flame in homogeneous turbulence. In: **Twenty-Third Symposium (International) on Combustion**. [S.l.]: The combustion Institute, 1990. p. 629–636. 59, 61, 106
- WELLER, H. G.; TABOR, G.; GOSMAN, A. D.; FUREBY, C. Application of a flame wrinkling les combustion model to a turbulent mixing layer. In: **Twenty-Seventh Symposium (International) on Combustion**. [S.l.]: The combustion Institute, 1998. p. 899–907. 13, 61
- WILCOX, D. C. **Turbulence Modeling for CFD**. USA: DCW Industries, 1998. 2nd Edition. 7
- WILLIAMS, F. E. **Combustion Theory: The Fundamental Theory of Chemically Reacting Flow Systems**. USA: Addison-Wesley, 1985. 3, 19, 20, 25, 28, 31, 33, 34
- YOSHISAWA, A.; HORIUCHI, K. A statistically-derived subgrid-scale kinetic energy model for the large eddy simulation of turbulence flow. **Journal of physics Society of Japan**, v. 54, p. 2834–2839, 1985. 102, 103
- ZEL'DOVICH, Y. B.; BARENBLATT, G. I.; LIBROVICH, V. B.; MAKHVILADZE, G. M. **The Mathematical Theory of Combustion and Explosions**. New York: Consultants Bureau-Plenum Publishing Corporation, 1985. 17, 18, 19

ZEL'DOVICH, Y. B.; SEMENOV, N. Translation, n.a.c.a. tech. mem. **J. Expt. Theoret. Phys.**, URSS, v. 10, p. 116, 1940. 3

ANEXO A - MECANISMO REDUZIDO POA

Neste anexo é fornecido o arquivo do mecanismo usado no OpenFoam para resolver a cinética química.

ELEMENTS

H O C N AR

END

SPECIES

CH4 H2 O2 HCN NH3 C CH CH2 CH2O CH3 C2H6 C2H5 C2H4 C2H3 C2H2 CN CO CO2 H
H2O HCO HNO HO2 N N2 N2O NCO NH NO NO2 O NH2 OH AR

END

REACTIONS

```
CH4 + OH = CH3 + H2O      1.00E+08   1.60   3120.
CH3 + O = CH2O + H        8.43E+13   0.00    0.
CH2O + OH = HCO + H2O    3.43E+09   1.18  -447.
HCO + M = CO + H + M     1.86E+17  -1.00  17000.
CO + OH = CO2 + H        4.40E+06   1.50  -740.
CH3 + CH3 + M = C2H6 + M  2.10E+16  -0.97   620.
H2/2.0/ CO/2.0/ CO2/3.0/ H2O/5.0/
C2H6 + H = C2H5 + H2     5.40E+02   3.50  5210.
C2H4 + H + M = C2H5 + M  2.21E+13   0.00  2066.
H2/2.0/ CO/2.0/ CO2/3.0/ H2O/5.0/
C2H4 + OH = C2H3 + H2O   5.53E+05   2.31  2962.
C2H3 + M = C2H2 + H + M  1.51E+14   0.10  32700.
C2H2 + O = CH2 + CO      1.60E+14   0.00  9900.
CH2 + OH = CH + H2O     1.13E+07   2.00  3000.
CH + O2 = HCO + O        3.30E+13   0.00    0.
CH + H = C + H2          1.50E+14   0.00    0.
C + OH = CO + H          5.00E+13   0.00    0.
H + O2 = O + OH          3.52E+16  -0.70  17060.
H2 + O = H + OH          5.06E+04   2.67  6290.
H2 + OH = H2O + H        2.10E+08   1.52  3450.
H + OH + M = H2O + M     2.21E+22  -2.00    0
H2O/20.0/
HO2 + OH = H2O + O2     2.89E+13   0.00  -500.
H + O2 + M = HO2 + M    3.50E+16  -0.41 -1120.
H2/3.3/CO/2.0/CO2/5.0/H2O/21.0/O2/0.0/N2/0.0/
```

CH + N2 = HCN + N	4.40E+12	0.00	21900.
HCN + O = NCO + H	1.38E+04	2.64	4980.
HCN + OH = CN + H2O	1.45E+13	0.00	10929.
CN + OH = NCO + H	4.00E+13	0.00	0.
NCO + OH = NO + CO + H	1.00E+13	0.00	0.
NCO + H = NH + CO	5.00E+13	0.00	0.
NH + OH = N + H2O	5.00E+11	0.50	2000.
NH + OH = HNO + H	2.00E+13	0.00	0.
HNO + OH = NO + H2O	1.30E+07	1.88	-955.
HNO + M = H + NO + M	1.50E+16	0.00	48680.
H2/2.0/ N2/2.0/O2/2.0/ H2O/6.0/			
N + NO = N2 + O	3.30E+12	0.30	0.
N + O2 = NO + O	6.40E+09	1.00	6275.
N + OH = NO + H	3.80E+13	0.00	0.
NCO + NO = N2O + CO	6.20E+17	-1.73	762.
N2O + M = N2 + O + M	4.00E+14	0.00	56100.
H2/2.0/ CO/2.0/CO2/3.0/ H2O/5.0/			
NO + HO2 = NO2 + OH	2.10E+12	0.00	-480.
NO2 + M = NO + O + M	1.10E+16	0.00	66000.
NO2 + H = NO + OH	1.32E+14	0.00	360.
N2O + H = N2 + OH	3.87E+14	0.00	18880.
CH + NO = HCN + O	1.10E+14	0.00	0.
C + NO = CN + O	1.90E+13	0.00	0.
NH3 + H = NH2 + H2	6.38E+05	2.39	10171.00
NH3 + OH = NH2 + H2O	2.04E+06	2.04	566.00
NH2 + H = NH + H2	4.00E+13	0.00	3650.00
NH2 + OH = NH + H2O	4.00E+06	2.00	1000.00
END			

Fonte: Adaptada de (AZEVEDO, 2007).

ANEXO B - PROPRIEDADES TERMO-FÍSICAS

O cálculo do thermoType tem vários tipos de rotina, conforme listado na tabela . Para obter mais detalhes consultar o UserGuide (OPEN SOURCE CFD, 2010).

Tabela B.1 - Descrição de entradas termofísicas.

	tipo	Descrição
modelo termofísico	<i>hhuMixtureThermo</i>	Cálcula a entalpia dos gases não queimados e a combustão da mistura
Propriedades de mistura	<i>egrMixture</i>	Mistura de recirculação de gases de exaustão.
	<i>homogeneousMixture</i>	Combustão de mistura baseada em fração em massa b de combustível normalizado.
	<i>inhomogeneousMixture</i>	Combustão de mistura baseada em b e fração em massa do combustível total f_t .
	<i>veryInhomogeneousMixture</i>	Combustão de mistura baseada em b, f_t e fração em massa do combustível não queimado f_u .
Propriedades de transporte	<i>constTransport</i>	Propriedades de transporte constantes.
	<i>sutherlandTransport</i>	Formula de Sutherland para propriedades de transporte dependente da temperatura.
Propriedades termofísicas derivadas	<i>specieThermo</i>	propriedades termofísicas de espécies derivadas de C_p, h e/ou s .
Propriedades termofísicas básicas	<i>hConstThermo</i>	Modelo com constante específica de calor C_p constante, com avaliação de entalpia h e entropia e .
	<i>janafThermo</i>	C_p avaliado por uma função com coeficientes da tabela termodinâmica JANAF a partir de h e s
Equação de estado	<i>perfectGas</i>	Equação de estado para gases perfeitos

Para o presente trabalho o arquivo de entrada tem a seguinte denominação:

thermoType

hhuMixtureThermo < homogeneousMixture < sutherlandTransport <

specieThermo < janafThermo < perfectGas >>>>

e pode ser lido a partir da tabela B.1, tendo definido que o caso parte do cálculo da entalpia dos gases não queimados e a combustão da mistura baseada na fração em massa b de combustível normalizado, utilizando a formula de Sutherlad para a propriedade de transporte e C_p avaliado por uma função com coeficientes da tabela termodinâmica JANAF a partir de h e s , sendo que todos os cálculos estão baseado na equação de estado para gases perfeitos.

A capacidade calorífica, entalpia e entropia são avaliadas a partir das funções de coeficientes polinômicos:

$$\frac{C_{pk}^o}{R} = a_{1k} + a_{2k}T_k + a_{3k}T_k^2 + a_{4k}T_k^3 + a_{5k}T_k^4 \quad (\text{B.1})$$

$$\frac{H_k^o}{RT_k} = a_{1k} + \frac{a_{2k}}{2}T_k + \frac{a_{3k}}{3}T_k^2 + \frac{a_{4k}}{4}T_k^3 + \frac{a_{5k}}{5}T_k^4 + \frac{a_{6k}}{T_k} \quad (\text{B.2})$$

$$\frac{S_k^o}{R} = a_{1k}\ln T_k + a_{2k}T_k + \frac{a_{3k}}{2}T_k^2 + \frac{a_{4k}}{3}T_k^3 + \frac{a_{5k}}{4}T_k^4 + a_{7k} \quad (\text{B.3})$$

Para gerar a tabela correspondente aos valores desses coeficientes é necessário rodar um utilitário do OpenFOAM denominado *adiabaticFlameT*. Ele faz os cálculos desses valores para varias razões de mistura e tipos de combustíveis. Dali é copiado para o arquivo *thermodynamicsProperties* para determinar as outras variáveis no XiFoam. A ordem das linhas descrevem o seguinte:

linha 1: fuel

linha 2: fuel 1 44.0962

linha 3: 200 5000 1000

linha 4: 7.53414 0.0188722 -6.27185e-06 9.14756e-10 -4.78381e-14 -16467.5 -17.8923

linha 5: 0.933554 0.0264246 6.10597e-06 -2.19775e-08 9.51493e-12 -13958.5 19.2017

linha 6: 1.67212e-06 170.672;

linha 1: palavra chave

linha 2: <coeficiente de espécies>: n-moles em peso Molecular (kg/kmol)

linha 3: Limite de temperatura menor Tl(K), Limite de temperature superior Th(K), Temperatura média Tc(K)

linha 4: Coeficientes de temperatura alta: a1-a7 (a6:entalpia de compensação, a7: entropia de compensação)

linha 5: Coeficientes de temperatura baixa: a1-a7 (a6:entalpia de compensação, a7: entropia de compensação)

linha 6: Coeficientes de Sutherland

Os dois últimos coeficientes são denominados coeficientes de Southerland e se usam na seguinte formula, que é uma função da temperatura para determinar a difusividade:

$$\mu = A_s \frac{T^{1/2}}{1 + T_s/T} \quad (\text{B.4})$$

Para viscosidade laminar os valores para A_s e T_s são $1.67212e-06$, 170.672 respectivamente.

ANEXO C - ARQUIVO CONTROLDICT

```
FoamFile version 2.0; format ascii;

root ; case ; instance ; local ;

class dictionary; object controlDict;

// * * * * * //

application reactingFoamLES;

startFrom latestTime;

latestTime 0.06;

stopAt endTime;

endTime 1;

deltaT 1e-05; //passo do tempo

writeControl adjustableRunTime;

writeInterval 5.0e-4;

purgeWrite 0;

writeFormat binary;

writePrecision 6;

writeCompression uncompressed;

timeFormat general;

timePrecision 6;

adjustTimeStep yes; //passo de tempo ajustável

maxCo 0.2; //Valor máximo para o número de Courant

runTimeModifiable yes;
```


ANEXO D - BIBLIOTECAS SGE IMPLEMENTADAS NO REACTINGFOAM

O diretório onde OpenFoam implementa os modelos de turbulência estão localizados em: src/turbulenceModel

dentro do arquivo files no directório que contem o diretório fonte reactingFoamRAS modificamos:

EXE-INC =

```
-I../XiFoam
-I(LIB-SRC)/finiteVolume/lnInclude
-I(LIB-SRC)/turbulenceModels/LES
-I(LIB-SRC)/turbulenceModels/LES/LESdeltas/lnInclude
-I(LIB-SRC)/thermophysicalModels/specie/lnInclude
-I(LIB-SRC)/thermophysicalModels/combustion/lnInclude
-I(LIB-SRC)/thermophysicalModels/basic/lnInclude
-I(LIB-SRC)/thermophysicalModels/chemistryModel/lnInclude
-I(LIB-SRC)/ODE/lnInclude
-I(LIB-SRC)/engine/lnInclude
```

EXE-LIBS =

```
-lcompressibleLESModels
-lcombustionThermophysicalModels
-lfiniteVolume
-lspecie
-lbasicThermophysicalModels
-lchemistryModel
-lODE
-lengine
```

Retiramos os arquivos que continham as bibliotecas RANS.

```
wclean
rm -r Make/linuxGccDP*
```

Geramos o modelo com as bibliotecas SGE.

```
wmake
```

No arquivo creatingField.H agregamos os modelos de turbulência na linha 61-63, logo comentamos as linhas 72-74:

```
Info << "Creating turbulence model.n"<< nl;
autoPtr<compressible::LESModel> turbulence
```

```
(
compressible::LESModel::New
(
rho,
U,
phi,
thermo()
)
//Info<< "Creating field DpDt n"<< endl;
//volScalarField DpDt =
// fvc::DDt(surfaceScalarField("phiU", phi/fvc::interpolate(rho)), p);
```

PUBLICAÇÕES TÉCNICO-CIENTÍFICAS EDITADAS PELO INPE

Teses e Dissertações (TDI)

Teses e Dissertações apresentadas nos Cursos de Pós-Graduação do INPE.

Manuais Técnicos (MAN)

São publicações de caráter técnico que incluem normas, procedimentos, instruções e orientações.

Notas Técnico-Científicas (NTC)

Incluem resultados preliminares de pesquisa, descrição de equipamentos, descrição e ou documentação de programas de computador, descrição de sistemas e experimentos, apresentação de testes, dados, atlas, e documentação de projetos de engenharia.

Relatórios de Pesquisa (RPQ)

Reportam resultados ou progressos de pesquisas tanto de natureza técnica quanto científica, cujo nível seja compatível com o de uma publicação em periódico nacional ou internacional.

Propostas e Relatórios de Projetos (PRP)

São propostas de projetos técnico-científicos e relatórios de acompanhamento de projetos, atividades e convênios.

Publicações Didáticas (PUD)

Incluem apostilas, notas de aula e manuais didáticos.

Publicações Seriadas

São os seriados técnico-científicos: boletins, periódicos, anuários e anais de eventos (simpósios e congressos). Contam destas publicações o Internacional Standard Serial Number (ISSN), que é um código único e definitivo para identificação de títulos de seriados.

Programas de Computador (PDC)

São a seqüência de instruções ou códigos, expressos em uma linguagem de programação compilada ou interpretada, a ser executada por um computador para alcançar um determinado objetivo. Aceitam-se tanto programas fonte quanto os executáveis.

Pré-publicações (PRE)

Todos os artigos publicados em periódicos, anais e como capítulos de livros.