

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
INSTITUTO DE MATEMÁTICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM MATEMÁTICA APLICADA

**Desenvolvimento de Soluções
Analíticas e Numéricas para
Chamas Difusivas**

por

Francieli Aparecida Vaz

Dissertação submetida como requisito parcial
para a obtenção do grau de
Mestre em Matemática Aplicada

Prof. Dr. Álvaro Luiz de Bortoli
Orientador

Porto Alegre, fevereiro de 2010.

CIP - CATALOGAÇÃO NA PUBLICAÇÃO

Vaz, Francieli Aparecida

Desenvolvimento de Soluções Analíticas e Numéricas para Chamas Difusivas / Francieli Aparecida Vaz.—Porto Alegre: PPGMAp da UFRGS, 2010.

77 p.: il.

Dissertação (mestrado) —Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada, Porto Alegre, 2010.

Orientador: de Bortoli, Álvaro Luiz

Dissertação: Matemática Aplicada
Chamas Difusivas, Flamelets

Desenvolvimento de Soluções Analíticas e Numéricas para Chamas Difusivas

por

Francieli Aparecida Vaz

Dissertação submetida ao Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada do Instituto de Matemática da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, como requisito parcial para a obtenção do grau de

Mestre em Matemática Aplicada

Linha de Pesquisa: Dinâmica de Fluidos

Orientador: Prof. Dr. Álvaro Luiz de Bortoli

Banca examinadora:

Prof. Dra. Eliete Biasotto Hauser
FAMAT/PUC-RS

Prof. Dr. Nilo Sérgio Medeiros Cardozo
PPGEQ/UFRGS

Prof. Dr. Dagoberto Adriano Rizzotto Justo
PPGMAP/UFRGS

Dissertação apresentada e aprovada em
18 de fevereiro de 2010.

Prof. Dr. Waldir Leite Roque
Coordenador

AGRADECIMENTOS

A todos aqueles que contribuíram direta ou indiretamente para a realização desta dissertação, apresento os meus sinceros agradecimentos. Em especial:

Ao meu orientador, Prof. Dr. Álvaro Luiz de Bortoli pela orientação, oportunidade e incentivo.

À minha família, em especial ao meu pai que sempre me incentivou e apoiou nos bons e maus momentos.

Ao Marcelo, pelo apoio e paciência ao longo destes anos e os que ainda virão.

A todos os colegas que de alguma forma colaboraram na execução deste trabalho.

Ao PPGMAP, Programa de Pós Graduação em Matemática Aplicada, pela oportunidade de fazer este mestrado. À coordenação e aos professores do programa.

A CAPES, Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior, pelo apoio financeiro.

Sumário

AGRADECIMENTOS	iv
LISTA DE FIGURAS	vii
LISTA DE SÍMBOLOS	ix
LISTA DE SIGLAS	xii
RESUMO	xiii
ABSTRACT	xiv
1 INTRODUÇÃO	1
1.1 Objetivo do trabalho	4
1.2 Descrição dos próximos capítulos	4
2 FORMULAÇÃO	6
2.1 Variáveis de interesse	6
2.2 Estequiometria	8
2.3 Fração de mistura	10
2.4 Conservação da energia durante a combustão	13
2.5 Temperatura adiabática da chama	15
2.6 Balanço de massa	16
2.7 Balanço da quantidade de movimento	18
2.8 Balanço das espécies químicas	19
2.9 Balanço de energia na formulação da temperatura	20
2.10 Simulação em grandes escalas	25
2.11 Estrutura Flamelet de uma chama difusiva	30
2.11.1 Adimensionalização das equações Flamelet	33
3 OBTENÇÃO DE SOLUÇÕES ANALÍTICAS	35
3.1 Solução para os produtos CO_2 e H_2O	36

3.2	Solução para a temperatura	40
3.3	Solução para os reagentes CH_4 e O_2	42
4	OBTENÇÃO DE SOLUÇÕES NUMÉRICAS	44
4.1	Discretização das equações governantes pelo método de Diferenças Finitas	44
4.2	Obtenção da malha computacional	46
4.3	Condições iniciais e de contorno	48
5	RESULTADOS	54
5.1	Comparação das soluções numérica e experimental para a fração de mistura	55
5.2	Comparação das soluções analítica, numérica e experimental para a temperatura	58
5.3	Comparação das soluções analítica, numérica e experimental para a fração mássica do CH_4 , O_2 , H_2O e CO_2	61
6	CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS	71
	REFERÊNCIAS	73

Lista de Figuras

Figura 2.1	Perfil de Y_F e Y_{O_2} antes da queima (esquerda). Perfil de Y_F , Y_{O_2} , Y_{CO_2} e Y_{H_2O} depois da queima (direita) [30].	13
Figura 2.2	Estrutura Flamelet de um jato com chamas pilot.	30
Figura 4.1	Representação de uma secção longitudinal (2D) da malha.	47
Figura 4.2	Representação da forma do queimador utilizado na simulação (esquerda). Uma visualização da base do queimador (direita).	47
Figura 4.3	Fluxograma do código desenvolvido.	52
Figura 5.1	Fração de mistura ao longo da linha central para chama Sandia D.	55
Figura 5.2	Fração de mistura ao longo do raio em $x/d = 15$ (superior) e $x/d = 30$ (inferior) para chama Sandia D.	57
Figura 5.3	Fração de mistura ao longo do raio em $x/d = 45$ para chama Sandia D.	58
Figura 5.4	Comparação da temperatura no espaço da fração de mistura para Chama Sandia D.	59
Figura 5.5	Temperatura ao longo da linha central para Chama Sandia D.	60
Figura 5.6	Temperatura ao longo do raio em $x/d = 30$ para Chama Sandia D.	61
Figura 5.7	Fração mássica do CH_4 no espaço da fração de mistura para Chama Sandia D.	62
Figura 5.8	Fração mássica do CH_4 ao longo da linha central (superior) e na secção radial $x/d = 30$ (inferior) para Chama Sandia D.	63
Figura 5.9	Fração mássica do O_2 no espaço da fração de mistura para Chama Sandia D.	64
Figura 5.10	Fração mássica do O_2 ao longo da linha central para Chama Sandia D.	65
Figura 5.11	Fração mássica do H_2O no espaço da fração de mistura para Chama Sandia D.	66
Figura 5.12	Fração mássica do H_2O ao longo da linha central (superior) e ao longo do raio em $x/d = 45$ (inferior) para Chama Sandia D.	67
Figura 5.13	Fração mássica do CO_2 no espaço da fração de mistura para Chama Sandia D.	68

Figura 5.14 Fração mássica do CO_2 ao longo da linha central (superior) e ao longo do raio em $x/d = 30$ (inferior) para Chama Sandia D. . . 69

LISTA DE SÍMBOLOS

\dot{A}	fator de frequência
a_{kj}	número de átomos do elemento j em uma molécula de espécie k
c_p	calor específico à pressão constante
C_{pk}	calor específico da espécie k
de	variação de energia interna
dq	transferência de calor
dw_R	trabalho realizado pelo atrito
D_a	número de Damköhler
D_k	coeficiente de difusão da espécie k
D_t	difusividade turbulenta
e	energia interna
e_k	energia interna específica da espécie k
e_t	energia total
E	energia de ativação
f_{ki}	força externa atuando na direção i sobre a espécie k
h	entalpia específica
h_k	entalpia específica da espécie k
$h_{k,ref}$	entalpia de referência da espécie k
h_{sk}	entalpia sensível da espécie k
h_t	entalpia total
H	entalpia parcial molar
H_e	taxa de liberação de calor
$H_{k,ref}$	entalpia parcial de referência da espécie k
L_e	número de Lewis
L	comprimento característico
m_j	massa de todos os átomos do elemento j
m_k	massa de todas as moléculas da espécie k
m_s	massa total do sistema

M_k	símbolo químico da espécie k
n_k	número de moles da espécie k
n_s	número de moles total do sistema
p	pressão
P_{rt}	número de Prandtl turbulento
q_i	fluxo de energia
Q	calor de combustão
Q_{ref}	calor de combustão de referência
R	constante dos gases
S	superfície
S_{ct}	número de Schmidt turbulento
t	tempo
T	temperatura
T_{ad}	temperatura adiabática de chama
T_b	temperatura depois da queima
T_{ref}	temperatura de referência
T_u	temperatura antes da queima
T_0	temperatura ambiente
u_k	campo de velocidade da espécie química M_k
v	velocidade média
V	volume específico
V_k	velocidade de difusão da espécie k
\dot{w}_k	taxa de reação da espécie k
\dot{w}'_T	taxa de liberação de calor
W	massa molar
W_k	massa molar da espécie k
X_k	fração molar da espécie k
$Y_{F,1}$	fração de massa do combustível inicial
$Y_{O_2,2}$	fração de massa do oxigênio inicial
Y_k	fração de massa da espécie k

$Y_{k,b}$	fração de massa da espécie k queimada
$Y_{k,u}$	fração de massa da espécie k não queimada
Z	fração de mistura
Z_{st}	fração de mistura estequiométrica
Z_j	fração de massa do elemento j
Ze	número de Zel'dovich

Símbolos Gregos:

δ_{ij}	delta de Kroneker
η	normal unitária
λ	condutividade térmica
μ	viscosidade dinâmica
ν	razão de massa estequiométrica
ν_k	coeficiente estequiométrico da espécie k
ν_t	viscosidade turbulenta
ρ	massa específica
ρ_k	massa específica da espécie k
σ_{ij}	tensor viscoso
τ	tempo adimensional
ϕ_{ij}	tensor tensão
χ	taxa de dissipação escalar

LISTA DE SIGLAS

<i>DNS</i>	Simulação Numérica Direta
<i>EDP</i>	Equações Diferenciais Parciais
<i>LES</i>	Simulação em Grandes Escalas
<i>RANS</i>	Equações de Navier-Stokes mediadas
<i>sgs</i>	<i>subgrid scale</i>
<i>TVD</i>	<i>Total Variational Diminishing</i>

RESUMO

Neste trabalho apresenta-se um estudo analítico e numérico de uma chama difusiva turbulenta de metano. Sob a hipótese de baixo número de Mach, desenvolve-se as equações de balanço das espécies químicas (oxigênio, combustível, dióxido de carbono, vapor d'água), fração de mistura, temperatura e quantidade de movimento. Usa-se o modelo Flamelet para desenvolver o trabalho com uma chama difusiva turbulenta. Soluções analíticas são desenvolvidas pela autora, de modo a compreender os mecanismos não lineares existentes e validar a solução numérica.

A Simulação em Grandes Escalas (LES) é requisitada para representar o fluxo turbulento. Na simulação numérica adota-se o método de diferenças finitas com um sistema não oscilatório do tipo TVD (*Total Variational Diminishing*), considerando um domínio tridimensional do tipo paralelepípedo, com condições de contorno de Dirichlet e Neumann. Os resultados analítico e numérico da temperatura, fração de mistura e fração de massa das espécies são comparados com dados experimentais encontrados na literatura.

ABSTRACT

This work presents an analytical-numerical study of a turbulent diffusion flame of methane. The low Mach number flow hypothesis is assumed, to develop the balance equation of the chemical species (oxygen, fuel, carbon dioxide, water vapour), mixture fraction, temperature and momentum. The Flamelet model is employed to model the turbulent diffusive flame. Analytical solutions are developed by the author, to understand the mechanisms of the nonlinear effects and to validate the numerical solution.

The Large Eddy Simulation (LES) is used to capture the turbulent flow. In the numerical simulation, the finite difference method based on a non oscillatory TVD, Total Variational Diminishing scheme, assuming a three-dimensional parallelepiped domain, with Dirichlet and Neumann boundary conditions, is adopted. The analytical and numerical results for the temperature, mass fraction and mixture fraction are compared with experimental data in the literature.

1 INTRODUÇÃO

Em um mundo onde mais de 80% da transformação de energia provém da combustão, a eficiência, otimização e redução de poluentes de vários tipos de queimadores e máquinas, são assuntos de importância primária para a comunidade científica. A combustão é utilizada para produzir energia elétrica, para acionar os meios de transporte, nas indústrias de produção de energia, na propulsão de foguetes, em sistemas de prevenção de incêndios, no controle de poluentes e no processamento de materiais, dentre outros.

Atenção particular é dedicada a combustão turbulenta, por causa do seu papel fundamental em aplicações industriais para transformação de energia. A combustão de gases como o metano ainda é um dos recursos principais de energia diária, enquanto o interesse em combustão de hidrogênio está aumentando, apontando na direção da produção de energia mais limpa, sem produtos de reação baseada em carbono. Se por um lado as indústrias pressionam por maior eficiência, por outro lado os órgãos sanitários e ecologistas querem o desenvolvimento de processos mais limpos com menos emissão de poluentes.

Os processos de combustão podem ser divididos em pré-misturados, não pré-misturados e parcialmente misturados [18]. Este critério depende da maneira como os reagentes são introduzidas na zona de combustão. Chamas do tipo pré-misturadas são as que o combustível gasoso e o ar misturam-se antes da ignição, e chamas sem pré-mistura são as que o combustível gasoso e o ar encontram-se no instante da combustão, ou seja, na zona de reação [36]. A esta segunda classe de chamas os autores Burke e Schumann têm aplicado o termo “Chamas Difusivas”. Burke e Schumann [10] estabeleceram, em 1928, um modelo de chama sem pré-mistura baseado na hipótese de que o tempo de mistura é muito pequeno, o que implica em uma cinética muito rápida e uma espessura de chama muito fina. Tanto as chamas pré-misturadas e as sem pré-misturas podem ser ainda classificadas como laminar ou turbulenta, dependendo do regime de fluxo de gás.

As chamas difusivas são usadas em indústrias de queimadores a óleo e a gás, motores a diesel e na maioria das turbinas a gás devido à facilidade com que tais chamas podem ser controladas. Uma vez iniciadas, elas tendem a permanecer ancoradas ao queimador sob as mais variadas circunstâncias, estabilizando-se naturalmente na camada cisalhante entre o combustível e o oxidante por não poderem se propagar de um lado para o outro, enquanto que as pré-misturadas têm sua velocidade de propagação característica e, quando se alimentam da mistura fresca (gases não queimados), elas tendem a se propagar para dentro do tubo (queimador) ou apagar. Para iniciar uma chama difusiva algum tipo de agente ignitor, uma faísca elétrica ou uma chama piloto, deve ser aplicada à camada de mistura.

O processo de combustão envolve diversas reações químicas que liberam energia, na forma de calor e luz. As principais reações desse processo ocorrem entre os componentes do combustível e o oxigênio do ar atmosférico, ou ar de combustão. Entretanto, outras reações são possíveis, como entre os componentes do ar ou entre os componentes do próprio combustível [27]. A combustão é geralmente rápida comparada com a mistura molecular, acontecendo em camadas menores que as escalas típicas de turbulência [31]; a espessura de uma frente de uma chama típica é de menos de 0,2 mm. Nesta camada encontram-se altos gradientes de temperatura e a diferença de temperatura entre gases quentes e gases frios é da ordem de 5 a 7; geralmente as taxas de reação e mistura são muito sensíveis em relação a temperatura [40].

Na maioria dos mecanismos práticos de combustão o escoamento é turbulento, o que aumenta consideravelmente o grau de dificuldade do tratamento destes casos. Em simulações numéricas da combustão, várias escalas de tempo e de comprimento devem ser levadas em consideração; a disparidade do tamanho das escalas em um queimador diferem consideravelmente. Por exemplo, o queimador tem comprimento da ordem de 1 m, os vórtices contendo energia tem diâmetros da ordem de 1-10 cm, os vórtices na mistura são da ordem de 1-10 mm, a espessura da chama tem dimensões que variam entre 10-100 μm e o livre caminho médio das

iterações moleculares são muito pequenos, da ordem de 1-10 nm. Além disso, a disparidade de escala de tempo é também muito grande [36], assim todas as escalas devem estar bem determinadas para obter uma solução matemática adequada.

Para resolver chamas difusivas turbulentas são encontrados vários modelos na literatura [15, 43, 28, 29, 49]. Alguns modelos empregam a formulação baseada na fração de mistura para o fluxo junto com o modelo Flamelet para a química. A idéia básica do modelo Flamelet é considerar uma chama turbulenta como um conjunto de pequenas chamas laminares [32], localizadas na vizinhança de uma superfície estequiométrica [11].

Os elementos químicos iniciais contidos no combustível são conservados durante a combustão e podem ser calculados pela fração de mistura [25]. A fração de massa dos elementos não é alterada pelo processo reativo, ela é alterada pela mistura e tal é governada por difusão. A fração de mistura axial decresce em uma chama similarmente como a velocidade [1, 14]; tal velocidade decrescente depende da mistura, o que indica a evolução do fluxo turbulento.

A modelagem de chamas difusivas na maioria das vezes é feita através das equações de Navier-Stokes juntamente com equações difusivas-convectivas para as espécies químicas e temperatura. Este modelo forma um complexo sistema de EDP's acopladas e não lineares, para o qual, soluções analíticas são muito pouco conhecidas.

A simulação numérica continua sendo uma das principais ferramentas para analisar e, conseqüentemente, otimizar processos de combustão, uma vez que experimentos são muitas vezes de difícil realização. As principais ferramentas numéricas usadas, nos dias atuais, para a simulação de escoamentos turbulentos em combustão são: DNS (*Direct Numerical Simulation*), LES (*Large Eddy Simulation*) e RANS (*Reynolds Averaged Navier-Stokes equations*). LES é uma técnica numérica utilizada para resolver as equações diferenciais parciais que regem o fluxo de fluido turbulento. Foi formulada no final dos anos 1960 e se tornou popular nos últimos

anos. Enquanto o método RANS fornece uma “média” de resultados, LES é capaz de prever características de fluxo instantâneas e resolver estruturas de fluxo turbulento [13]. Isto é particularmente importante em simulações envolvendo reações químicas, tais como a queima de combustível em um motor. Na Simulação Numérica Direta (DNS), a fim de garantir que todas as estruturas importantes da turbulência sejam capturadas, o domínio em que a computação é realizado é geralmente pequeno [16].

1.1 Objetivo do trabalho

O objetivo deste trabalho consiste em simular numericamente uma chama difusiva de metano, através da solução das equações reativas de Navier-Stokes, que representam o escoamento de combustível e ar, além de uma equação para a fração de mistura, fração de massa e temperatura. A simulação computacional considera um plano tridimensional e os resultados obtidos numericamente são comparados com uma solução analítica desenvolvida para as equações do modelo Flamelet Lagrangeano, e com dados experimentais disponíveis com a finalidade de validar a mesma.

1.2 Descrição dos próximos capítulos

No capítulo 2 será apresentada uma descrição detalhada da formulação no processo de combustão, apresentando-se o desenvolvimento das equações de balanço para a quantidade de movimento, massa, espécies e energia, considerando uma reação química de um passo. Para a simulação do escoamento turbulento utiliza-se LES, juntamente com o modelo de Smagorinsky para a viscosidade turbulenta. O modelo Flamelet é utilizado para simplificar as equações da fração de massa e temperatura.

O capítulo 3 apresenta o desenvolvimento de soluções analíticas para as equações do modelo Flamelet, estas incluem a fração de massa do CH_4 , O_2 , CO_2 e H_2O , além da temperatura.

O capítulo 4 inicia com a discretização das equações governantes pelo método de Diferenças Finitas, e em seguida a obtenção da malha computacional e condições iniciais e de contorno apropriadas para este fenômeno de combustão.

No capítulo 5 os resultados são apresentados em gráficos com suas principais características comparadas com resultados analíticos e experimentais disponibilizados pela *Sandia National Laboratories* [4]. A chama Sandia D é utilizada para comparação.

No capítulo 6 apresentam-se as principais conclusões desta dissertação e propõe-se alguns trabalhos futuros.

2 FORMULAÇÃO

A estrutura e as propriedades de uma chama dependem do tipo de mistura entre o combustível e o oxidante. As chamas difusivas são descritas por um escalar conservativo, que é quimicamente independente (não reagente); esta variável é chamada de fração de mistura (Z) [31]. Z é um escalar conservativo que calcula o nível de mistura entre o oxigênio e o combustível que muda devido à difusão e à convecção.

Neste capítulo, apresenta-se o desenvolvimento das equações de balanço para a quantidade de movimento, massa, espécies e energia, considerando uma reação química de um passo e formulação a baixo número de Mach [13].

2.1 Variáveis de interesse

A fração molar é uma maneira de representar a concentração das inúmeras espécies químicas presentes na mistura. O número de moles da espécie k é denotado por n_k e a soma destes é o número de moles do sistema

$$n_s = \sum_{k=1}^n n_k. \quad (2.1)$$

Para cada componente k , a fração molar X_k é o número de moles n_k dividido pelo número de moles do sistema n_s , isto é,

$$X_k = \frac{n_k}{n_s}. \quad (2.2)$$

A massa m_k de todas as moléculas da espécie k está relacionada com o número de moles por

$$m_k = W_k n_k, \quad (2.3)$$

onde W_k é a massa molar da espécie k .

A massa total para todas as espécies na mistura é

$$m = \sum_{k=1}^n m_k. \quad (2.4)$$

A fração de massa da espécie k é representada pela razão de sua massa com a massa total do sistema por

$$Y_k = \frac{m_k}{m}. \quad (2.5)$$

Logo, obtemos a relação entre a fração molar e a fração de massa

$$Y_k = \frac{W_k}{W} X_k, \quad (2.6)$$

onde W é a massa molar média em número, dado por

$$W = \left[\sum_{k=1}^n \frac{Y_k}{W_k} \right]^{-1}. \quad (2.7)$$

Enquanto a massa das espécies muda devido as reações químicas, a massa dos elementos é conservada. Denotamos por m_j a massa de todos átomos do elemento j contido em todas moléculas do sistema. Se a_{kj} é o número de átomos do elemento j em uma molécula de espécie k e W_j é a massa molar desse átomo, a massa de todos átomos j no sistema é

$$m_j = \sum_{k=1}^n \frac{a_{kj} W_j}{W_k} m_k, \quad (2.8)$$

com a fração de massa do elemento j representada por

$$Z_j = \frac{m_j}{m} = \frac{W_j}{W} \sum_{k=1}^n a_{kj} X_k \quad j = 1, 2, \dots, n_e, \quad (2.9)$$

onde n_e é o número de elementos no sistema. Das definições acima segue que

$$\sum_{k=1}^n X_k = 1, \quad \sum_{k=1}^n Y_k = 1, \quad \sum_{j=1}^{n_e} Z_j = 1. \quad (2.10)$$

2.2 Estequiometria

Equações que descrevem reações químicas como $CO + \frac{1}{2}O_2 \rightarrow CO_2$ são baseadas no princípio de conservação dos elementos durante a reação [23]. Formalmente uma equação de reação pode ser escrita da forma

$$\sum_{k=1}^n \nu'_k M_k \rightarrow \sum_{k=1}^n \nu''_k M_k, \quad (2.11)$$

onde M_k representa o símbolo químico para a espécie k , ν'_k é o número de moles da espécie k que aparece como reagente e ν''_k é o número de moles da espécie k que aparece como produto. Espécies que não são reagentes tem $\nu'_k = 0$, e aquelas que não aparecem como produto tem $\nu''_k = 0$.

A equação (2.11) implica que se $\nu''_k > \nu'_k$, então são formados $\nu''_k - \nu'_k$ moles de M_k ; senão desaparecem $(\nu'_k - \nu''_k)$ moles de M_k .

Exemplo: Considere a reação $CO + \frac{1}{2}O_2 \rightarrow CO_2$, onde

$$M_1 = CO$$

$$M_2 = O_2$$

$$M_3 = CO_2$$

então,

$$\nu'_1 = 1 \quad \nu''_1 = 0$$

$$\nu'_2 = \frac{1}{2} \quad \nu''_2 = 0$$

$$\nu'_3 = 0 \quad \nu''_3 = 1$$

assim,

$$\nu''_3 - \nu'_3 = 1 \text{ mol de } CO_2 \text{ é formado, } \Delta n_3 = 1$$

$$\nu'_1 - \nu''_1 = 1 \text{ mol de } CO \text{ desaparece, } \Delta n_1 = -1$$

$$\nu'_2 - \nu''_2 = \frac{1}{2} \text{ moles de } O_2 \text{ desaparecem, } \Delta n_2 = -\frac{1}{2}$$

Tem-se a seguinte relação (a ser usada posteriormente):

$$\frac{\Delta n_1}{\nu''_1 - \nu'_1} = \frac{\Delta n_2}{\nu''_2 - \nu'_2} = \frac{\Delta n_3}{\nu''_3 - \nu'_3}.$$

Denominamos um novo coeficiente estequiométrico $\nu_k = \nu''_k - \nu'_k$.

A estequiometria descreve a produção molar e o consumo de cada espécie. A variação do número de moles da espécie k para a espécie 1 é

$$\frac{dn_k}{dn_1} = \frac{\nu_k}{\nu_1}, \quad (2.12)$$

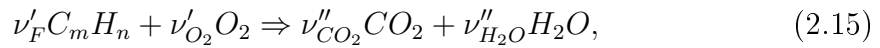
com a equação (2.3) a relação entre as massas parciais torna-se

$$\frac{dm_k}{dm_1} = \frac{\nu_k W_k}{\nu_1 W_1}. \quad (2.13)$$

Visto que a massa total do sistema é independente da reação química (embora o número de moles dependa da reação), a relação entre as frações de massa é

$$\frac{dY_k}{dY_1} = \frac{\nu_k W_k}{\nu_1 W_1}. \quad (2.14)$$

A mistura ar-combustível é chamada estequiométrica se a relação combustível - oxigênio é tal que ambos são completamente consumidos formando CO_2 e H_2O . Por exemplo, uma reação global que descreve a combustão de um hidrocarboneto $C_m H_n$ (subscrito F) é



e os coeficientes estequiométricos são

$$\nu'_F = 1, \quad \nu'_{O_2} = m + \frac{n}{4}, \quad \nu''_{CO_2} = m, \quad \nu''_{H_2O} = \frac{n}{2}, \quad (2.16)$$

onde ν'_F pode ser escolhido arbitrariamente como unitário. A mistura estequiométrica requer que a relação de números de moles de combustível e oxigênio na mistura não queimada seja igual a relação dos coeficientes estequiométricos

$$\left. \frac{n_{O_2,u}}{n_{F,u}} \right|_{st} = \frac{\nu'_{O_2}}{\nu'_F}, \quad (2.17)$$

ou em termos de fração de massa

$$\left. \frac{Y_{O_2,u}}{Y_{F,u}} \right|_{st} = \frac{\nu'_{O_2} W_{O_2}}{\nu'_F W_F} = \nu, \quad (2.18)$$

onde ν é chamado de razão de massa estequiométrica.

Integrando a equação (2.14), substituindo $k = O_2$ e $1 = F$ entre o estado inicial não queimado (subscrito u) e algum estado posterior, temos a seguinte relação

$$\int_{O_{2,u}}^{O_2} \frac{dY_{O_2}}{\nu'_{O_2} W_{O_2}} = \int_{F,u}^F \frac{dY_F}{\nu'_F W_F}, \quad (2.19)$$

logo,

$$\frac{Y_{O_2} - Y_{O_{2,u}}}{\nu'_{O_2} W_{O_2}} = \frac{Y_F - Y_{F,u}}{\nu'_F W_F}, \quad (2.20)$$

que pode ser escrita da forma

$$\nu Y_F - Y_{O_2} = \nu Y_{F,u} - Y_{O_{2,u}}. \quad (2.21)$$

2.3 Fração de mistura

Em um sistema, onde uma corrente de combustível (índice 1) com fluxo de massa \dot{m}_1 é misturado com a corrente do oxidante (índice 2) com fluxo de massa \dot{m}_2 , a fração de mistura representa a fração de massa da corrente de combustível na mistura

$$Z = \frac{\dot{m}_1}{\dot{m}_1 + \dot{m}_2}. \quad (2.22)$$

A fração de massa local $Y_{F,u}$ do combustível não queimado é uma fração do combustível original, logo

$$Y_{F,u} = Y_{F,i} Z, \quad (2.23)$$

onde $Y_{F,i}$ representa a fração de massa inicial do combustível; similarmente, temos que $(1 - Z)$ representa a fração de massa do oxigênio

$$Y_{O_{2,u}} = Y_{O_{2,i}}(1 - Z), \quad (2.24)$$

onde $Y_{O_{2,i}}$ corresponde a fração de massa inicial do oxigênio.

Introduzindo (2.23) e (2.24) em (2.21) obtemos a fração de mistura

$$Z = \frac{\nu Y_F - Y_{O_2} + Y_{O_{2,i}}}{\nu Y_{F,i} + Y_{O_{2,i}}}. \quad (2.25)$$

Na mistura estequiométrica, $Y_{O_2,u} = 0$ e $Y_{F,u} = 0$; logo pela relação (2.21) temos $Y_{O_2} = \nu Y_F$ onde obtemos da equação (2.25) a fração de mistura estequiométrica

$$Z_{st} = \left[1 + \frac{\nu Y_{F,i}}{Y_{O_2,i}} \right]^{-1}. \quad (2.26)$$

Se $Z < Z_{st}$, tem-se pouco combustível e a mistura é chamada de pobre. Então, a combustão termina com todo o combustível consumido, $Y_{F,b} = 0$ na queima gasosa (índice b). O restante da fração de massa do oxigênio na queima é calculado de (2.25). Temos então

$$Y_{O_2,b} = Y_{O_2,i} \left(1 - \frac{Z}{Z_{st}} \right) \quad Z < Z_{st}. \quad (2.27)$$

Similarmente, se $Z \geq Z_{st}$ tem-se uma mistura rica em combustão que termina com todo oxigênio consumido, $Y_{O_2,b} = 0$, conduzindo a

$$Y_{F,b} = Y_{F,i} \left(\frac{Z - Z_{st}}{1 - Z_{st}} \right) \quad Z \geq Z_{st}. \quad (2.28)$$

Para os hidrocarbonetos considerados, a fração de massa dos elementos resultante na queima da mistura são

$$Z_C = m \frac{W_C}{W_F} Y_{F,u} \quad (2.29)$$

$$Z_H = n \frac{W_H}{W_F} Y_{F,u} \quad (2.30)$$

$$Z_O = Y_{O_2,u}. \quad (2.31)$$

Como os elementos são conservados durante a combustão, para a queima gasosa estes tornam-se:

$$Z_C = m \frac{W_C}{W_F} Y_{F,b} + \frac{W_C}{W_{CO_2}} Y_{CO_2,b} \quad (2.32)$$

$$Z_H = n \frac{W_H}{W_F} Y_{F,b} + 2 \frac{W_H}{W_{H_2O,b}} Y_{H_2O,b} \quad (2.33)$$

$$Z_O = 2 \frac{W_O}{W_{O_2}} Y_{O_2,b} + 2 \frac{W_O}{W_{CO_2,b}} Y_{CO_2,b} + \frac{W_O}{W_{H_2O,b}} Y_{H_2O,b} \quad (2.34)$$

que, com $Y_{F,u} = Y_{F,i}Z$ e $Y_{F,b} = 0$ para $Z < Z_{st}$ e $Y_{F,b} = Y_{F,i} \left(\frac{Z-Z_{st}}{1-Z_{st}} \right)$ para $Z \geq Z_{st}$ produzem

$$Z < Z_{st} : \quad Y_{CO_2,b} = Y_{CO_2,st} \frac{Z}{Z_{st}} \quad (2.35)$$

$$Y_{H_2O,b} = Y_{H_2O,st} \frac{Z}{Z_{st}} \quad (2.36)$$

$$Z \geq Z_{st} : \quad Y_{CO_2,b} = Y_{CO_2,st} \frac{1-Z}{1-Z_{st}} \quad (2.37)$$

$$Y_{H_2O,b} = Y_{H_2O,st} \frac{1-Z}{1-Z_{st}} \quad (2.38)$$

onde

$$Y_{CO_2,st} = Y_{F,i} Z_{st} \frac{mW_{CO_2}}{W_F} \quad (2.39)$$

$$Y_{H_2O,st} = Y_{F,i} Z_{st} \frac{nW_{H_2O}}{2W_F}. \quad (2.40)$$

Em geral, para calcular a fração de massa de qualquer produto como CO , H_2O e outros usa-se a relação entre as frações de massa

$$\frac{dY_F}{\nu_F W_F} = - \frac{dY_k}{\nu_k W_k}, \quad (2.41)$$

onde $k = \text{produto}$. Integrando entre o estado inicial não queimado (índice u) e algum estado posterior resulta

$$\frac{Y_F - Y_{F,u}}{\nu_F W_F} = - \frac{Y_k - Y_{k,u}}{\nu_k W_k}, \quad (2.42)$$

onde $Y_{k,u} = 0$ devido ao fato que antes da queima não existe produto.

$$Y_k = - \frac{\nu_k W_k}{\nu_F W_F} (Y_F - Y_{F,u}). \quad (2.43)$$

Considerando $Y_{F,u} = Y_{F,i}Z$ temos que, se $Z < Z_{st}$, $Y_F = 0$ e assim,

$$Y_k = Y_{F,i} \frac{\nu_k W_k}{\nu_F W_F} Z, \quad (2.44)$$

se $Z \geq Z_{st}$, $Y_F = Y_{F,i} \left(\frac{Z-Z_{st}}{1-Z_{st}} \right)$ então

$$Y_k = Y_{F,i} Z_{st} \frac{\nu_k W_k}{\nu_F W_F} \left(\frac{1-Z}{1-Z_{st}} \right). \quad (2.45)$$

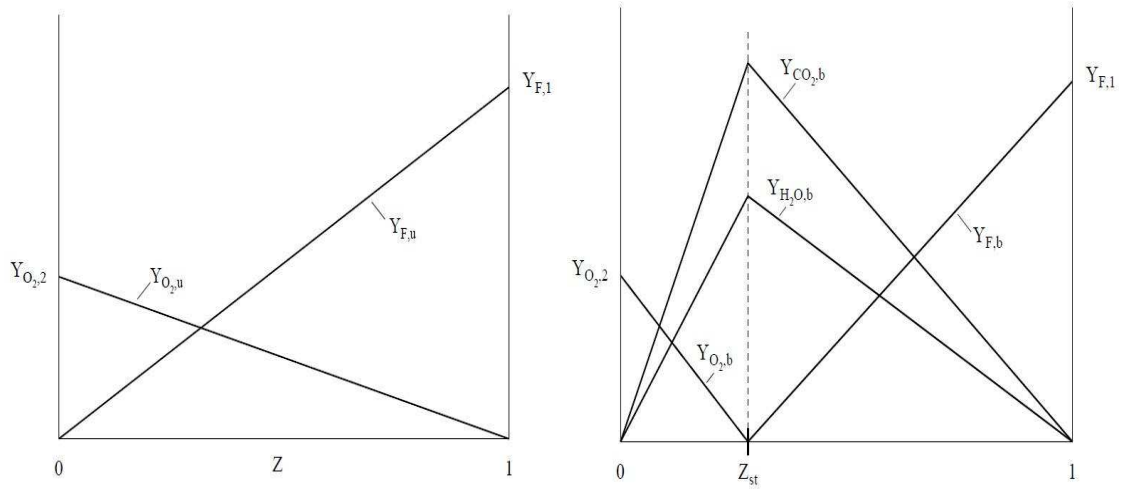


Figura 2.1: Perfil de Y_F e Y_{O_2} antes da queima (esquerda). Perfil de Y_F , Y_{O_2} , Y_{CO_2} e Y_{H_2O} depois da queima (direita) [30].

2.4 Conservação da energia durante a combustão

A primeira lei da termodinâmica descreve o balanço entre diferentes formas de energia e com isso define-se a energia interna [12]

$$de = dq + dw_R, \quad (2.46)$$

onde dq é a transferência de calor na parte circundante, dw_R é o trabalho realizado pelo atrito e de é a variação da energia interna.

A entalpia específica h está associada à energia interna específica e por

$$h = e + pV = e + \frac{RT}{W}, \quad (2.47)$$

onde $V = 1/\rho$ é o volume específico e p é a pressão.

Da definição de entalpia tem-se

$$de + pdV = dh - Vdp = dq + dw_R, \quad (2.48)$$

onde pdV é o trabalho devido à variação volumétrica.

Em um sistema de vários componentes químicos, a energia interna específica e a entalpia específica são as somas medidas com base na massa pela quan-

tidade específica de todas as espécies.

$$e = \sum_{k=1}^n Y_k e_k, \quad h = \sum_{k=1}^n Y_k h_k. \quad (2.49)$$

Para um gás ideal a entalpia específica parcial é relacionada com a energia interna específica pela relação

$$h_k = e_k + \frac{RT}{W_k}, \quad (2.50)$$

e ambos dependem somente da temperatura. A relação entre a temperatura e a entalpia específica é dada por

$$h_k = h_{k,ref} + \int_{T_{ref}}^T c_{pk} dT, \quad (2.51)$$

onde c_{pk} é o calor específico e $h_{k,ref}$ é a entalpia de referência na condição da temperatura de referência T_{ref} , que pode ser escolhida arbitrariamente; frequentemente $T_{ref} = 0K$ ou $T_{ref} = 298.16K$ são usados. A entalpia molar parcial é

$$H_k = W_k h_k \quad (2.52)$$

e a dependência da temperatura torna-se

$$H_k = H_{k,ref} + \int_{T_{ref}}^T C_{pk} dT, \quad (2.53)$$

onde

$$C_{pk} = W_k c_{pk}. \quad (2.54)$$

Num sistema de várias espécies químicas, o calor específico a pressão constante na mistura é

$$c_p = \sum_{k=1}^n Y_k c_{pk}. \quad (2.55)$$

As entalpias de referência dos produtos da combustão como do CO_2 e do H_2O são tipicamente negativas. A dependência da temperatura de C_{pk} e H_k pode ser calculada pelos polinômios da NASA [9]. Para uma mistura diluída (pobre), c_p depende somente da temperatura e não da composição da mistura [8].

2.5 Temperatura adiabática da chama

Vamos considerar a primeira regra para um sistema adiabático ($dq = 0$) na condição de pressão constante ($dp = 0$) e desconsiderar o trabalho realizado pelo atrito ($dw_R = 0$). A equação (2.48), com $dh = 0$, pode ser integrada do estado não queimado ao estado queimado, resultando

$$h_u = h_b, \quad (2.56)$$

ou

$$\sum_{k=1}^n Y_{k,u} h_{k,u} = \sum_{k=1}^n Y_{k,b} h_{k,b}, \quad (2.57)$$

com a dependência da temperatura e a entalpia específica (2.51); esta pode ser escrita como

$$\sum_{k=1}^n (Y_{k,u} - Y_{k,b}) h_{k,ref} = \int_{T_{ref}}^{T_b} c_{p,b} dT - \int_{T_{ref}}^{T_u} c_{p,u} dT, \quad (2.58)$$

onde as capacidades de calor específico são as da mistura, sendo calculadas em função da fração de massa antes e depois da queima do gás, respectivamente por

$$c_{p,u} = \sum_{k=1}^n Y_{k,u} c_{pk}(T), \quad c_{p,b} = \sum_{k=1}^n Y_{k,b} c_{pk}(T). \quad (2.59)$$

Para uma reação global de passo único, o termo esquerdo de (2.58) é calculado integrando (2.14), assim

$$(Y_{k,u} - Y_{k,b}) = (Y_{F,u} - Y_{F,b}) \frac{\nu_k W_k}{\nu_F W_F}, \quad (2.60)$$

tal que

$$\sum_{k=1}^n (Y_{k,u} - Y_{k,b}) h_{k,ref} = \frac{(Y_{F,u} - Y_{F,b})}{\nu_F W_F} \sum_{k=1}^n \nu_k W_k h_{k,ref}, \quad (2.61)$$

onde é conveniente a definição do calor da combustão como

$$Q = - \sum_{k=1}^n \nu_k W_k h_k = - \sum_{k=1}^n \nu_k H_k. \quad (2.62)$$

Esta quantidade varia pouco com a temperatura e é muitas vezes igual a

$$Q_{ref} = - \sum_{k=1}^n \nu_k H_{k,ref}. \quad (2.63)$$

Por simplicidade considere $T_u = T_{ref}$ e assuma $c_{p,b}$ aproximadamente constante. Para a combustão no ar, a contribuição do nitrogênio é dominante no cálculo de $c_{p,b}$. A aproximação do calor específico da queima gasosa na mistura estequiométrica é $c_p = 1.40 kJ/kgK$ [36]. Assumindo c_p constante e $Q = Q_{ref}$, a temperatura adiabática da chama para uma mistura ($Y_{F,b} = 0$) é calculada por (2.58) e (2.61) com $\nu_F = -\nu'_F$ e resulta em

$$T_b - T_u = \frac{Q_{ref} Y_{F,u}}{c_p \nu'_F W_F}. \quad (2.64)$$

Para uma mistura rica, a relação (2.60) deve ser substituída por

$$(Y_{k,u} - Y_{k,b}) = (Y_{O_2,u} - Y_{O_2,b}) \frac{\nu_k W_k}{\nu_{O_2} W_{O_2}}, \quad (2.65)$$

e similarmente para o consumo completo do oxigênio ($Y_{O_2,b} = 0$) obtém-se

$$T_b - T_u = \frac{Q_{ref} Y_{O_2,u}}{c_p \nu'_{O_2} W_{O_2}}. \quad (2.66)$$

As equações (2.64) e (2.66) podem ser expressas em termos da fração de mistura pela introdução de (2.23) e (2.24) e escrevendo a temperatura da mistura antes da queima por [31]

$$T_u(Z) = T_2 - Z(T_2 - T_1), \quad (2.67)$$

onde T_2 é a temperatura da corrente de oxigênio e T_1 a temperatura na corrente de combustível. A equação (2.67) descreve a mistura das duas correntes com c_p assumido como constante. As equações (2.64) e (2.66) resultam na forma

$$T_b(Z) = T_u(Z) + \frac{Q_{ref} Y_{F,1}}{c_p \nu'_F W_F} Z, \quad (2.68)$$

$$T_b(Z) = T_u(Z) + \frac{Q_{ref} Y_{O_2,2}}{c_p \nu'_{O_2} W_{O_2}} (1 - Z). \quad (2.69)$$

onde a equação (2.68) é definida para $Z < Z_{st}$, e a equação (2.69) para $Z \geq Z_{st}$.

2.6 Balanço de massa

Para a dedução da equação da conservação da massa total, consideram-se que as espécies M_k estão sendo produzidas ou consumidas em todos os pontos

do domínio. Além disso, considera-se um volume fixo V (com superfície S e normal exterior unitária $\vec{\eta}$). Assim, pela lei de conservação de uma propriedade: a taxa líquida da propriedade que cruza as fronteiras mais a taxa de acúmulo da propriedade no volume de controle é igual a taxa de geração da propriedade no volume de controle [22]; desta forma

$$\int_S \rho_k \vec{u}_k \cdot \vec{\eta} dS + \int_V \frac{\partial \rho_k}{\partial t} dV = \int_V \dot{w}_k dV, \quad (2.70)$$

onde \vec{u}_k é o campo velocidade da componente química M_k , $\rho_k \vec{u}_k$ é o fluxo de massa através da fronteira e \dot{w}_k é a taxa de reação. Aplicando o teorema de Gauss da divergência, obtém-se

$$\int_V \frac{\partial \rho_k}{\partial t} dV = - \int_V \nabla \cdot (\rho_k \vec{u}_k) dV + \int_V \dot{w}_k dV. \quad (2.71)$$

Considera-se um volume arbitrário, obtendo

$$\frac{\partial \rho_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_k \vec{u}_k) = \dot{w}_k. \quad (2.72)$$

Define-se a velocidade média por

$$\vec{v} = \frac{1}{\rho} \sum_{k=1}^N \rho_k \vec{u}_k. \quad (2.73)$$

Apesar da massa de cada espécie estar variando, a massa total permanece constante, então

$$\sum_{k=1}^N \dot{w}_k = 0. \quad (2.74)$$

Somando-se as N equações em (2.72), encontra-se

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v}) = 0, \quad (2.75)$$

que é denominada equação da conservação da massa. Pode-se escrevê-la também da seguinte forma

$$\frac{D\rho}{Dt} + \rho \nabla \cdot \vec{v} = 0, \quad (2.76)$$

onde D/Dt representa a derivada material. Note que a equação da conservação da massa para fluxos reativos é a mesma para fluxos não-reativos, uma vez que a combustão não cria nem destrói massa.

2.7 Balanço da quantidade de movimento

O princípio da conservação da quantidade de movimento requer que a soma das forças de volume e das forças de superfície seja igual à variação da quantidade de movimento no volume V .

$$\frac{D}{Dt} \int_V \rho \vec{v} dV = \int_V \rho \sum_k Y_k \vec{f}_k dV + \int_S \bar{\bar{\phi}} \cdot \vec{\eta} dS, \quad (2.77)$$

onde f_k é a força externa atuando sobre a espécie k e $\bar{\bar{\phi}}$ é o tensor tensão que descrevemos a seguir. Do teorema de divergência de Gauss, obtém-se

$$\int_V \rho \frac{Dv_i}{Dt} dV = \int_V \left[\rho \sum_k Y_k f_{ki} + \frac{\partial \phi_{ij}}{\partial x_j} \right] dV. \quad (2.78)$$

Como V é arbitrário, tem-se

$$\rho \frac{Dv_i}{Dt} = \rho \sum_k Y_k f_{ki} + \frac{\partial \phi_{ij}}{\partial x_j}. \quad (2.79)$$

Supondo um fluido newtoniano, temos a seguinte equação constitutiva

$$\phi_{ij} = \sigma_{ij} - p\delta_{ij}, \quad (2.80)$$

onde p é a pressão estática e o tensor viscoso pela Lei de Newton é dado por

$$\sigma_{ij} = \mu \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \mu \delta_{ij} \left(\frac{\partial v_k}{\partial x_k} \right), \quad (2.81)$$

sendo μ a viscosidade dinâmica e δ_{ij} o delta de Kronecker [26]. Substituindo a equação constitutiva em (2.79), obtém-se

$$\rho \frac{Dv_i}{Dt} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} + \rho \sum_k Y_k f_{ki}. \quad (2.82)$$

que é a equação da quantidade de movimento. Simplificando-a para o caso deste trabalho, desconsidera-se a presença de forças externas, e considera-se o caso tridimensional onde $i, j = 1, 2, 3$, tem-se

$$\frac{\partial(\rho v_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho v_i v_j)}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j}. \quad (2.83)$$

2.8 Balanço das espécies químicas

O balanço para as frações de massa é obtido da equação da conservação da massa nas formas (2.72) e (2.75). Primeiramente, como $Y_k = \rho_k/\rho$ observa-se que

$$(\nabla Y_k)_j = \frac{\partial Y_k}{\partial x_j} = \frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho_k}{\partial x_j} - \frac{\rho_k}{\rho^2} \frac{\partial \rho}{\partial x_j}, \quad (2.84)$$

o que fornece

$$\nabla \rho = -\frac{\rho^2}{\rho_k} \nabla Y_k + \frac{\rho}{\rho_k} \nabla \rho_k. \quad (2.85)$$

Por outro lado, usando (2.72) e (2.75), tem-se

$$\begin{aligned} \rho \frac{\partial Y_k}{\partial t} &= \frac{\partial \rho_k}{\partial t} - \frac{\rho_k}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial t} \\ &= (\dot{w}_k - \nabla \cdot (\rho_k \vec{u}_k)) + Y_k \nabla \cdot (\rho \vec{v}) \\ &= \dot{w}_k - \vec{u}_k \cdot \nabla \rho_k - \rho_k \nabla \cdot \vec{u}_k + Y_k \vec{v} \cdot \nabla \rho + Y_k \rho \nabla \cdot \vec{v}, \end{aligned} \quad (2.86)$$

então, de (2.85),

$$\begin{aligned} \rho \frac{\partial Y_k}{\partial t} &= \dot{w}_k + (\vec{v} - \vec{u}_k) \cdot \nabla \rho_k - \rho_k \nabla \cdot \vec{u}_k - \vec{v} \rho \cdot \nabla Y_k + \rho_k \nabla \cdot \vec{v} \\ &= \dot{w}_k - \rho_k \nabla \cdot (\vec{u}_k - \vec{v}) + (\vec{v} - \vec{u}_k) \cdot \nabla \rho_k - \vec{v} \rho \cdot \nabla Y_k \\ &= -\rho \vec{v} \cdot \nabla Y_k + \nabla \cdot (\rho_k (\vec{v} - \vec{u}_k)) + \dot{w}_k, \end{aligned} \quad (2.87)$$

ou equivalentemente

$$\rho \left(\frac{\partial Y_k}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla Y_k \right) + \nabla \cdot (\rho (\vec{u}_k - \vec{v}) Y_k) = \dot{w}_k. \quad (2.88)$$

Definindo a velocidade de difusão da espécie k por:

$$\vec{V}_k = (\vec{u}_k - \vec{v}), \quad (2.89)$$

obtemos

$$\rho \left(\frac{\partial Y_k}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla Y_k \right) + \nabla \cdot (\rho \vec{V}_k Y_k) = \dot{w}_k. \quad (2.90)$$

Neste trabalho, considerou-se a aproximação devida a Hirschfelder e Curtiss [36], a qual é uma aproximação de primeira ordem dada por

$$\vec{V}_k X_k = -D_k \nabla X_k, \quad (2.91)$$

onde D_k é o coeficiente de difusão da espécie k .

Usando a relação

$$Y_k = \frac{W_k}{W} X_k, \quad (2.92)$$

e substituindo (2.91) em (2.90) obtém-se

$$\rho \left(\frac{\partial Y_k}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla Y_k \right) = \nabla \cdot (\rho D_k \nabla Y_k) + \dot{w}_k, \quad (2.93)$$

que é a equação do balanço das espécies, ou na forma indicial como

$$\rho \frac{\partial Y_k}{\partial t} + \rho v_j \frac{\partial Y_k}{\partial x_j} = \rho D_k \frac{\partial^2 Y_k}{\partial x_j \partial x_j} + \dot{w}_k. \quad (2.94)$$

sendo $j = 1, 2, 3$.

Para o problema adotou-se a taxa de reação da espécie k como

$$\dot{w}_k = \pm \nu_k W_k \dot{A} \frac{Y_F}{W_F} \frac{Y_O}{W_O} \rho^2 e^{-E/RT}, \quad (2.95)$$

onde o sinal negativo é para o combustível (F) e o oxidante (O), enquanto que positivo é para o produto (P) [31]; \dot{A} é um fator de frequência, E é a energia de ativação total e R é a constante dos gases. A equação (2.95) faz uso da exponencial de Arrhenius, que permite calcular a variação da velocidade de uma reação química com a temperatura. O termo $Y_F Y_O$ determina o acoplamento entre equações da fração de massa do combustível e do oxidante.

Para a fração de mistura Z , a equação não tem termo de reação, uma vez que Z representa os elementos químicos originalmente contidos no combustível e estes são conservados durante a combustão, sendo a equação da fração de mistura da forma

$$\rho \frac{\partial Z}{\partial t} + \rho v_j \frac{\partial Z}{\partial x_j} = \rho D_k \frac{\partial^2 Z}{\partial x_j \partial x_j}. \quad (2.96)$$

2.9 Balanço de energia na formulação da temperatura

A equação da energia pode ser expressa em muitas formas; neste trabalho objetiva-se obter o balanço de energia na formulação da temperatura T (para

número de Mach baixo). Portanto, da primeira lei da Termodinâmica tem-se que o aumento da energia total (energia cinética + energias internas) em um volume material é a soma do calor transferido e o trabalho realizado no volume. Assim, tem-se de [22], que

$$\frac{D}{Dt} \int_V \rho e_t dV = \int_V \rho \sum_{k=1}^N Y_k f_{ki} (v_i + V_{ki}) dV + \int_V \frac{\partial \phi_{ij} v_i}{\partial x_j} dV - \int_V \frac{\partial q_i}{\partial x_i} dV. \quad (2.97)$$

O teorema do transporte de Reynolds permite encontrar

$$\int_V \rho \frac{De_t}{Dt} dV = \int_V \rho \sum_{k=1}^N Y_k f_{ki} (v_i + V_{ki}) dV + \int_V \frac{\partial \phi_{ij} v_i}{\partial x_j} dV - \int_V \frac{\partial q_i}{\partial x_i} dV. \quad (2.98)$$

Como o volume V é arbitrário, obtemos a equação do balanço da energia total

$$\rho \frac{De_t}{Dt} = -\frac{\partial q_i}{\partial x_i} + \frac{\partial \phi_{ij} v_i}{\partial x_j} + \rho \sum_{k=1}^N Y_k f_{ki} (v_i + V_{ki}), \quad (2.99)$$

onde o fluxo de energia q_i é dado por [36]:

$$q_i = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} + \rho \sum_{k=1}^N h_k Y_k V_{ki}. \quad (2.100)$$

Esta expressão inclui um termo de difusão de calor, descrito pela lei de Fourier ($\lambda \partial T / \partial x_i$), e um segundo termo, associado com a difusão das espécies com diferentes entalpias; onde λ é a condutividade térmica.

Usando a relação entre a energia e a entalpia, $h_t = e_t + p/\rho$ e a equação da continuidade obtém-se

$$\begin{aligned} \rho \frac{De_t}{Dt} &= \rho \frac{Dh_t}{Dt} - \rho \frac{D}{Dt} \left(\frac{p}{\rho} \right) \\ &= \rho \frac{Dh_t}{Dt} - \frac{Dp}{Dt} + \frac{p}{\rho} \frac{D\rho}{Dt}, & \frac{D\rho}{Dt} &= -\rho \frac{\partial v_i}{\partial x_i} \\ &= \rho \frac{Dh_t}{Dt} - \frac{Dp}{Dt} - p \frac{\partial v_i}{\partial x_i}. \end{aligned} \quad (2.101)$$

Substituindo (2.101) na equação (2.99), obtém-se o balanço da energia na formulação da entalpia total:

$$\begin{aligned}
\rho \frac{Dh_t}{Dt} &= \rho \frac{De_t}{Dt} + \frac{Dp}{Dt} + p \frac{\partial v_i}{\partial x_i} \\
&= -\frac{\partial q_i}{\partial x_i} + \frac{\partial \phi_{ij} v_i}{\partial x_j} + \rho \sum_{k=1}^N Y_k f_{ki} (v_i + V_{ki}) + \frac{Dp}{Dt} + p \frac{\partial v_i}{\partial x_i} \\
&= -\frac{\partial q_i}{\partial x_i} + \frac{\partial \phi_{ij} v_i}{\partial x_j} + \rho \sum_{k=1}^N Y_k f_{ki} (v_i + V_{ki}) + \frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\partial p v_i}{\partial x_i} \\
&= \frac{\partial p}{\partial t} - \frac{\partial q_i}{\partial x_i} + \frac{\partial \sigma_{ij} v_i}{\partial x_j} + \rho \sum_{k=1}^N Y_k f_{ki} (v_i + V_{ki}). \tag{2.102}
\end{aligned}$$

Agora, multiplicando a equação da quantidade de movimento

$$\frac{\partial \rho v_j}{\partial t} + \frac{\partial \rho v_i v_j}{\partial x_i} = \frac{\partial \phi_{ij}}{\partial x_i} + \rho \sum_{k=1}^N Y_k f_{kj}, \tag{2.103}$$

por v_j , tem-se

$$v_j \frac{\partial \rho v_j}{\partial t} + v_j \frac{\partial \rho v_i v_j}{\partial x_i} = v_j \frac{\partial \phi_{ij}}{\partial x_i} + \rho v_j \sum_{k=1}^N Y_k f_{kj}, \tag{2.104}$$

e observando que

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{2} \rho v_j v_j \right) + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{1}{2} \rho v_i v_j v_j \right) = v_j \frac{\partial \rho v_j}{\partial t} + v_j \frac{\partial \rho v_i v_j}{\partial x_i}, \tag{2.105}$$

obtém-se a equação do balanço para energia cinética,

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{2} \rho v_j v_j \right) + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{1}{2} \rho v_i v_j v_j \right) = v_j \frac{\partial \phi_{ij}}{\partial x_i} + \rho v_j \sum_{k=1}^N Y_k f_{kj}. \tag{2.106}$$

Subtraindo esta equação da (2.99), obtém-se o balanço para a energia interna ($e_t = e + v_i v_j / 2$),

$$\rho \frac{De}{Dt} = -\frac{\partial q_i}{\partial x_i} + \frac{\partial \phi_{ij} v_i}{\partial x_j} + \rho \sum_{k=1}^N Y_k f_{ki} (v_i - V_{ki}) - v_j \frac{\partial \phi_{ij}}{\partial x_i} - \rho v_j \sum_{k=1}^N Y_k f_{kj}, \tag{2.107}$$

o que fornece

$$\rho \frac{De}{Dt} = -\frac{\partial q_i}{\partial x_i} + \phi_{ij} \frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \rho \sum_{k=1}^N Y_k f_{ki} V_{ki}. \tag{2.108}$$

Usando o fato de que $e = h - p/\rho$, tem-se

$$\rho \frac{De}{Dt} = \rho \frac{Dh}{Dt} - \frac{Dp}{Dt} - p \frac{\partial v_i}{\partial x_i}, \quad (2.109)$$

donde

$$\begin{aligned} \rho \frac{Dh}{Dt} &= \frac{Dp}{Dt} + p \frac{\partial v_i}{\partial x_i} - \frac{\partial q_i}{\partial x_i} + \phi_{ij} \frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \rho \sum_{k=1}^N Y_k f_{ki} V_{ki} \\ &= \frac{Dp}{Dt} - \frac{\partial q_i}{\partial x_i} + \sigma_{ij} \frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \rho \sum_{k=1}^N Y_k f_{ki} V_{ki}. \end{aligned} \quad (2.110)$$

Por definição,

$$h_s = h - \sum_{k=1}^N \Delta h_{fk}^0 Y_k, \quad (2.111)$$

onde Δh_{fk}^0 é a entalpia da formação da espécie k na temperatura de referência. Daí,

$$\begin{aligned} \rho \frac{Dh_s}{Dt} &= \dot{w}_T + \frac{Dp}{Dt} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) - \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho \sum_{k=1}^N Y_k f_{ki} V_{ki} \right) + \\ &+ \sigma_{ij} \frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \rho \sum_{k=1}^N Y_k f_{ki} V_{ki}, \end{aligned} \quad (2.112)$$

onde

$$\dot{w}_T = - \sum_{k=1}^N \Delta h_{fk}^0 \dot{w}_k, \quad (2.113)$$

que é devida à liberação de calor pela reação.

De [36] temos

$$h_s = \sum_{k=1}^N h_{sk} Y_k, \quad (2.114)$$

onde h_{sk} é a entalpia sensível da espécie k . Derivando h_s tem-se

$$\rho \frac{Dh_s}{Dt} = \sum_{k=1}^N h_{sk} \frac{DY_k}{Dt} + \rho C_p \frac{DT}{Dt}, \quad (2.115)$$

e substituindo em (2.112), obtém-se

$$\begin{aligned} \rho C_p \frac{DT}{Dt} &= \dot{w}_T + \frac{Dp}{Dt} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) + \sigma_{ij} \frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \rho \sum_{k=1}^N Y_k f_{ki} V_{ki} \\ &- \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho \sum_{k=1}^N h_{sk} Y_k V_{ki} \right) - \sum_{k=1}^N h_{sk} \rho \frac{DY_k}{Dt}, \end{aligned} \quad (2.116)$$

o que fornece

$$\begin{aligned} \rho c_p \frac{DT}{Dt} &= \dot{w}'_T + \frac{Dp}{Dt} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) - \left(\rho \sum_{k=1}^N C_{pk} Y_k V_{ki} \right) \frac{\partial T}{\partial x_i} \\ &\quad + \sigma_{ij} \frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \rho \sum_{k=1}^N Y_k f_{ki} V_{ki}, \end{aligned} \quad (2.117)$$

onde

$$\dot{w}'_T = - \sum_{k=1}^N h_k \dot{w}_k = - \sum_{k=1}^N h_{sk} \dot{w}_k - \sum_{k=1}^N \Delta h_{fk}^0 \dot{w}_k. \quad (2.118)$$

Ambos os termos \dot{w}'_T e \dot{w}_k são devido à liberação de calor. Eles diferem por uma pequena quantidade devida à contribuição da entalpia sensível h_{sk} . Eles são iguais quando as capacidades de calor C_{pk} são supostas iguais, o que é frequentemente adotado na combustão a baixo Mach e pressão aproximadamente constante.

A radiação é negligenciada nesta formulação, pois ela é mais importante quando tem-se grandes chamas, como em fornalhas, fogos em florestas ou prédios [24].

Assim, para o caso compressível, supondo pressão constante, capacidades de calor iguais para todas as espécies, desconsiderando forças externas e efeitos de radiação, a equação do balanço da energia para a temperatura torna-se

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} + \rho c_p v_j \frac{\partial T}{\partial x_j} = \lambda \frac{\partial^2 T}{\partial x_j \partial x_j} + \dot{w}'_T, \quad (2.119)$$

onde $\lambda = \rho c_p D_k Le_k = \rho c_p D_k$, pois trabalhamos com o número de Lewis de todas as espécie como unitário ($Le_k = 1$) [33], que é uma boa aproximação para chamas de hidrocarbonetos.

Por fim, as equações que governam o fenômeno considerado neste trabalho, ou seja, a combustão de uma chama difusiva de metano são respectivamente as equações para a quantidade de movimento, fração de mistura, fração de massa das espécies e temperatura, dadas a seguir

$$\rho \frac{\partial (v_i)}{\partial t} + \rho v_i \frac{\partial (v_j)}{\partial x_j} = - \frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j}, \quad (2.120)$$

$$\rho \frac{\partial Z}{\partial t} + \rho v_j \frac{\partial Z}{\partial x_j} = \rho D_k \frac{\partial^2 Z}{\partial x_j \partial x_j}, \quad (2.121)$$

$$\rho \frac{\partial Y_k}{\partial t} + \rho v_j \frac{\partial Y_k}{\partial x_j} = \rho D_k \frac{\partial^2 Y_k}{\partial x_j \partial x_j} + \dot{w}_k, \quad (2.122)$$

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} + \rho c_p v_j \frac{\partial T}{\partial x_j} = \lambda \frac{\partial^2 T}{\partial x_j \partial x_j} + \dot{w}'_T. \quad (2.123)$$

Todas estas equações são determinadas para o domínio tridimensional, ou seja, $i, j = 1, 2, 3$.

2.10 Simulação em grandes escalas

A turbulência é um processo tridimensional complexo que é caracterizado por uma distribuição contínua de escalas de flutuação. As maiores escalas turbulentas são caracterizadas, em particular, por forças de inércia no fluido significativamente maiores do que as forças devido à viscosidade.

Em princípio, as equações de Navier-Stokes descrevem ambos os regimes de escoamento laminar e turbulento sem a necessidade de informação adicional. Porém, os escoamentos turbulentos a números de Reynolds elevados abrangem uma ampla faixa de escalas de comprimento e de tempo. As menores escalas de comprimento habituais são muito menores do que as malhas computacionais que podem ser usadas na prática em uma análise numérica. Assim, a Simulação Numérica Direta (DNS) de escoamentos com altos números de Reynolds requer potência computacional de muitas ordens de grandeza maior que as disponíveis. Para que os efeitos de turbulência sejam preditos sem recorrer a uma malha proibitivamente fina, os modelos de turbulência foram desenvolvidos.

A ferramenta numérica utilizada neste trabalho para a simulação de escoamentos turbulentos é LES. A Simulação em Grandes Escalas (LES) consiste em calcular as grandes estruturas do fluxo, enquanto que as menores são modeladas em função das grandes. Estruturas maiores de fluxos turbulentos, em geral, dependem da geometria do sistema, ao contrário das menores escalas, que possuem caracterís-

ticas mais universais [48]. Assim, modelos de turbulência são mais eficientes quando descrevem também as menores escalas.

As equações do balanço são escritas para o campo de fluxo médio (flutuações locais e estruturas turbulentas são integradas em quantidades médias). Cada quantidade f é composta em uma média \bar{f} e um desvio em relação à média denotado por f' .

Se as possíveis realizações de f variam no domínio \mathcal{D} , a média de f é dada por

$$\bar{f}(\vec{x}, t) = \int_{\mathcal{D}} f P(f; \vec{x}, t) df \quad (2.124)$$

sendo f uma variável que depende da posição \vec{x} e do tempo t ; P é a função densidade de probabilidade, também chamada de *pdf* [31].

Para fluxos com grandes variações na massa específica, como ocorre na combustão, é conveniente introduzir uma média em relação à massa específica \tilde{f} , chamada média Favre.

Para filtrar as equações de balanço usadas neste trabalho, vamos utilizar as médias Favre ($\tilde{\cdot}$) e Reynolds ($\overline{\cdot}$), considerando as seguintes propriedades:

$$f = \bar{f} + f' \quad (2.125)$$

$$f = \tilde{f} + f'' \quad (2.126)$$

$$\overline{\rho f} = \bar{\rho} \tilde{f} \quad (2.127)$$

$$\overline{\rho f f} = \bar{\rho} \tilde{f} \tilde{f} \quad (2.128)$$

Aplicando a média nas equações e usando as propriedades anteriores tem-se para a:

- quantidade de movimento

$$\frac{\partial(\overline{\rho v_i})}{\partial t} + \frac{\partial(\overline{\rho v_i v_j})}{\partial x_j} = -\frac{\partial \overline{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial \overline{\sigma_{ij}}}{\partial x_j} \quad (2.129)$$

$$\frac{\partial(\overline{\rho \tilde{v}_i})}{\partial t} + \frac{\partial(\overline{\rho \tilde{v}_i v_j})}{\partial x_j} - \frac{\partial(\overline{\rho \tilde{v}_i \tilde{v}_j})}{\partial x_j} + \frac{\partial(\overline{\rho \tilde{v}_i \tilde{v}_j})}{\partial x_j} = -\frac{\partial \overline{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial \overline{\sigma_{ij}}}{\partial x_j} \quad (2.130)$$

$$\frac{\partial(\overline{\rho \tilde{v}_i})}{\partial t} + \frac{\partial(\overline{\rho \tilde{v}_i \tilde{v}_j})}{\partial x_j} = -\frac{\partial \overline{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial \overline{\sigma_{ij}}}{\partial x_j} - \frac{\partial}{\partial x_j} [\overline{\rho(\tilde{v}_i \tilde{v}_j - \tilde{v}_i \tilde{v}_j)}] \quad (2.131)$$

- fração de mistura

$$\frac{\partial(\overline{\rho Z})}{\partial t} + \frac{\partial(\overline{\rho v_j Z})}{\partial x_j} = \frac{\partial^2(\overline{D_k \rho Z})}{\partial x_j \partial x_j} \quad (2.132)$$

$$\frac{\partial(\overline{\rho \tilde{Z}})}{\partial t} + \frac{\partial(\overline{\rho \tilde{v}_j \tilde{Z}})}{\partial x_j} - \frac{\partial(\overline{\rho \tilde{v}_j \tilde{Z}})}{\partial x_j} + \frac{\partial(\overline{\rho \tilde{v}_j \tilde{Z}})}{\partial x_j} = \frac{\partial^2(\overline{D_k \rho \tilde{Z}})}{\partial x_j \partial x_j} \quad (2.133)$$

$$\frac{\partial(\overline{\rho \tilde{Z}})}{\partial t} + \frac{\partial(\overline{\rho \tilde{v}_j \tilde{Z}})}{\partial x_j} = \frac{\partial^2(\overline{D_k \rho \tilde{Z}})}{\partial x_j \partial x_j} - \frac{\partial}{\partial x_j} [\overline{\rho(\tilde{v}_j \tilde{Z} - \tilde{v}_j \tilde{Z})}] \quad (2.134)$$

- fração de massa

$$\frac{\partial(\overline{\rho Y_k})}{\partial t} + \frac{\partial(\overline{\rho v_j Y_k})}{\partial x_j} = \frac{\partial^2(\overline{D_k \rho Y_k})}{\partial x_j \partial x_j} + \overline{w}_k \quad (2.135)$$

$$\frac{\partial(\overline{\rho \tilde{Y}_k})}{\partial t} + \frac{\partial(\overline{\rho \tilde{v}_j \tilde{Y}_k})}{\partial x_j} - \frac{\partial(\overline{\rho \tilde{v}_j \tilde{Y}_k})}{\partial x_j} + \frac{\partial(\overline{\rho \tilde{v}_j \tilde{Y}_k})}{\partial x_j} = \frac{\partial^2(\overline{D_k \rho \tilde{Y}_k})}{\partial x_j \partial x_j} + \overline{w}_k \quad (2.136)$$

$$\frac{\partial(\overline{\rho \tilde{Y}_k})}{\partial t} + \frac{\partial(\overline{\rho \tilde{v}_j \tilde{Y}_k})}{\partial x_j} = \frac{\partial^2(\overline{D_k \rho \tilde{Y}_k})}{\partial x_j \partial x_j} - \frac{\partial}{\partial x_j} [\overline{\rho(\tilde{v}_j \tilde{Y}_k - \tilde{v}_j \tilde{Y}_k)}] + \overline{w}_k \quad (2.137)$$

- temperatura

$$\frac{\partial(\overline{\rho T})}{\partial t} + \frac{\partial(\overline{\rho v_j T})}{\partial x_j} = \frac{\partial^2(\overline{\lambda/c_p T})}{\partial x_j \partial x_j} + \frac{1}{c_p} \overline{w}'_T \quad (2.138)$$

$$\frac{\partial(\overline{\rho \tilde{T}})}{\partial t} + \frac{\partial(\overline{\rho \tilde{v}_j \tilde{T}})}{\partial x_j} - \frac{\partial(\overline{\rho \tilde{v}_j \tilde{T}})}{\partial x_j} + \frac{\partial(\overline{\rho \tilde{v}_j \tilde{T}})}{\partial x_j} = \frac{\partial^2(\overline{\lambda/c_p \tilde{T}})}{\partial x_j \partial x_j} + \frac{1}{c_p} \overline{w}'_T \quad (2.139)$$

$$\frac{\partial(\overline{\rho \tilde{T}})}{\partial t} + \frac{\partial(\overline{\rho \tilde{v}_j \tilde{T}})}{\partial x_j} = \frac{\partial^2(\overline{\lambda/c_p \tilde{T}})}{\partial x_j \partial x_j} - \frac{\partial}{\partial x_j} [\overline{\rho(\tilde{v}_j \tilde{T} - \tilde{v}_j \tilde{T})}] + \frac{1}{c_p} \overline{w}'_T \quad (2.140)$$

A modelagem da combustão turbulenta propõe um fechamento para as quantidades indefinidas que aparecem na mediação das equações do balanço; estes

termos podem ser convenientemente modelados como em [35] e dados abaixo:

$$\bar{\rho}(\widetilde{v_i v_j} - \widetilde{v_i} \widetilde{v_j}) = -\sigma_{ij}^{sgs} \quad (2.141)$$

$$\bar{\rho}(\widetilde{v_j Z} - \widetilde{v_j} \widetilde{Z}) = -\bar{\rho} \frac{\nu_t}{Sc_t} \frac{\partial \widetilde{Z}}{\partial x_j} \quad (2.142)$$

$$\bar{\rho}(\widetilde{v_j Y_k} - \widetilde{v_j} \widetilde{Y_k}) = -\bar{\rho} \frac{\nu_t}{Sc_t} \frac{\partial \widetilde{Y_k}}{\partial x_j} \quad (2.143)$$

$$\bar{\rho}(\widetilde{v_j T} - \widetilde{v_j} \widetilde{T}) = -\bar{\rho} \frac{\nu_t}{Pr_t} \frac{\partial \widetilde{T}}{\partial x_j} \quad (2.144)$$

onde ν_t é a viscosidade turbulenta, Sc_t o número de Schmidt turbulento, e Pr_t o número de Prandtl turbulento.

Com a ajuda da hipótese de Boussinesq [6], o tensor de Reynolds $\bar{\rho}(\widetilde{v_i v_j} - \widetilde{v_i} \widetilde{v_j})$ é modelado por

$$\sigma_{ij}^{sgs} = 2\nu_t \left(\widetilde{S}_{ij} - \frac{1}{3} \widetilde{S}_{kk} \delta_{ij} \right), \quad (2.145)$$

onde

$$\widetilde{S}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \widetilde{v}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \widetilde{v}_j}{\partial x_i} \right). \quad (2.146)$$

Entre algumas alternativas, o modelo de Smagorinsky é escolhido para a modelagem da viscosidade turbulenta. Este modelo é um dos mais antigos e popular devido à sua formulação simples [17, 39], dada por

$$\nu_t = (C_s \Delta)^2 |\widetilde{S}_{ij}|, \quad (2.147)$$

sendo $|\widetilde{S}_{ij}| = (2\widetilde{S}_{ij}\widetilde{S}_{ij})^{1/2}$, Δ é o tamanho do filtro e C_s é a constante de Smagorinsky para o qual assumimos o valor 0.2.

Para Mach baixo, as variações espaciais de pressão são pequenas comparadas com a própria pressão e na relação de estado $p = \rho T$, que relaciona a temperatura e a massa específica mutuamente, pode-se assumir p espacialmente constante e, sem perda de generalidade, tomamos p unitário [5]. Assim, uma relação para massa específica com um relaxamento é expressa por

$$\bar{\rho} = \frac{1}{\left[\frac{\gamma}{1-\gamma} \widetilde{T} + 1 \right]}, \quad (2.148)$$

onde o parâmetro $\gamma \simeq 0.1$ é introduzido para fazer um relaxamento da variação de massa específica, afim de diminuir a tendência à instabilidade numérica [13].

A pressão dinâmica é obtida resolvendo a seguinte equação

$$\nabla^2 \bar{p} = \Delta t \left(\frac{\partial \bar{p}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{v}) \right), \quad (2.149)$$

e assim corrige-se a velocidade com os gradientes de pressão; a massa tende a se conservar quando $\nabla^2 \bar{p}$ vai para zero [35]. Note que a pressão dinâmica é muito pequena, menos que 0.01% da pressão total, e os gradientes de pressão são menores ainda, porém eles são responsáveis pelos efeitos locais.

Como a viscosidade turbulenta é geralmente muito maior que a viscosidade dinâmica, neste trabalho negligenciaremos a viscosidade dinâmica, e ainda, sabendo que

$$D_t = \frac{\nu_t}{Sc_t}, \quad \bar{\rho} D_t = \bar{\rho} \frac{\nu_t}{Pr_t}, \quad (2.150)$$

onde D_t é a difusividade turbulenta, as equações do balanço tornam-se

$$\frac{\partial(\bar{\rho} \tilde{v}_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho} \tilde{v}_i \tilde{v}_j)}{\partial x_j} = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial \sigma_{ij}^{sgs}}{\partial x_j} \quad (2.151)$$

$$\frac{\partial(\bar{\rho} \tilde{Z})}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho} \tilde{v}_j \tilde{Z})}{\partial x_j} = \frac{\partial^2(\bar{\rho} D_t \tilde{Z})}{\partial x_j \partial x_j} \quad (2.152)$$

$$\frac{\partial(\bar{\rho} \tilde{Y}_k)}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho} \tilde{v}_j \tilde{Y}_k)}{\partial x_j} = \frac{\partial^2(\bar{\rho} D_t \tilde{Y}_k)}{\partial x_j \partial x_j} + \bar{w}_k \quad (2.153)$$

$$\frac{\partial(\bar{\rho} \tilde{T})}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho} \tilde{v}_j \tilde{T})}{\partial x_j} = \frac{\partial^2(\bar{\rho} D_t \tilde{T})}{\partial x_j \partial x_j} + \frac{1}{c_p} \bar{w}'_T \quad (2.154)$$

Numericamente, as equações governantes são resolvidas na ordem dada acima.

2.11 Estrutura Flamelet de uma chama difusiva

Assumimos que a fração de mistura \tilde{Z} é uma função contínua do espaço e do tempo. Então, a superfície da mistura estequiométrica pode ser determinada de $\tilde{Z}(x_\alpha, t) = \tilde{Z}_{st}$ [30]. A combustão ocorre em uma camada fina desta superfície se o gradiente de fração de mistura local for elevado.

Introduzimos um sistema de coordenadas ortogonais x_1, x_2, x_3, t à superfície da mistura estequiométrica, onde x_1 é normal à superfície $\tilde{Z}(x_\alpha, t) = \tilde{Z}_{st}$; x_2 e x_3 encontram-se na superfície, conforme Figura 2.2. Substituímos a coordenada x_1 pela fração de mistura \tilde{Z} ; x_2, x_3 e t por \tilde{Z}_2, \tilde{Z}_3 e τ , respectivamente. Dessa forma, a temperatura \tilde{T} e as frações de massa \tilde{Y}_k podem ser expressas como funções da fração de mistura \tilde{Z} . Por definição, a nova coordenada \tilde{Z} é localmente normal à superfície de mistura estequiométrica.

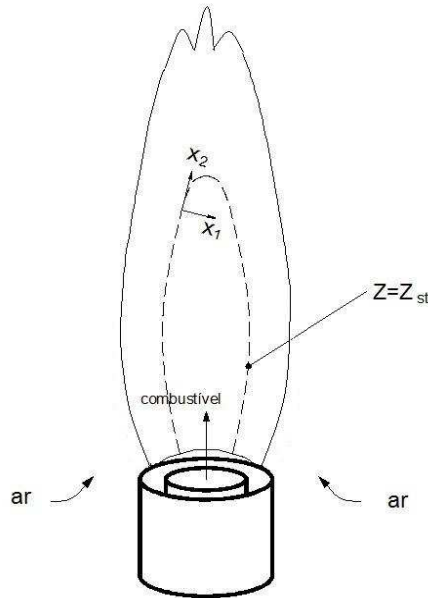


Figura 2.2: Estrutura Flamelet de um jato com chamas pilot.

Considere as transformações obtidas de [30] (Lecture 9) que transformam as equações da temperatura e fração de massa para o espaço da fração de

mistura

$$\frac{\partial}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial \tau} + \frac{\partial \tilde{Z}}{\partial t} \frac{\partial}{\partial \tilde{Z}} \quad (2.155)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial \tilde{Z}_i} + \frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_i} \frac{\partial}{\partial \tilde{Z}} \quad i = 2, 3 \quad (2.156)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_1} = \frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_1} \frac{\partial}{\partial \tilde{Z}} \quad (2.157)$$

Aplica-se as transformações (2.155), (2.156) e (2.157) na equação (2.153), para $j = 1, 2, 3$; obtém-se

$$\frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial t} = \frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial \tau} + \frac{\partial \tilde{Z}}{\partial t} \frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial \tilde{Z}}, \quad (2.158)$$

$$\frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial x_j} = \frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_1} \frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial \tilde{Z}} + \frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial \tilde{Z}_2} + \frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_2} \frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial \tilde{Z}} + \frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial \tilde{Z}_3} + \frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_3} \frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial \tilde{Z}}, \quad (2.159)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \tilde{Y}_k}{\partial x_j^2} &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial x_j} \right) \\ &= \frac{\partial}{\partial x_1} \left(\frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_1} \frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial \tilde{Z}} \right) + \frac{\partial}{\partial x_2} \left(\frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial \tilde{Z}_2} + \frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_2} \frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial \tilde{Z}} \right) + \frac{\partial}{\partial x_3} \left(\frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial \tilde{Z}_3} + \frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_3} \frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial \tilde{Z}} \right) \\ &= \frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_1} \frac{\partial^2 \tilde{Z}}{\partial \tilde{Z} \partial x_1} \frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial \tilde{Z}} + \frac{\partial^2 \tilde{Y}_k}{\partial \tilde{Z}^2} \left(\frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_1} \right)^2 + \frac{\partial^2 \tilde{Y}_k}{\partial \tilde{Z}_2^2} + 2 \frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_2} \frac{\partial^2 \tilde{Y}_k}{\partial \tilde{Z} \partial \tilde{Z}_2} + \frac{\partial^2 \tilde{Z}}{\partial \tilde{Z}_2 \partial x_2} \frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial \tilde{Z}} + \\ &\quad \frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_2} \frac{\partial^2 \tilde{Z}}{\partial \tilde{Z} \partial x_2} \frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial \tilde{Z}} + \frac{\partial^2 \tilde{Y}_k}{\partial \tilde{Z}^2} \left(\frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_2} \right)^2 + \frac{\partial^2 \tilde{Y}_k}{\partial \tilde{Z}_3^2} + 2 \frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_3} \frac{\partial^2 \tilde{Y}_k}{\partial \tilde{Z} \partial \tilde{Z}_3} + \frac{\partial^2 \tilde{Z}}{\partial \tilde{Z}_3 \partial x_3} \frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial \tilde{Z}} + \\ &\quad \frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_3} \frac{\partial^2 \tilde{Z}}{\partial \tilde{Z} \partial x_3} \frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial \tilde{Z}} + \frac{\partial^2 \tilde{Y}_k}{\partial \tilde{Z}^2} \left(\frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_3} \right)^2. \end{aligned} \quad (2.160)$$

Como $\tilde{Z} = x_1$ e $\tilde{Z}_i = x_i$ para $i = 2, 3$, tem-se $\frac{\partial^2 \tilde{Z}}{\partial \tilde{Z} \partial x_i} = \frac{\partial(1)}{\partial x_i} = 0$, $\frac{\partial^2 \tilde{Z}}{\partial \tilde{Z}_i \partial x_i} = \frac{\partial^2 \tilde{Z}}{\partial x_i^2}$ e $\frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_1} = 1$, o que resulta em

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \tilde{Y}_k}{\partial x_j^2} &= \frac{\partial^2 \tilde{Z}}{\partial x_j} \frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial \tilde{Z}} + \frac{\partial^2 \tilde{Y}_k}{\partial \tilde{Z}^2} \left(\frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_j} \right)^2 + \frac{\partial^2 \tilde{Y}_k}{\partial \tilde{Z}_2^2} + 2 \frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_2} \frac{\partial^2 \tilde{Y}_k}{\partial \tilde{Z} \partial \tilde{Z}_2} + \frac{\partial^2 \tilde{Y}_k}{\partial \tilde{Z}_3^2} + \\ &\quad 2 \frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_3} \frac{\partial^2 \tilde{Y}_k}{\partial \tilde{Z} \partial \tilde{Z}_3}. \end{aligned} \quad (2.161)$$

Substituindo (2.158), (2.159) e (2.161) em (2.153), resulta

$$\begin{aligned} \bar{\rho} \frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial \tau} - \bar{\rho} D_t \frac{\partial^2 \tilde{Y}_k}{\partial \tilde{Z}^2} \left(\frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_j} \right)^2 + \left[\bar{\rho} \frac{\partial \tilde{Z}}{\partial t} + \bar{\rho} \tilde{v}_j \frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_j} - \bar{\rho} D_t \frac{\partial^2 \tilde{Z}}{\partial x_j^2} \right] \frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial \tilde{Z}} + \frac{\partial^2 \tilde{Y}_k}{\partial \tilde{Z}_2^2} + \\ 2 \frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_2} \frac{\partial^2 \tilde{Y}_k}{\partial \tilde{Z} \partial \tilde{Z}_2} + \frac{\partial^2 \tilde{Y}_k}{\partial \tilde{Z}_3^2} + 2 \frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_3} \frac{\partial^2 \tilde{Y}_k}{\partial \tilde{Z} \partial \tilde{Z}_3} = \bar{w}_k \end{aligned} \quad (2.162)$$

Uma análise de ordem de grandeza, similarmente a de camada limite hidrodinâmica de Prandtl [21], mostra que a derivada segunda com respeito a \tilde{Z} é o termo dominante. Além disso, todos os termos envolvendo derivadas parciais nas direções x_2 e x_3 podem ser negligenciados, como na página 139 de [30]. Usando a equação (2.96) resulta

$$\bar{\rho} \frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial \tau} - \bar{\rho} D_t \left(\frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_i} \right)^2 \frac{\partial^2 \tilde{Y}_k}{\partial \tilde{Z}^2} = \bar{w}_k, \quad (2.163)$$

que pode ser reescrita como

$$\bar{\rho} \frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial \tau} - \frac{\bar{\rho}}{L_{ek}} \frac{\tilde{\chi}}{2} \frac{\partial^2 \tilde{Y}_k}{\partial \tilde{Z}^2} = \bar{w}_k, \quad (2.164)$$

onde

$$\tilde{\chi} = 2 D_t \left(\frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_i} \right)^2, \quad (2.165)$$

$\tilde{\chi}$ é a taxa de dissipação escalar.

Para a equação da temperatura aplica-se as transformações (2.155), (2.156) e (2.157) na equação (2.154), e o processo é semelhante ao feito na equação (2.153), com as mesmas condições, o que resulta em

$$\bar{\rho} \frac{\partial \tilde{T}}{\partial \tau} - \bar{\rho} \frac{\tilde{\chi}}{2} \frac{\partial^2 \tilde{T}}{\partial \tilde{Z}^2} = \frac{1}{c_p} \bar{w}'_T. \quad (2.166)$$

Agora tem-se as equações no modelo flamelet Lagrangiano:

$$\bar{\rho} \frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial \tau} - \frac{\bar{\rho}}{L_{ek}} \frac{\tilde{\chi}}{2} \frac{\partial^2 \tilde{Y}_k}{\partial \tilde{Z}^2} = \bar{w}_k, \quad (2.167)$$

$$\bar{\rho} \frac{\partial \tilde{T}}{\partial \tau} - \bar{\rho} \frac{\tilde{\chi}}{2} \frac{\partial^2 \tilde{T}}{\partial \tilde{Z}^2} = \frac{1}{c_p} \bar{w}'_T. \quad (2.168)$$

2.11.1 Adimensionalização das equações Flamelet

Há muitos problemas de interesse no mundo real que requerem tanto um desenvolvimento teórico como resultados experimentais, que são geralmente muito caros. Com o uso da análise dimensional, que é baseada na noção de homogeneidade dimensional, reduz-se o número de variáveis presentes e torna-se esse resultado compacto. Portanto, se dividirmos cada termo da equação por uma coleção de variáveis e constantes cujo produto tem aquelas mesmas dimensões, a equação se transforma em uma equação adimensional. Cada termo de uma equação adimensional é um número desprovido de qualquer unidade física que o defina.

Para descrever as equações (2.167) e (2.168) na forma adimensional, define-se as seguintes quantidades adimensionais:

$$\begin{aligned}\tilde{Y}_k^* &\equiv \frac{\tilde{Y}_k}{Y_{F,i}}, & \tilde{T}^* &\equiv \frac{\tilde{T}}{T_b}, & W_k^* &\equiv \frac{W_k}{W_F}, & \nu_k^* &\equiv \frac{\nu_k}{\nu_F}, \\ \tilde{\chi}^* &\equiv \frac{\tilde{\chi}}{\chi_{st}}, & \tilde{\rho}^* &\equiv \frac{\tilde{\rho}}{\rho_{st}}, & Ze &\equiv \frac{E}{RT_b}, & Q^* &\equiv \frac{Q\tilde{Y}_{F,u}}{c_p W_F T_u}, \\ \tau^* &\equiv \frac{\tau U^*}{L} \equiv \tau \frac{\chi_{st}}{a}, & a &\equiv 2\Delta\tilde{Z}\tilde{Z}_{st}(1 - \tilde{Z}_{st}),\end{aligned}\quad (2.169)$$

onde L é um comprimento característico, T_u a temperatura antes da queima, T_b a temperatura depois da queima, $\Delta\tilde{Z}$ a variação da fração de mistura, U^* a velocidade do jato, E a energia de ativação total, R a constante do gás, e Ze o número de Zel'dovich.

Na sequência, obtemos as equações escritas convenientemente na forma adimensional [34]. A equação para a fração de massa para as espécies é dada por

$$\tilde{\rho} \frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial \tau} - \frac{\tilde{\rho}}{L_{e_k}} \frac{\tilde{\chi}}{2} \frac{\partial^2 \tilde{Y}_k}{\partial \tilde{Z}^2} = \pm \nu_k W_k \dot{A} \frac{\tilde{Y}_F}{W_F} \frac{\tilde{Y}_O}{W_O} \tilde{\rho}^2 e^{-E/RT}, \quad (2.170)$$

e das relações adimensionais (2.169), obtém-se

$$\frac{\partial(\tilde{Y}_k^* Y_{F,i})}{\partial\left(\frac{\tau^* a}{\chi_{st}}\right)} - \frac{\tilde{\chi}^* \chi_{st}}{2L_{e_k}} \frac{\partial^2(\tilde{Y}_k^* Y_{F,i})}{\partial \tilde{Z}^2} = \pm \nu_k^* \nu_F W_k^* W_F \dot{A} \frac{\tilde{Y}_F^* Y_{F,i} \tilde{Y}_O^* Y_{F,i}}{W_F^* W_F W_O^* W_F} \tilde{\rho}^* \rho_{st} e^{\frac{-E}{RT_b T^*}} \quad (2.171)$$

ou

$$\frac{\partial \tilde{Y}_k^*}{\partial \tau^*} - \frac{a \tilde{\chi}^*}{2L_{e_k}} \frac{\partial^2 \tilde{Y}_k^*}{\partial \tilde{Z}^2} = \pm \nu_k^* \nu_F W_k^* \frac{a \dot{A}}{\chi_{st}} \frac{\tilde{Y}_F^* \tilde{Y}_O^* Y_{F,i}}{W_F^* W_O^* W_F} \tilde{\rho}^* \rho_{st} e^{\frac{-Ze}{T^*}}, \quad (2.172)$$

que resulta em

$$\frac{\partial \tilde{Y}_k^*}{\partial \tau^*} - \frac{a \tilde{\chi}^*}{2L_{e_k}} \frac{\partial^2 \tilde{Y}_k^*}{\partial \tilde{Z}^2} = \pm \nu_F D_a \tilde{Y}_F^* \tilde{Y}_O^* e^{\frac{-Z_e}{T^*}}, \quad (2.173)$$

onde D_a

$$D_a = \nu_k^* W_k^* \frac{a \dot{A}}{\chi_{st}} \frac{Y_{F,i}}{W_F^* W_O^* W_F} \bar{\rho}^* \rho_{st}. \quad (2.174)$$

é denominado de número de Damköhler.

Para a equação da temperatura

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tilde{T}}{\partial \tau} - \frac{\tilde{\chi}}{2} \frac{\partial^2 \tilde{T}}{\partial \tilde{Z}^2} &= -\frac{1}{c_p} \sum_{k=1}^N h_k \dot{w}_k \\ &= -\frac{1}{c_p} \dot{A} \frac{\tilde{Y}_F}{W_F} \frac{\tilde{Y}_O}{W_O} \bar{\rho}^2 e^{-E/RT} \sum_{k=1}^N h_k \nu_k W_k \\ &= \frac{Q}{c_p} A \frac{\tilde{Y}_F}{W_F} \frac{\tilde{Y}_O}{W_O} \bar{\rho}^2 e^{-E/RT}, \end{aligned} \quad (2.175)$$

as relações adimensionais (2.169), conduzem a

$$\frac{\partial(\tilde{T}^* T_b)}{\partial \left(\frac{\tau^* a}{\chi_{st}} \right)} - \frac{\tilde{\chi}^* \chi_{st}}{2} \frac{\partial^2 \tilde{T}^* T_b}{\partial \tilde{Z}^2} = \frac{Q^* c_p W_F T_u}{c_p Y_{F,u}} \dot{A} \frac{\tilde{Y}_F^* \tilde{Y}_{F,i} \tilde{Y}_O^* \tilde{Y}_{F,i}}{W_F^* W_F W_O^* W_F} \bar{\rho}^* \rho_{st} e^{\frac{E}{RT_b T^*}} \quad (2.176)$$

ou

$$\frac{\partial \tilde{T}^*}{\partial \tau^*} - \frac{a \tilde{\chi}^*}{2} \frac{\partial^2 \tilde{T}^*}{\partial \tilde{Z}^2} = \frac{Q^* c_p T_u}{c_p \tilde{Y}_{F,u} T_b} \frac{a \dot{A}}{\chi_{st}} \frac{\tilde{Y}_F^* \tilde{Y}_{F,i} \tilde{Y}_O^* \tilde{Y}_{F,i}}{W_F^* W_O^* W_F} \bar{\rho}^* \rho_{st} e^{\frac{-Z_e}{T^*}} \quad (2.177)$$

que resulta em

$$\frac{\partial \tilde{T}^*}{\partial \tau^*} - \frac{a \tilde{\chi}^*}{2} \frac{\partial^2 \tilde{T}^*}{\partial \tilde{Z}^2} = \nu_F H_e D_a \tilde{Y}_F^* \tilde{Y}_O^* e^{\frac{-Z_e}{T^*}}, \quad (2.178)$$

onde H_e

$$H_e = \frac{Q^*}{\nu_k^* \nu_F W_F^*} \frac{T_u}{T_b} \frac{\tilde{Y}_{F,i}}{\tilde{Y}_{F,u}}. \quad (2.179)$$

é a taxa de liberação de calor.

Por fim, as equações de fração de massa e de temperatura na forma adimensionalizada tornam-se:

$$\frac{\partial \tilde{Y}_k^*}{\partial \tau^*} - \frac{a \tilde{\chi}^*}{2L_{e_k}} \frac{\partial^2 \tilde{Y}_k^*}{\partial \tilde{Z}^2} = \pm \nu_F D_a \tilde{Y}_F^* \tilde{Y}_O^* e^{\frac{-Z_e}{T^*}}, \quad (2.180)$$

$$\frac{\partial \tilde{T}^*}{\partial \tau^*} - \frac{a \tilde{\chi}^*}{2} \frac{\partial^2 \tilde{T}^*}{\partial \tilde{Z}^2} = \nu_F H_e D_a \tilde{Y}_F^* \tilde{Y}_O^* e^{\frac{-Z_e}{T^*}}. \quad (2.181)$$

3 OBTENÇÃO DE SOLUÇÕES ANALÍTICAS

Para o estudo de uma chama difusiva, escolhemos o metano como combustível, que reage com o oxigênio (O_2) que é um oxidante. O metano é um hidrocarboneto gasoso incolor, cuja molécula é constituída por um átomo de carbono e quatro de hidrogênio (CH_4), sendo o principal componente do gás natural e o mais simples da cadeia dos alcanos (C_nH_{2n+2}). Da reação mencionada surgem produtos gasosos como o CO_2 e o H_2O , quando a combustão é completa.

Com o intuito de validar a solução numérica do problema da chama difusiva, neste capítulo vamos desenvolver soluções analíticas para o Modelo Flamelet Lagrangeano para a fração de massa dos produtos e reagentes envolvidos na combustão, e para a temperatura [47].

As equações governantes no modelo Flamelet Lagrangeano adimensionalizadas são:

$$\frac{\partial \tilde{Y}_k^*}{\partial t} - \frac{a\tilde{\chi}^*}{2L_{e_k}} \frac{\partial^2 \tilde{Y}_k^*}{\partial Z^2} = \pm \nu_F D_a \tilde{Y}_F^* \tilde{Y}_O^* e^{\frac{-Ze}{\tilde{T}^*}}, \quad (3.1)$$

$$\frac{\partial \tilde{T}^*}{\partial t} - \frac{a\tilde{\chi}^*}{2} \frac{\partial^2 \tilde{T}^*}{\partial Z^2} = \nu_F H_e D_a \tilde{Y}_F^* \tilde{Y}_O^* e^{\frac{-Ze}{\tilde{T}^*}}. \quad (3.2)$$

onde k são as espécies químicas CH_4 , O_2 , CO_2 e H_2O .

Soluções analíticas para o conjunto de equações não linear (3.1) e (3.2), ajudam a entender os mecanismos dos efeitos não lineares [37]. Além disso, afim de resolver este tipo de EDP, escreve-se a temperatura em função de Z [45], com a seguinte aproximação, $e^{\frac{-Ze}{\tilde{T}^*}} \sim e^{-Ze \frac{T_{ad} - \tilde{T}^*}{T_{ad}}}$, ou ainda de [3], $e^{-Ze \frac{T_{ad} - \tilde{T}^*}{T_{ad}}} \sim e^{-Ze \frac{T_{ad} - (\alpha + \kappa Z)}{T_{ad}}}$, o que resulta para $Z < Z_{st}$:

$$\alpha = T_0 \quad \text{e} \quad \kappa = \frac{T_{ad} - T_0}{Z_{st}}, \quad (3.3)$$

e para $Z \geq Z_{st}$:

$$\alpha = T_0 + \frac{T_{ad} - T_0}{1 - Z_{st}} \quad \text{e} \quad \kappa = -\frac{T_{ad} - T_0}{1 - Z_{st}}, \quad (3.4)$$

onde T_{ad} é a temperatura adiabática da chama e T_0 é a temperatura ambiente (antes da combustão). Assim, com estas considerações parte-se para as soluções analíticas [46].

3.1 Solução para os produtos CO_2 e H_2O

A equação (3.1) pode ser escrita da seguinte forma:

$$\frac{\partial \tilde{Y}_k^*}{\partial t} = A \frac{\partial^2 \tilde{Y}_k^*}{\partial Z^2} + B e^{CZ}, \quad (3.5)$$

onde $A = \frac{a\tilde{\chi}^*}{2Le_k}$, $B = \nu_F D_a \tilde{Y}_F^* \tilde{Y}_O^* e^{-Z e^{\frac{T_{ad}-\alpha}{T_{ad}}}}$ e $C = \frac{\kappa Z e}{T_{ad}}$ são constantes, e assume-se de [28] que $\tilde{Y}_F^* \tilde{Y}_O^* \sim \frac{1}{D_a} \sim 0.01$, pois após iniciar a combustão estamos considerando que ela se mantém.

Como existem relações diferentes para $Z < Z_{st}$ e $Z \geq Z_{st}$, divide-se o problema em duas partes:

caso 1: para $Z \geq Z_{st}$

Resolve-se o problema,

$$\begin{cases} \frac{\partial \tilde{Y}_k^*}{\partial t} = A \frac{\partial^2 \tilde{Y}_k^*}{\partial Z^2} + B e^{CZ}, & Z \in [0, 1], t \in [0, \infty) \\ \tilde{Y}_k^*(Z, 0) = 0 \\ \tilde{Y}_k^*(0, t) = 0 \\ \tilde{Y}_k^*(1, t) = 0 \end{cases} \quad (3.6)$$

Procura-se soluções da seguinte forma, $\tilde{Y}_k^*(z, t) = w(Z, t) + \varphi(Z)$. A solução permanente $\varphi(Z)$, satisfazendo $A\varphi''(Z) + B e^{CZ} = 0$ e as condições de contorno $\varphi(0) = 0$ e $\varphi(1) = 0$, onde $(\varphi'' = \frac{d^2\varphi}{dz^2})$ é dada por

$$\varphi(Z) = \frac{B}{AC^2} [1 - e^{CZ} + (-1 + e^C)Z]. \quad (3.7)$$

A fim de encontrar $w(Z, t)$ escreve-se

$$\tilde{Y}_k^*(Z, t) = w(Z, t) + \varphi(Z), \quad (3.8)$$

$$\frac{\partial \tilde{Y}_k^*}{\partial t} = \frac{\partial w}{\partial t}, \quad (3.9)$$

$$\frac{\partial^2 \tilde{Y}_k^*}{\partial Z^2} = \frac{\partial^2 w}{\partial Z^2} + \varphi''(Z). \quad (3.10)$$

Substituindo as equações (3.8), (3.9) e (3.10) em (3.6) obtém-se

$$\frac{\partial w}{\partial t} = A \frac{\partial^2 w}{\partial Z^2} + A\varphi''(Z) + Be^{CZ} = A \frac{\partial^2 w}{\partial Z^2}, \quad (3.11)$$

$$w(0, t) = \tilde{Y}_k^*(0, t) - \varphi(0) = 0, \quad (3.12)$$

$$w(1, t) = \tilde{Y}_k^*(1, t) - \varphi(1) = 0, \quad (3.13)$$

$$w(Z, 0) = \tilde{Y}_k^*(Z, 0) - \varphi(Z) = -\varphi(Z). \quad (3.14)$$

O problema torna-se agora:

$$\frac{\partial w}{\partial t} = A \frac{\partial^2 w}{\partial Z^2}, \quad (3.15)$$

com condições inicial e de contorno dadas por

$$w(0, t) = 0, \quad w(1, t) = 0, \quad w(Z, 0) = -\varphi(Z), \quad (3.16)$$

cujas soluções são dadas por separação de variáveis.

Assumindo que $w(Z, t) = Z(z)T(t)$, derivando e substituindo na equação (3.11), resulta em

$$\mathbf{a)} \quad Z'' + \lambda Z = 0, \quad Z(0) = Z(1) = 0$$

o qual é um problema de Sturm-Liouville [7], cujos autovalores e autovetores são respectivamente $\text{sen}(n\pi Z)$ e $\lambda_n = n^2\pi^2$, $n = 1, 2, \dots$

$$\mathbf{b)} \quad T' + \lambda AT = 0$$

a solução é dada por $T_n(t) = C_n e^{-An^2\pi^2 t}$, $n = 1, 2, \dots$

Usando o princípio da superposição, tem-se

$$w(Z, t) = \sum_{n=1}^{\infty} C_n e^{-An^2\pi^2 t} \text{sen}(n\pi Z), \quad (3.17)$$

em $t = 0$

$$w(Z, 0) = \sum_{n=1}^{\infty} C_n \text{sen}(n\pi Z) = -\varphi(Z). \quad (3.18)$$

Portanto, os coeficientes de Fourier C_n tornam-se

$$C_n = 2 \int_0^1 -\varphi(Z) \text{sen}(n\pi Z) dZ, \quad (3.19)$$

ou

$$C_n = \frac{2B}{An\pi} \left(\frac{-1 + (-1)^n e^C}{C^2 + n^2\pi^2} \right). \quad (3.20)$$

Finalmente, a solução para $Z \geq Z_{st}$ é dada por:

$$\begin{aligned} \tilde{Y}_k^*(Z, t) &= \varphi(Z) + \sum_{n=1}^{\infty} C_n e^{-An^2\pi^2 t} \text{sen}(n\pi Z) \\ &= \frac{B}{AC^2} [-e^{CZ} + (-1 + e^C)Z + 1] + \\ &\quad \sum_{n=1}^{\infty} C_n e^{-An^2\pi^2 t} \text{sen}(n\pi Z), \end{aligned} \quad (3.21)$$

onde $\varphi(Z)$ vem da equação (3.7), C_n de (3.20), $B = \nu_F D_a \tilde{Y}_F^* \tilde{Y}_O^* e^{-Ze \frac{T_{ad} - T_0}{T_{ad}} (1 - \frac{1}{1 - Z_{st}})}$ e $C = \frac{-Ze (T_{ad} - T_0)}{T_{ad} (1 - Z_{st})}$.

caso 2: para $Z < Z_{st}$

Resolve-se o problema,

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \tilde{Y}_k^*}{\partial t} = A \frac{\partial^2 \tilde{Y}_k^*}{\partial Z^2} + B e^{CZ} \quad Z \in [0, Z_{st}], t \in [0, \infty) \\ \tilde{Y}_k^*(Z, 0) = 0, \\ \tilde{Y}_k^*(0, t) = 0, \\ \tilde{Y}_k^*(Z_{st}, t) = \epsilon \end{array} \right. \quad (3.22)$$

onde $\epsilon = \tilde{Y}_k^*(Z_{st}, t)$ é obtido da equação (3.21) para $Z = Z_{st}$.

Procura-se novamente soluções da forma $\tilde{Y}_k^*(z, t) = \eta(Z, t) + \psi(Z)$. A solução permanente $\psi(Z)$, satisfazendo $A\psi''(Z) + B e^{CZ} = 0$, $\psi(0) = 0$ e $\psi(Z_{st}) = \epsilon$ é dada por:

$$\psi(Z) = \frac{B}{AC^2} \left[1 - e^{CZ} + \frac{Z}{Z_{st}} (-1 + e^{CZ_{st}}) \right] + \epsilon \frac{Z}{Z_{st}}. \quad (3.23)$$

Afim de encontrar $\eta(Z, t)$ escreve-se:

$$\tilde{Y}_k^*(Z, t) = \eta(Z, t) + \psi(Z), \quad (3.24)$$

$$\frac{\partial \tilde{Y}_k^*}{\partial t} = \frac{\partial \eta}{\partial t}, \quad (3.25)$$

$$\frac{\partial^2 \tilde{Y}_k^*}{\partial Z^2} = \frac{\partial^2 \eta}{\partial Z^2} + \psi''(Z). \quad (3.26)$$

A substituição das equações (3.24), (3.25) e (3.26) em (3.22) resulta em

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} = A \frac{\partial^2 \eta}{\partial Z^2} + A\psi''(Z) + Be^{cZ} = A \frac{\partial^2 \eta}{\partial Z^2}, \quad (3.27)$$

$$\eta(0, t) = \tilde{Y}_k^*(0, t) - \psi(0) = 0, \quad (3.28)$$

$$\eta(Z_{st}, t) = \tilde{Y}_k^*(Z_{st}, t) - \psi(Z_{st}) = 0, \quad (3.29)$$

$$\eta(Z, 0) = \tilde{Y}_k^*(Z, 0) - \psi(Z) = -\psi(Z), \quad (3.30)$$

e o problema, torna-se

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} = A \frac{\partial^2 \eta}{\partial Z^2}, \quad (3.31)$$

com condições iniciais e de contorno dadas por:

$$\eta(0, t) = 0, \quad \eta(Z_{st}, t) = 0, \quad \eta(Z, 0) = -\psi(Z), \quad (3.32)$$

cujas soluções são dadas pelo método de separação de varáveis. Assumindo que $\eta(Z, t) = Z(z)T(t)$, derivando e substituindo na equação (3.31), resulta

$$\mathbf{a)} \quad Z'' + \lambda Z = 0, \quad Z(0) = Z(z_{st}) = 0$$

o problema de Sturm-Liouville [7], cujos autovalores e autovetores são respectivamente, $\text{sen}\left(\frac{n\pi}{Z_{st}}Z\right)$ e $\lambda_n = \frac{n^2\pi^2}{Z_{st}^2}$, $n = 1, 2, \dots$

$$\mathbf{b)} \quad T' + \lambda AT = 0$$

a solução é dada por $T_n(t) = C_n e^{-A \frac{n^2\pi^2}{Z_{st}^2} t}$, $n = 1, 2, \dots$

A solução para $\eta(Z, t)$ torna-se

$$\eta(Z, t) = \sum_{n=1}^{\infty} C_n e^{-A \frac{n^2 \pi^2}{Z_{st}^2} t} \operatorname{sen} \left(\frac{n\pi}{Z_{st}} Z \right), \quad (3.33)$$

e para $t = 0$

$$\eta(Z, 0) = \sum_{n=1}^{\infty} C_n \operatorname{sen} \left(\frac{n\pi}{Z_{st}} Z \right) = -\psi(Z), \quad (3.34)$$

resulta que os coeficientes de Fourier C_n são dados por:

$$\begin{aligned} C_n &= \frac{2}{Z_{st}} \int_0^{Z_{st}} -\psi(Z) \operatorname{sen} \left(\frac{n\pi}{Z_{st}} Z \right) dZ \\ &= \frac{2n\pi B}{AC^2 Z_{st}^2} \left(\frac{1 + (-1)^{n+1} e^{CZ_{st}}}{C^2 + \left(\frac{n\pi}{Z_{st}}\right)^2} \right) + \\ &\quad \frac{2(-1)^n}{n\pi AC^2} (\epsilon AC^2 + B(-1 + e^{CZ_{st}})) + \\ &\quad \frac{2B}{n\pi AC^2} ((-1)^n - 1). \end{aligned} \quad (3.35)$$

A solução para $Z < Z_{st}$ finalmente resulta em

$$\begin{aligned} \tilde{Y}_k^*(Z, t) &= \psi(Z) + \sum_{n=1}^{\infty} C_n e^{-A \frac{n^2 \pi^2}{Z_{st}^2} t} \operatorname{sen} \left(\frac{n\pi}{Z_{st}} Z \right) \\ &= \frac{B}{AC^2} [-e^{CZ} + \frac{Z}{Z_{st}} (-1 + e^{CZ_{st}}) + 1] + \epsilon \frac{Z}{Z_{st}} + \\ &\quad \sum_{n=1}^{\infty} C_n e^{-A \frac{n^2 \pi^2}{Z_{st}^2} t} \operatorname{sen} \left(\frac{n\pi}{Z_{st}} Z \right), \end{aligned} \quad (3.36)$$

onde $\psi(Z)$ é dado pela equação (3.23), C_n por (3.35), $B = \nu_F D_a \tilde{Y}_F^* \tilde{Y}_O^* e^{-Ze \frac{T_{ad} - T_0}{T_{ad}}}$ e $C = \frac{Ze}{Z_{st}} \frac{(T_{ad} - T_0)}{T_{ad}}$.

3.2 Solução para a temperatura

Como pode-se verificar, a equação da temperatura (3.2) tem a mesma forma da equação de fração de massa dos produtos (3.1) e pode ser escrita da seguinte forma:

$$\frac{\partial \tilde{T}^*}{\partial t} = A' \frac{\partial^2 \tilde{T}^*}{\partial Z^2} + B' e^{C'Z}, \quad (3.37)$$

onde $A' = \frac{\alpha \tilde{\chi}^*}{2}$, $B' = \nu_F D_a H_e e^{-Z e \frac{T_{ad} - \alpha}{T_{ad}}}$ e $C' = \frac{\kappa Z e}{T_{ad}}$ são constantes. Usando as relações (3.3) e (3.4) e as condições inicial e de contorno da forma

$$\tilde{T}^*(Z, 0) = 0, \quad \tilde{T}^*(0, t) = 1, \quad \tilde{T}^*(1, t) = 1, \quad (3.38)$$

a solução resulta do mesmo cálculo feito para a fração de massa dos produtos, e é assim definida

caso 1: para $Z \geq Z_{st}$

$$\begin{aligned} \tilde{T}^*(Z, t) = & \frac{B'}{A' C'^2} [-e^{C'Z} + (-1 + e^{C'})Z + 1] + 1 + \\ & \sum_{n=1}^{\infty} C_n e^{-A' n^2 \pi^2 t} \text{sen}(n\pi Z), \end{aligned} \quad (3.39)$$

onde

$$C_n = \frac{2B'}{A' n \pi} \left(\frac{-1 + (-1)^n e^{C'}}{C'^2 + n^2 \pi^2} \right) + 2 \left(\frac{(-1)^n - 1}{n\pi} \right), \quad (3.40)$$

sendo, $B' = \nu_F D_a H_e \tilde{Y}_F^* \tilde{Y}_O^* e^{-Z e \frac{T_{ad} - T_0}{T_{ad}} (1 - \frac{1}{Z_{st}})}$ e $C' = \frac{Z e (T_{ad} - T_0)}{T_{ad} (1 - Z_{st})}$.

caso 2: para $Z < Z_{st}$

$$\begin{aligned} \tilde{T}^*(Z, t) = & \frac{B'}{A' C'^2} [-e^{C'Z} + \frac{Z}{Z_{st}} (-1 + e^{C'Z_{st}}) + 1] + (\varpi - 1) \frac{Z}{Z_{st}} + 1 + \\ & \sum_{n=1}^{\infty} C_n e^{-A' \frac{n^2 \pi^2}{Z_{st}^2} t} \text{sen} \left(\frac{n\pi}{Z_{st}} Z \right), \end{aligned} \quad (3.41)$$

onde

$$\begin{aligned} C_n = & \frac{2n\pi B'}{A' C'^2 Z_{st}^2} \left(\frac{1 + (-1)^{n+1} e^{C'Z_{st}}}{C'^2 + (\frac{n\pi}{Z_{st}})^2} \right) + \\ & \frac{2(-1)^n}{n\pi A' C'^2} (\varpi A' C'^2 + B' (-1 + e^{C'Z_{st}})) + \\ & \frac{2B'}{n\pi A' C'^2} ((-1)^n - 1) - \frac{2}{n\pi}, \end{aligned} \quad (3.42)$$

com $B' = \nu_F D_a H_e \tilde{Y}_F^* \tilde{Y}_O^* e^{-Z e \frac{T_{ad} - T_0}{T_{ad}}}$, $C' = \frac{Z e (T_{ad} - T_0)}{Z_{st} T_{ad}}$ e $\varpi = \tilde{T}^*(Z_{st}, t)$.

3.3 Solução para os reagentes CH_4 e O_2

Para o combustível CH_4 resolve-se o seguinte problema

$$\begin{cases} \frac{\partial \tilde{Y}_{CH_4}^*}{\partial t} = \tilde{A} \frac{\partial^2 \tilde{Y}_{CH_4}^*}{\partial Z^2} + \tilde{B} e^{\tilde{C}Z}, & Z \in [Z_{st}, 1], t \in [0, \infty) \\ \tilde{Y}_{CH_4}^*(Z, 0) = 0 \\ \tilde{Y}_{CH_4}^*(Z_{st}, t) = 0 \\ \tilde{Y}_{CH_4}^*(1, t) = 0.16 \end{cases} \quad (3.43)$$

onde $\tilde{A} = \frac{\alpha \tilde{X}^*}{2L e_k}$, $\tilde{B} = -\nu_F D_a H_e \tilde{Y}_{CH_4}^* \tilde{Y}_O^* e^{-Z e^{\frac{T_{ad}-T_0}{T_{ad}}(1-\frac{1}{1-Z_{st}})}}$ e $\tilde{C} = \frac{-Ze(T_{ad}-T_0)}{T_{ad}(1-Z_{st})}$.

O desenvolvimento da solução é semelhante ao que foi feito para as frações de massa dos produtos; por isso o omite-se aqui e mostra-se só o resultado de

$$\tilde{Y}_{CH_4}^*(Z, t) = \tilde{\varphi}(Z) + \sum_{n=1}^{\infty} C_n e^{-\tilde{A} \frac{n^2 \pi^2}{(1-Z_{st})^2} t} \text{sen} \left(\frac{n\pi}{1-Z_{st}} (Z - Z_{st}) \right), \quad (3.44)$$

onde

$$\tilde{\varphi}(Z) = \frac{\tilde{B}}{\tilde{A}\tilde{C}^2} (e^{\tilde{C}Z_{st}} - e^{\tilde{C}Z}) + \frac{(Z - Z_{st})}{(1 - Z_{st})} (0.16 + \tilde{B}(e^{\tilde{C}} - e^{\tilde{C}Z_{st}})), \quad (3.45)$$

e

$$\begin{aligned} C_n = & \frac{2n\pi\tilde{B}}{\tilde{A}\tilde{C}^2(1-Z_{st})^2} \left(\frac{e^{\tilde{C}Z_{st}} - (-1)^n e^{\tilde{C}}}{\tilde{C}^2 + (\frac{n\pi}{1-Z_{st}})^2} \right) + \\ & \frac{2\tilde{B}}{n\pi\tilde{A}\tilde{C}^2} ((-1)^n e^{\tilde{C}} - 1) + \frac{0.32(-1)^n}{n\pi}. \end{aligned} \quad (3.46)$$

Para o oxidante O_2 o problema sugerido

caso 1: para $Z < Z_{st}$ é

$$\begin{cases} \frac{\partial \tilde{Y}_{O_2}^*}{\partial t} = \hat{A} \frac{\partial^2 \tilde{Y}_{O_2}^*}{\partial Z^2} + \hat{B} e^{\hat{C}Z}, & Z \in [0, Z_{st}], t \in [0, \infty) \\ \tilde{Y}_{O_2}^*(Z, 0) = 0 \\ \tilde{Y}_{O_2}^*(0, t) = 0.23 \\ \tilde{Y}_{O_2}^*(Z_{st}, t) = 0 \end{cases} \quad (3.47)$$

onde $\hat{A} = \frac{a\tilde{X}^*}{2L_{e_k}}$, $\hat{B} = -\nu_F D_a \tilde{Y}_F^* \tilde{Y}_{O_2}^* e^{-Ze \frac{T_{ad}-T_0}{T_{ad}}}$ e $\hat{C} = \frac{Ze}{Z_{st}} \frac{(T_{ad}-T_0)}{T_{ad}}$, cuja a solução é dada por

$$\tilde{Y}_{O_2}^*(Z, t) = \hat{\varphi}(Z) + \sum_{n=1}^{\infty} C_n e^{-\hat{A} \frac{n^2 \pi^2}{Z_{st}^2} t} \text{sen} \left(\frac{n\pi}{Z_{st}} Z \right) \quad (3.48)$$

sendo $\hat{\varphi}(Z)$ escrito da seguinte forma

$$\hat{\varphi}(Z) = \frac{\hat{B}}{\hat{A}\hat{C}^2 Z_{st}} (-Z_{st} e^{\hat{C}Z} + Z e^{\hat{C}Z_{st}} + Z_{st} - Z) - \frac{0.23Z}{Z_{st}} + 0.23 \quad (3.49)$$

e ainda

$$C_n = \frac{2n\pi \hat{B}}{\hat{A}\hat{C}^2 Z_{st}^2} \left(\frac{1 + (-1)^{n+1} e^{\hat{C}Z_{st}}}{\hat{C}^2 + \left(\frac{n\pi}{Z_{st}}\right)^2} \right) + \frac{2\hat{B}}{n\pi \hat{A}\hat{C}^2} (-1 + (-1)^n e^{\hat{C}Z_{st}}) - \frac{0.46}{n\pi} \quad (3.50)$$

caso 2: para $Z \geq Z_{st}$

$$\begin{cases} \frac{\partial \tilde{Y}_{O_2}^*}{\partial t} = \check{A} \frac{\partial^2 \tilde{Y}_{O_2}^*}{\partial Z^2} + \check{B} e^{\check{C}Z}, & Z \in [0, Z_{st}], t \in [0, \infty) \\ \tilde{Y}_{O_2}^*(Z, 0) = 0 \\ \tilde{Y}_{O_2}^*(Z_{st}, t) = 0 \\ \tilde{Y}_{O_2}^*(1, t) = 0.19 \end{cases} \quad (3.51)$$

onde $\check{A} = \frac{a\tilde{X}^*}{2L_{e_k}}$, $\check{B} = -\nu_F D_a H_e \tilde{Y}_F^* \tilde{Y}_{O_2}^* e^{-Ze \frac{T_{ad}-T_0}{T_{ad}} (1 - \frac{1}{1-Z_{st}})}$ e $\check{C} = \frac{Ze}{T_{ad}} \frac{(T_{ad}-T_0)}{(1-Z_{st})}$, cuja a solução é dada por

$$\tilde{Y}_{O_2}^*(Z, t) = \check{\varphi}(Z) + \sum_{n=1}^{\infty} C_n e^{-\check{A} \frac{n^2 \pi^2}{(1-Z_{st})^2} t} \text{sen} \left(\frac{n\pi}{1-Z_{st}} (Z - Z_{st}) \right), \quad (3.52)$$

onde

$$\check{\varphi}(Z) = \frac{\check{B}}{\check{A}\check{C}^2} (e^{\check{C}Z_{st}} - e^{\check{C}Z}) + \frac{(Z - Z_{st})}{(1 - Z_{st})} (0.19 + \check{B}(e^{\check{C}} - e^{\check{C}Z_{st}})), \quad (3.53)$$

e

$$C_n = \frac{2n\pi \check{B}}{\check{A}\check{C}^2 (1 - Z_{st})^2} \left(\frac{e^{\check{C}Z_{st}} - (-1)^n e^{\check{C}}}{\check{C}^2 + \left(\frac{n\pi}{1-Z_{st}}\right)^2} \right) + \frac{2\check{B}}{n\pi \check{A}\check{C}^2} ((-1)^n e^{\check{C}} - 1) + \frac{0.38(-1)^n}{n\pi}. \quad (3.54)$$

Com estas soluções analíticas pode-se comparar os resultados numéricos obtidos no próximo capítulo.

4 OBTENÇÃO DE SOLUÇÕES NUMÉRICAS

Atualmente, o estudo, a análise e a compreensão da fenomenologia da maior parte dos problemas em combustão são desenvolvidos através de experimentos em laboratório e da modelagem computacional. Na modelagem computacional, um modelo matemático é desenvolvido, com base no problema considerado. A partir deste modelo, foi aprimorado neste trabalho um código computacional para a execução de simulações numéricas das equações governantes, obtendo-se assim projeções temporais da solução do problema. Esta solução é condicionada pelas condições iniciais e de contorno do problema, que estabelecem as condições de evolução deste no tempo e no espaço.

Neste procedimento numérico utilizamos o método de Diferenças Finitas, sendo o primeiro passo a discretização do domínio onde as equações são resolvidas.

4.1 Discretização das equações governantes pelo método de Diferenças Finitas

A idéia geral do método de diferenças finitas é obter a solução aproximada de uma EDP, em pontos discretos do domínio considerado, mediante expansões de séries de Taylor. A vantagem na utilização de esquemas envolvendo o método de Diferenças Finitas consiste em tais esquemas serem comparativamente econômicos, em relação a outros métodos numéricos, para a montagem do sistema linear de equações algébricas resultante, devido à simplicidade das operações envolvidas. Por este motivo, tais esquemas são largamente utilizados.

As derivadas temporais podem ser aproximadas para frente, da forma

$$\frac{\partial f}{\partial t} \cong \frac{f^{n+1} - f^n}{\Delta t}. \quad (4.1)$$

Embora esta aproximação seja de primeira ordem, o passo de tempo físico da mistura turbulenta é geralmente suficientemente pequeno (10^{-3} a 10^{-6} s).

Para as derivadas espaciais em y e z de primeira ordem, a discretização é dada por diferenças centrais,

$$\left(\frac{\partial f}{\partial y}\right)_{i,j,k} \cong \frac{f_{i,j+1,k} - f_{i,j-1,k}}{2\Delta y}, \quad (4.2)$$

$$\left(\frac{\partial f}{\partial z}\right)_{i,j,k} \cong \frac{f_{i,j,k+1} - f_{i,j,k-1}}{2\Delta z}. \quad (4.3)$$

Mas, as aproximações das derivadas espaciais de primeira ordem em x são aqui diferenciadas pois, infelizmente, os métodos numéricos padrões produzem soluções com excessivas oscilações. Para eliminar as oscilações espúrias, esquemas TVD (*Total Variation Diminishing*) são empregados [20]. A propriedade TVD garante que a variação total da solução de uma equação não cresça na direção progressiva do tempo.

Para o esquema TVD, considere as aproximações de primeira e segunda ordens, respectivamente, por diferenças finitas para a derivada $\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_{i,j,k}$

$$f_{i,j,k}^l \cong \frac{f_{i,j,k} - f_{i-1,j,k}}{\Delta x}, \quad (4.4)$$

$$f_{i,j,k}^h \cong \frac{f_{i+1,j,k} - f_{i-1,j,k}}{2\Delta x}. \quad (4.5)$$

Assim, uma aproximação híbrida da derivada de primeira ordem em x torna-se

$$\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_{i,j,k} \cong f_{i,j,k}^l - \Phi(r_i)(f_{i,j,k}^l - f_{i,j,k}^h), \quad (4.6)$$

onde $\Phi(r_i)$ é denominado limitador de fluxo e dado por exemplo como

$$\Phi(r_i) = \frac{r_i + |r_i|}{1 + r_i}, \quad (4.7)$$

e r_i é representado por

$$r_i = \frac{f_{i,j,k} - f_{i-1,j,k}}{f_{i+1,j,k} - f_{i,j,k}}. \quad (4.8)$$

Derivadas espaciais de segunda ordem, ou termos de caráter difusivo, tem sua discretização por diferenças centrais:

$$\left(\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}\right)_{i,j,k} \cong \frac{f_{i+1,j,k} - 2f_{i,j,k} + f_{i-1,j,k}}{(\Delta x)^2} \quad (4.9)$$

$$\left(\frac{\partial^2 f}{\partial y^2}\right)_{i,j,k} \cong \frac{f_{i,j+1,k} - 2f_{i,j,k} + f_{i,j-1,k}}{(\Delta y)^2} \quad (4.10)$$

$$\left(\frac{\partial^2 f}{\partial z^2}\right)_{i,j,k} \cong \frac{f_{i,j,k+1} - 2f_{i,j,k} + f_{i,j,k-1}}{(\Delta z)^2} \quad (4.11)$$

Para todas as aproximações acima, consideramos $\Delta x = \frac{x_{i+1} - x_{i-1}}{2}$, $\Delta y = \frac{y_{j+1} - y_{j-1}}{2}$, $\Delta z = \frac{z_{k+1} - z_{k-1}}{2}$.

A seguir, define-se uma malha sobre a qual será calculada a solução aproximada.

4.2 Obtenção da malha computacional

Escolhemos uma malha não uniforme, com refinamento onde os gradientes das variáveis dependentes são elevados. O fator de concentração é 1,05, e a malha contém 149 nós na direção x e 51 nas direções y e z ; uma representação da secção longitudinal (2D) da malha é observada na Figura 4.1.

A Figura 4.2 apresenta a geometria onde o jato está confinado; é um paralelepípedo com dimensões $b = 1$, $L = 11$. O jato de combustível é ejetado de um tubo de diâmetro $d = 0,05$ e raio r^* , em torno dele encontra-se o *pilot* sendo ali posicionadas pequenas chamas que servem para estabilizar o jato.

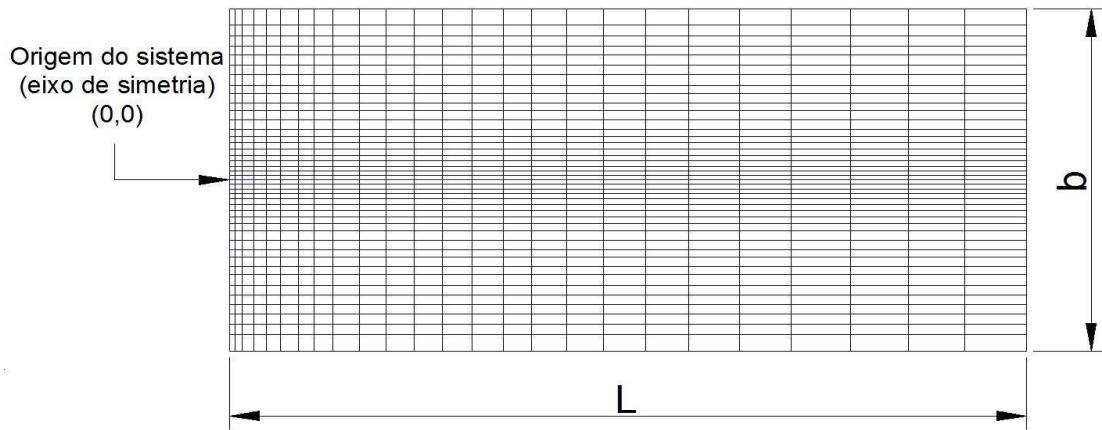


Figura 4.1: Representação de uma secção longitudinal (2D) da malha.

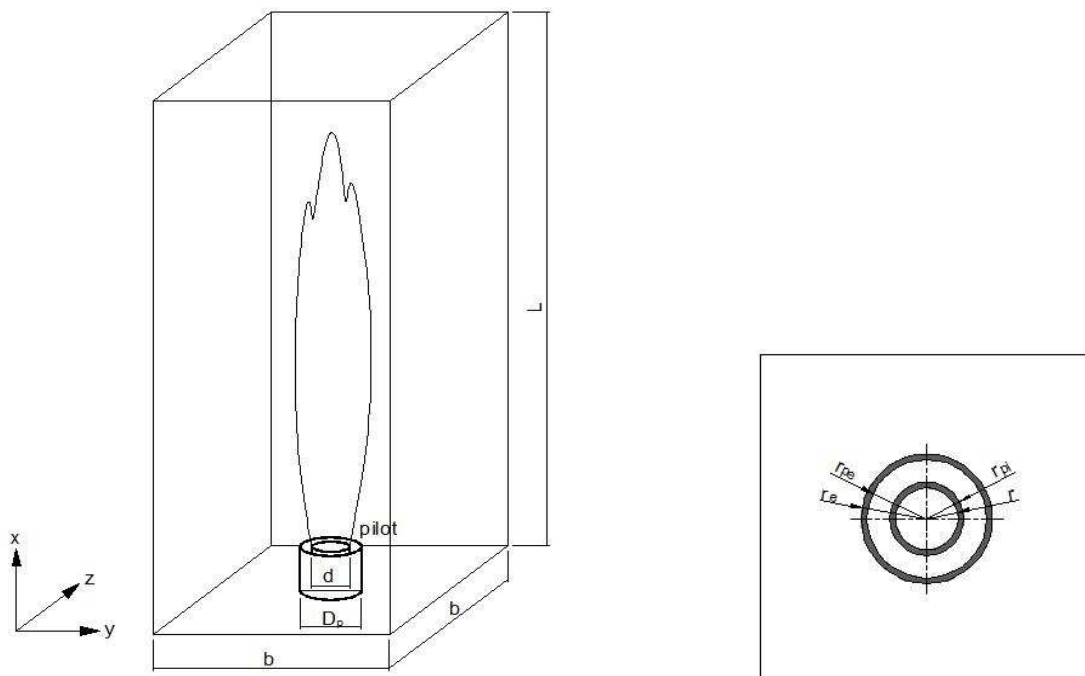


Figura 4.2: Representação da forma do queimador utilizado na simulação (esquerda). Uma visualização da base do queimador (direita).

4.3 Condições iniciais e de contorno

Como as equações diferenciais parciais representam um modelo físico, será preciso adicionar condições auxiliares de modo a caracterizar melhor a situação modelada. Essas condições são denominadas, dependendo do problema, de condições iniciais e de contorno, e a sua adequada implementação é fundamental para se obter uma solução numérica de boa qualidade. A condição inicial é dada em $t = 0$ para todas as variáveis dependentes nos pontos espaciais. Para as condições de contorno devemos ter alguma informação física, para todo tempo t , das variáveis dependentes no contorno da região limitando o escoamento.

Considere o domínio dado por $\Omega = \{(x, y, z) \in \mathbb{R}^3 : 0 \leq x \leq 11, 0 \leq y \leq 1, 0 \leq z \leq 1\}$; definimos as condições iniciais como

$$p(x, y, z, 0) = 1, \text{ em } \Omega \quad (4.12)$$

$$v_1(x, y, z, 0) = 0,01, \text{ em } \Omega \quad (4.13)$$

$$v_2(x, y, z, 0) = 0, \text{ em } \Omega \quad (4.14)$$

$$v_3(x, y, z, 0) = 0, \text{ em } \Omega \quad (4.15)$$

$$Z(x, y, z, 0) = \begin{cases} 1, & \text{se } 0 \leq x \leq 0,5 \text{ e } \sqrt{y^2 + z^2} \leq r^* \text{ (jato)} \\ 0, & \text{caso contrário} \end{cases} \quad (4.16)$$

$$T(x, y, z, 0) = 1, \text{ em } \Omega \quad (4.17)$$

$$Y_{CH_4}(x, y, z, 0) = \begin{cases} 0,16, & \text{se } 0 \leq x \leq 0,5 \text{ e } \sqrt{y^2 + z^2} \leq r^* \text{ (jato)} \\ 0, & \text{caso contrário} \end{cases} \quad (4.18)$$

$$Y_{O_2}(x, y, z, 0) = 0,23, \text{ em } \Omega \quad (4.19)$$

$$Y_{CO_2}(x, y, z, 0) = 0, \text{ em } \Omega \quad (4.20)$$

$$Y_{H_2O}(x, y, z, 0) = 0, \text{ em } \Omega \quad (4.21)$$

Considerando $r = \sqrt{y^2 + z^2}$, as condições de contorno para $t \in (0, T]$ são:

- pressão p :

$$\left\{ \begin{array}{l} p = 1, \text{ em } x = 11 \quad \forall y, z \in \Omega \\ \frac{\partial p}{\partial x} = 0, \text{ em } x = 0, \quad \forall y, z \in \Omega \\ \frac{\partial p}{\partial y} = 0, \text{ em } y = -0,5 \text{ e } y = 0,5, \quad \forall x, z \in \Omega \\ \frac{\partial p}{\partial z} = 0, \text{ em } z = -0,5 \text{ e } z = 0,5, \quad \forall x, y \in \Omega \end{array} \right. \quad (4.22)$$

- velocidade na direção x , v_1 :

$$\left\{ \begin{array}{l} v_1 = 1(1 - \frac{r}{r^*}), \text{ em } 0 \leq x \leq 0,5, \quad 0 \leq r \leq r^* \text{ (jato)} \\ v_1 = 0, \text{ em } 0 \leq x \leq 0,5, \quad r^* < r \leq r_{pi} \text{ (parede interna do pilot)} \\ v_1 = 0,01, \text{ em } 0 \leq x \leq 0,5, \quad r_{pi} < r \leq r_{pe} \text{ (pilot)} \\ v_1 = 0, \text{ em } 0 \leq x \leq 0,5, \quad r_{pe} < r \leq r_e \text{ (parede externa do pilot)} \\ v_1 = 0,01, \text{ em } x = 0, \quad r > r_e \\ \frac{\partial v_1}{\partial x} = 0, \text{ em } x = 11, \quad \forall y, z \in \Omega \\ \frac{\partial v_1}{\partial y} = 0, \text{ em } y = -0,5 \text{ e } y = 0,5, \quad \forall x, z \in \Omega \\ \frac{\partial v_1}{\partial z} = 0, \text{ em } z = -0,5 \text{ e } z = 0,5, \quad \forall x, y \in \Omega \end{array} \right. \quad (4.23)$$

- velocidade na direção y , v_2 :

$$\left\{ \begin{array}{l} v_2 = 0, \text{ em } 0 \leq x \leq 0,5, \quad 0 \leq r \leq r^* \text{ (jato)} \\ v_2 = 0, \text{ em } 0 \leq x \leq 0,5, \quad r^* < r \leq r_{pi} \text{ (parede interna do pilot)} \\ v_2 = 0, \text{ em } 0 \leq x \leq 0,5, \quad r_{pi} < r \leq r_{pe} \text{ (pilot)} \\ v_2 = 0, \text{ em } 0 \leq x \leq 0,5, \quad r_{pe} < r \leq r_e \text{ (parede externa do pilot)} \\ v_2 = 0, \text{ em } x = 0, \quad r > r_e \\ \frac{\partial v_2}{\partial x} = 0, \text{ em } x = 11, \quad \forall y, z \in \Omega \\ \frac{\partial v_2}{\partial y} = 0, \text{ em } y = -0,5 \text{ e } y = 0,5, \quad \forall x, z \in \Omega \\ \frac{\partial v_2}{\partial z} = 0, \text{ em } z = -0,5 \text{ e } z = 0,5, \quad \forall x, y \in \Omega \end{array} \right. \quad (4.24)$$

- velocidade na direção z , v_3 :

$$\left\{ \begin{array}{l} v_3 = 0, \text{ em } 0 \leq x \leq 0,5, 0 \leq r \leq r^* \text{ (jato)} \\ v_3 = 0, \text{ em } 0 \leq x \leq 0,5, r^* < r \leq r_{pi} \text{ (parede interna do pilot)} \\ v_3 = 0, \text{ em } 0 \leq x \leq 0,5, r_{pi} < r \leq r_{pe} \text{ (pilot)} \\ v_3 = 0, \text{ em } 0 \leq x \leq 0,5, r_{pe} < r \leq r_e \text{ (parede externa do pilot)} \\ v_3 = 0, \text{ em } x = 0, r > r_e \\ \frac{\partial v_3}{\partial x} = 0, \text{ em } x = 11, \forall y, z \in \Omega \\ \frac{\partial v_3}{\partial y} = 0, \text{ em } y = -0,5 \text{ e } y = 0,5, \forall x, z \in \Omega \\ \frac{\partial v_3}{\partial z} = 0, \text{ em } z = -0,5 \text{ e } z = 0,5, \forall x, y \in \Omega \end{array} \right. \quad (4.25)$$

- fração de mistura, Z :

$$\left\{ \begin{array}{l} Z = 1, \text{ em } 0 \leq x \leq 0,5, 0 \leq r \leq r^* \text{ (jato)} \\ Z = 0, \text{ em } 0 \leq x \leq 0,5, r^* < r \leq r_{pi} \text{ (parede interna do pilot)} \\ Z = 0,27, \text{ em } 0 \leq x \leq 0,5, r_{pi} < r \leq r_{pe} \text{ (pilot)} \\ Z = 0, \text{ em } 0 \leq x \leq 0,5, r_{pe} < r \leq r_e \text{ (parede externa do pilot)} \\ Z = 0, \text{ em } x = 0, r > r_e \\ Z = 0, \text{ em } x = 11, \forall y, z \in \Omega \\ \frac{\partial Z}{\partial y} = 0, \text{ em } y = -0,5 \text{ e } y = 0,5, \forall x, z \in \Omega \\ \frac{\partial Z}{\partial z} = 0, \text{ em } z = -0,5 \text{ e } z = 0,5, \forall x, y \in \Omega \end{array} \right. \quad (4.26)$$

- fração de massa do CH_4 , Y_{CH_4} :

$$\left\{ \begin{array}{l} Y_{CH_4} = 0,16, \text{ em } 0 \leq x \leq 0,5, 0 \leq r \leq r^* \text{ (jato)} \\ Y_{CH_4} = 0, \text{ em } 0 \leq x \leq 0,5, r^* < r \leq r_{pi} \text{ (parede interna do pilot)} \\ Y_{CH_4} = 0,0432, \text{ em } 0 \leq x \leq 0,5, r_{pi} < r \leq r_{pe} \text{ (pilot)} \\ Y_{CH_4} = 0, \text{ em } 0 \leq x \leq 0,5, r_{pe} < r \leq r_e \text{ (parede externa do pilot)} \\ Y_{CH_4} = 0, \text{ em } x = 0, r > r_e \\ \frac{\partial Y_{CH_4}}{\partial z} = 0, \text{ em } x = 11, \forall y, z \in \Omega \\ \frac{\partial Y_{CH_4}}{\partial y} = 0, \text{ em } y = -0,5 \text{ e } y = 0,5, \forall x, z \in \Omega \\ \frac{\partial Y_{CH_4}}{\partial z} = 0, \text{ em } z = -0,5 \text{ e } z = 0,5, \forall x, y \in \Omega \end{array} \right. \quad (4.27)$$

- fração de massa do O_2 , Y_{O_2} :

$$\left\{ \begin{array}{l} Y_{O_2} = 0,23, \text{ em } 0 \leq x \leq 0,5, 0 \leq r \leq r^* \text{ (jato)} \\ Y_{O_2} = 0, \text{ em } 0 \leq x \leq 0,5, r^* < r \leq r_{pi} \text{ (parede interna do pilot)} \\ Y_{O_2} = 0, \text{ em } 0 \leq x \leq 0,5, r_{pi} < r \leq r_{pe} \text{ (pilot)} \\ Y_{O_2} = 0, \text{ em } 0 \leq x \leq 0,5, r_{pe} < r \leq r_e \text{ (parede externa do pilot)} \\ \frac{\partial Y_{O_2}}{\partial x} = 0, \text{ em } x = 0, r > r_e \\ Y_{O_2} = 0,23, \text{ em } x = 11, \forall y, z \in \Omega \\ \frac{\partial Y_{O_2}}{\partial y} = 0, \text{ em } y = -0,5 \text{ e } y = 0,5, \forall x, z \in \Omega \\ \frac{\partial Y_{O_2}}{\partial z} = 0, \text{ em } z = -0,5 \text{ e } z = 0,5, \forall x, y \in \Omega \end{array} \right. \quad (4.28)$$

- fração de massa do CO_2 , Y_{CO_2} :

$$\left\{ \begin{array}{l} Y_{CO_2} = 0, \text{ em } 0 \leq x \leq 0,5, 0 \leq r \leq r^* \text{ (jato)} \\ Y_{CO_2} = 0, \text{ em } 0 \leq x \leq 0,5, r^* < r \leq r_{pi} \text{ (parede interna do pilot)} \\ Y_{CO_2} = 0, \text{ em } 0 \leq x \leq 0,5, r_{pi} < r \leq r_{pe} \text{ (pilot)} \\ Y_{CO_2} = 0, \text{ em } 0 \leq x \leq 0,5, r_{pe} < r \leq r_e \text{ (parede externa do pilot)} \\ \frac{\partial Y_{CO_2}}{\partial x} = 0, \text{ em } x = 0, r > r_e \\ \frac{\partial Y_{CO_2}}{\partial x} = 0, \text{ em } x = 11, \forall y, z \in \Omega \\ \frac{\partial Y_{CO_2}}{\partial y} = 0, \text{ em } y = -0,5 \text{ e } y = 0,5, \forall x, z \in \Omega \\ \frac{\partial Y_{CO_2}}{\partial z} = 0, \text{ em } z = -0,5 \text{ e } z = 0,5, \forall x, y \in \Omega \end{array} \right. \quad (4.29)$$

- fração de massa do H_2O , Y_{H_2O} :

$$\left\{ \begin{array}{l} Y_{H_2O} = 0, \text{ em } 0 \leq x \leq 0,5, 0 \leq r \leq r^* \text{ (jato)} \\ Y_{H_2O} = 0, \text{ em } 0 \leq x \leq 0,5, r^* < r \leq r_{pi} \text{ (parede interna do pilot)} \\ Y_{H_2O} = 0, \text{ em } 0 \leq x \leq 0,5, r_{pi} < r \leq r_{pe} \text{ (pilot)} \\ Y_{H_2O} = 0, \text{ em } 0 \leq x \leq 0,5, r_{pe} < r \leq r_e \text{ (parede externa do pilot)} \\ \frac{\partial Y_{H_2O}}{\partial x} = 0, \text{ em } x = 0, r > r_e \\ \frac{\partial Y_{H_2O}}{\partial x} = 0, \text{ em } x = 11, \forall y, z \in \Omega \\ \frac{\partial Y_{H_2O}}{\partial y} = 0, \text{ em } y = -0,5 \text{ e } y = 0,5, \forall x, z \in \Omega \\ \frac{\partial Y_{H_2O}}{\partial z} = 0, \text{ em } z = -0,5 \text{ e } z = 0,5, \forall x, y \in \Omega \end{array} \right. \quad (4.30)$$

- temperatura, T :

$$\left\{ \begin{array}{l} T = 1, \text{ em } 0 \leq x \leq 0,5, 0 \leq r \leq r^* \text{ (jato)} \\ T = 0, \text{ em } 0 \leq x \leq 0,5, r^* < r \leq r_{pi} \text{ (parede interna do pilot)} \\ T = 6,395, \text{ em } 0 \leq x \leq 0,5, r_{pi} < r \leq r_{pe} \text{ (pilot)} \\ T = 0, \text{ em } 0 \leq x \leq 0,5, r_{pe} < r \leq r_e \text{ (parede externa do pilot)} \\ \frac{\partial T}{\partial x} = 0, \text{ em } x = 0, r > r_e \\ \frac{\partial T}{\partial x} = 0, \text{ em } x = 11, \forall y, z \in \Omega \\ \frac{\partial T}{\partial y} = 0, \text{ em } y = -0,5 \text{ e } y = 0,5, \forall x, z \in \Omega \\ \frac{\partial T}{\partial z} = 0, \text{ em } z = -0,5 \text{ e } z = 0,5, \forall x, y \in \Omega \end{array} \right. \quad (4.31)$$

A Figura 4.3 representa o fluxograma que descreve a seqüência de operações lógicas do algoritmo.

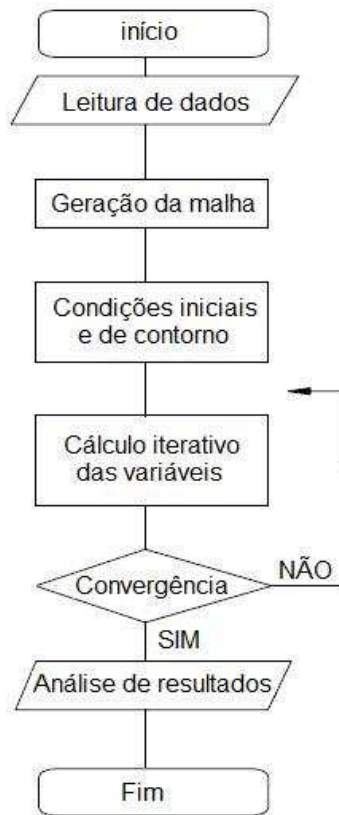


Figura 4.3: Fluxograma do código desenvolvido.

O esquema de discretização explícito por diferenças finitas centrais foi implementado, em linguagem FORTRAN, para analisar o comportamento da solução numérica. O sistema de equações resultante foi resolvido numericamente por um método iterativo simples.

5 RESULTADOS

Neste capítulo, apresentam-se as comparações de resultados analíticos e numéricos obtidos pela autora com dados experimentais divulgados pelo *Sandia National Laboratories* [4].

A chama utilizada para avaliação dos resultados computacionais e analíticos, chama Sandia D, é uma chama proposta e documentada pela *International Workshop on Measurement and Computation of Turbulent Nonpremixed Flames* (1997) [4]. A chama é de difusão turbulenta com as seguintes características: pelo bocal de 7.2mm de diâmetro é fornecida uma mistura de metano e ar na proporção volumétrica de 25% metano e 75% ar [38]. Concêntrico ao bocal do combustível são posicionadas chamas-piloto para a estabilização da chama [2]. A pré-mistura parcial de combustível com oxigênio é feita para evitar a formação de partículas como a fuligem, que inviabilizariam a precisão nas medições escalares.

Entre as chamas com pilot, a chama D é uma das preferidas para fazer a comparação experimental [35, 41, 42], pois possui alto número de Reynolds ($Re=22400$), o que assegura o regime turbulento da chama.

Em geral, o comprimento da chama é apresentado na forma adimensionalizada (usualmente em relação ao diâmetro do queimador) uma vez que isto facilita não só a comparação de resultados de vários autores, como também o estabelecimento de correlações para estas grandezas. Desta forma, as distâncias foram normalizadas pelo diâmetro de saída do jato de combustível d .

Nas próximas seções serão comparadas soluções para a fração de mistura, temperatura e fração de massa dos produtos e reagentes. Certa discrepância com relação aos resultados experimentais é esperada, devido ao fato que dados experimentais são estatísticos e a ordem do erro é de aproximadamente 10%. Note que a combustão turbulenta é um processo essencialmente transiente.

5.1 Comparação das soluções numérica e experimental para a fração de mistura

Começamos fazendo uma análise do comportamento da fração de mistura ao longo da chama, pois é através dela que determinamos outras quantidades como temperatura e fração de massa das espécies utilizando as equações Flamelet.

A Figura 5.1 representa a fração de mistura ao longo do eixo central; observa-se que há um decaimento da fração de mistura ao longo do eixo, pois o combustível emitido do bocal mistura-se com o ar vizinho por convecção e difusão para formar um campo de fração de mistura, que em condições estequiométricas, queima. Nas proximidades de x/d igual a 15, 35 e acima de 60 existem diferenças entre a solução numérica I e dados experimentais, porém se refinarmos a malha de $99 \times 51 \times 51$ para $149 \times 51 \times 51$ como mostra a solução numérica II, essa discrepância diminui, implicando que uma malha com refinamento no centro é a melhor.

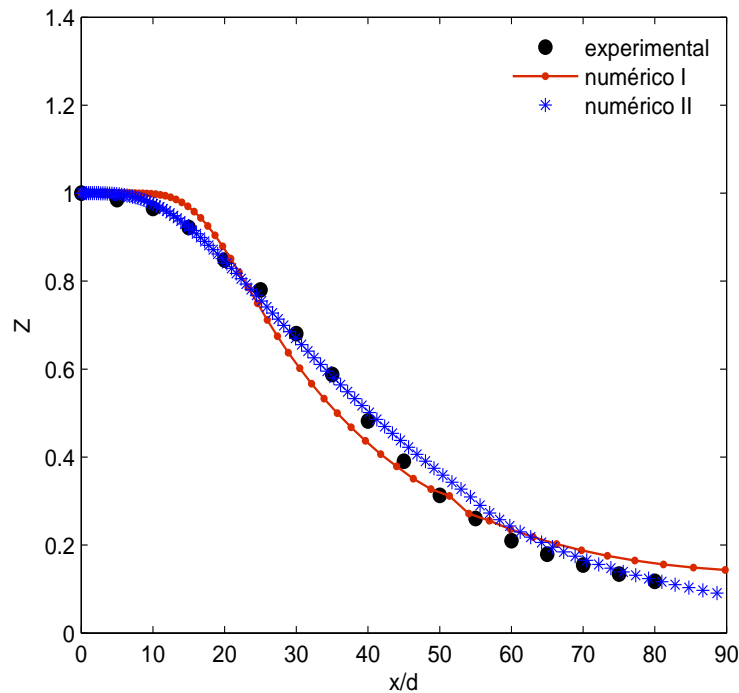


Figura 5.1: Fração de mistura ao longo da linha central para chama Sandia D.

Vamos analisar o comportamento da fração de mistura nas secções radiais, considerando-a em função da distância radial normalizada pelo diâmetro do jato e posicionada em $x/d = 15$, $x/d = 30$ e $x/d = 45$. Em todos os casos a fração de mistura decresce ao longo do raio e à medida que o fluido se afasta do bico injetor este decréscimo se torna mais lento. Fisicamente, isto significa que o combustível está sendo consumido à medida que se mistura em razão estequiométrica com o ar.

A Figura 5.2 (superior) representa a secção radial na posição $x/d = 15$, onde constatamos que a fração de mistura começa com quase 100% de combustível e depois começa a decair devido ao consumo deste à medida que se mistura em razão estequiométrica com o ar. A solução numérica e a experimental apresentam concordância de comportamento, porém existem diferenças entre resultados na posição entre $r/d = 0.5$ e $r/d = 1.5$, onde a influência da viscosidade turbulenta é grande, fazendo com que a solução numérica tenha um decaimento maior que a experimental.

Uma análise semelhante pode ser feita na Figura 5.2 (inferior), que representa a posição $x/d = 30$; apenas em $r/d = 0$ tem-se diferença apreciável entre a solução analítica e a experimental causada pela viscosidade.

A Figura 5.3 representa a fração de mistura em $x/d = 45$. Esta inicia com aproximadamente 38% e decai ao longo da secção radial. Maior discrepância surge à partir de $r/d = 3$, que se encontra mais afastada do bico injetor e onde a malha esta menos refinada; quanto mais grossa estiver a malha, maior é a influência da viscosidade turbulenta e, conseqüentemente, maior pode ser o erro nesta aproximação.

Nesta seção não foi feita nenhuma comparação com soluções analíticas, pois não foi desenvolvida uma solução analítica para a equação da fração de mistura; no entanto, para o leitor interessado indica-se uma solução dada por Peters [30].

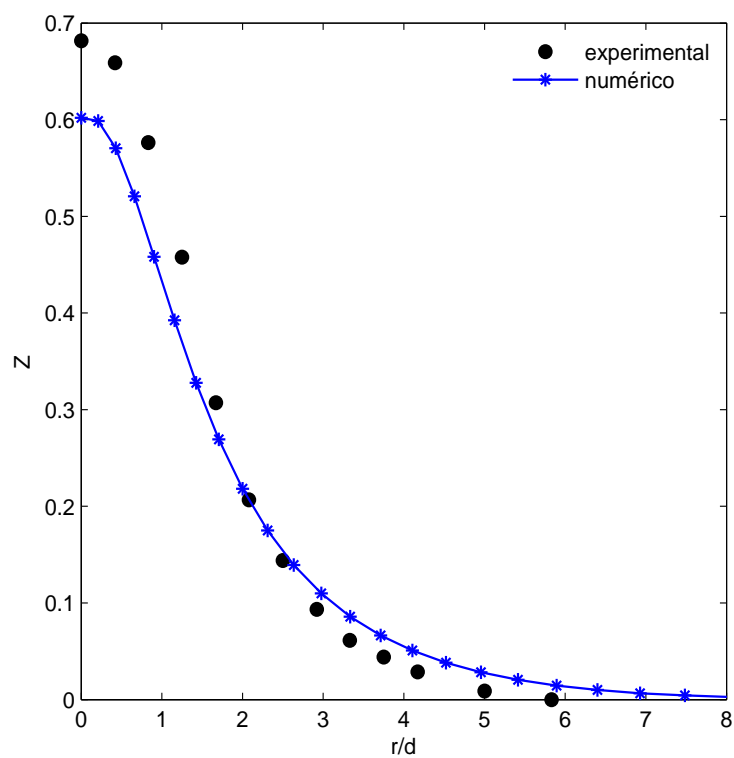
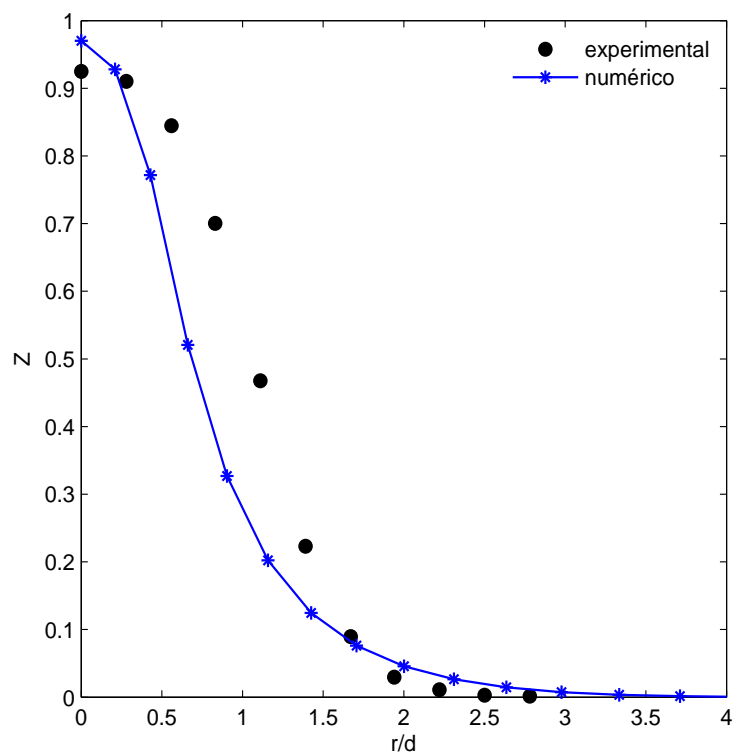


Figura 5.2: Fração de mistura ao longo do raio em $x/d = 15$ (superior) e $x/d = 30$ (inferior) para chama Sandia D.

Os perfis radiais representados nas Figuras 5.2 e 5.3 indicam que a chama pode ser razoavelmente aproximada por uma função Gaussiana.

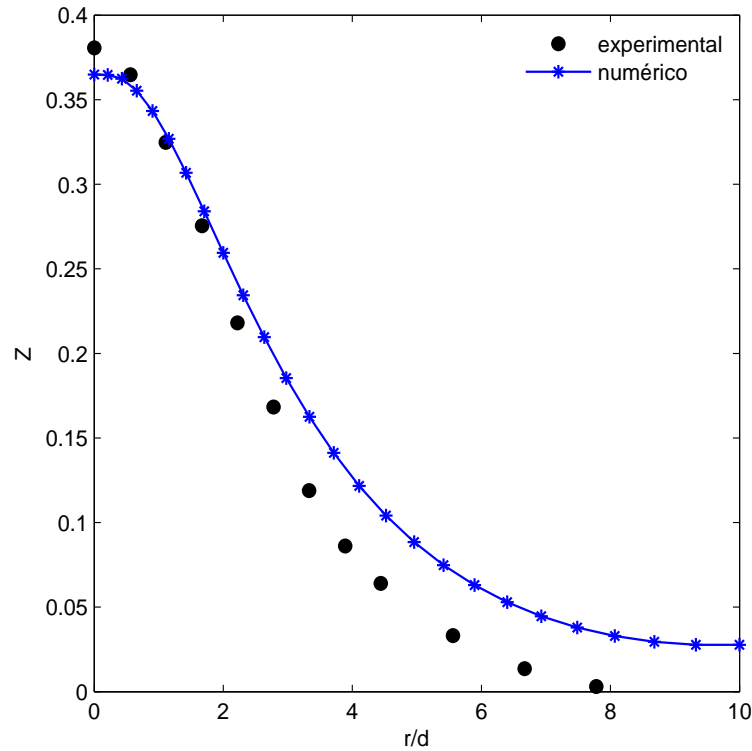


Figura 5.3: Fração de mistura ao longo do raio em $x/d = 45$ para chama Sandia D.

Nas próximas seções a comparação dos resultados incluirá a solução analítica desenvolvida pela autora no capítulo 3, juntamente com solução numérica e experimental.

5.2 Comparação das soluções analítica, numérica e experimental para a temperatura

Neste item, faz-se uma análise do comportamento da temperatura, primeiramente em relação a fração de mistura e depois com relação ao eixo central e nas seções radiais do queimador. A temperatura foi normalizada pelo seu

valor na saída do jato e a solução analítica da temperatura em função da fração de mistura é dada pelas equações (3.39) e (3.41).

A Figura 5.4 mostra a solução analítica, numérica e experimental da temperatura em função da fração de mistura; verifica-se boa concordância dos resultados. Conforme mostra a figura, a temperatura cresce até atingir seu valor máximo, onde temos a mistura estequiométrica, ou seja, condições ideais de queima. O valor da temperatura adimensionalizada 7 representa aproximadamente $2100K$.

A não suavidade do resultado analítico próximo a $Z \approx 0.34$ é devido ao fato que, a aproximação do termo exponencial leva em consideração as soluções de Burke Schumann, que são lineares.

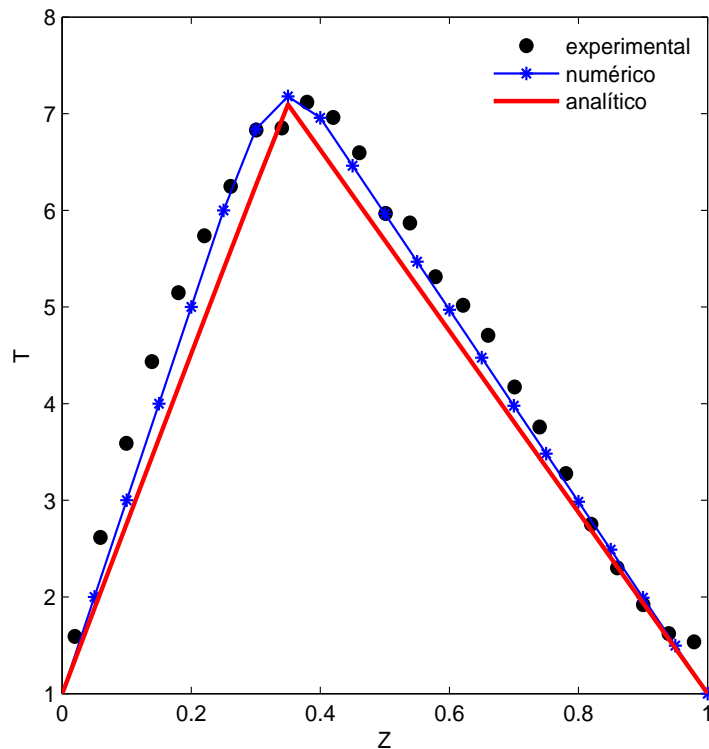


Figura 5.4: Comparação da temperatura no espaço da fração de mistura para Chama Sandia D.

A Figura 5.5 mostra o comportamento da temperatura ao longo do eixo central, também chamado eixo de simetria. Nesta figura também verificamos um crescimento da temperatura até atingir a posição de condição estequiométrica, onde efetivamente ocorre o processo de combustão de combustível e ar, de forma que os reagentes são consumidos e os produtos de combustão são produzidos em maiores proporções. O perfil numérico se aproxima mais do analítico que o experimental porque a fração de mistura é calculada numericamente pela equação (2.152), e através desta determinamos a solução analítica da temperatura e fração de massa em todo o domínio da chama.

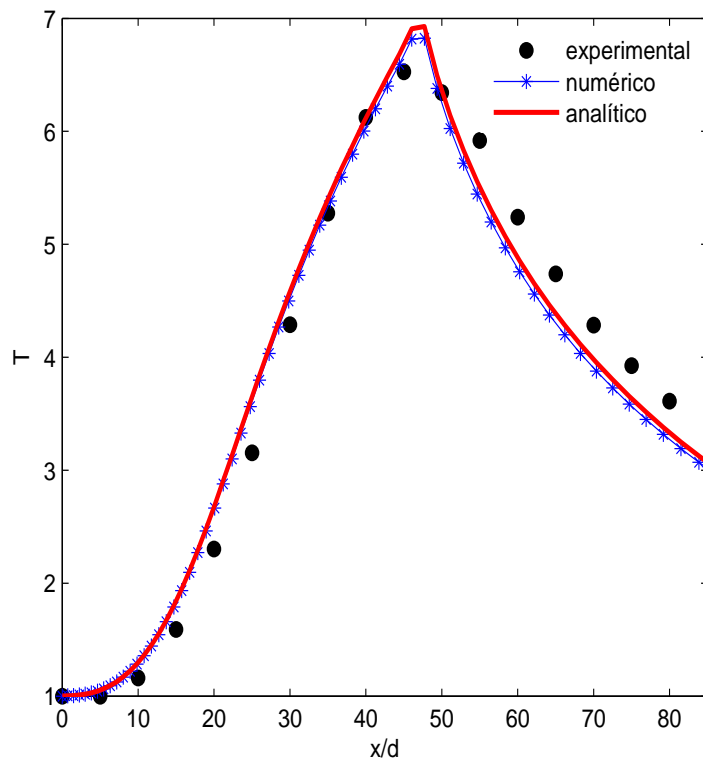


Figura 5.5: Temperatura ao longo da linha central para Chama Sandia D.

A Figura 5.6 mostra o perfil de temperatura radial na posição $x/d = 30$, onde observa-se discrepâncias entre as soluções pois nesta posição a malha está tornando-se mais grossa e também porque na solução numérica não consideramos a perda de calor por radiação.

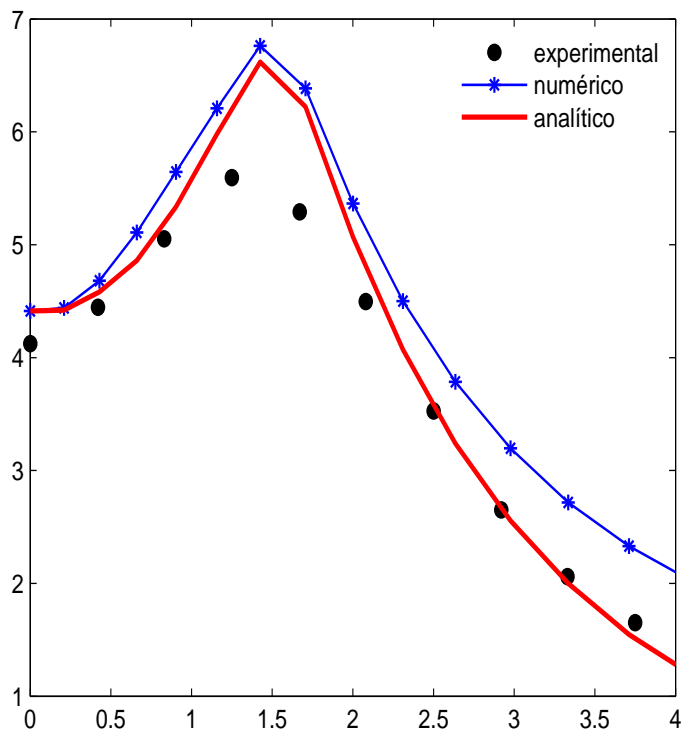


Figura 5.6: Temperatura ao longo do raio em $x/d = 30$ para Chama Sandia D.

Na próxima seção serão apresentados gráficos das concentrações de algumas espécies envolvidas no processo de combustão como, metano, oxigênio, vapor d'água e dióxido de carbono.

5.3 Comparação das soluções analítica, numérica e experimental para a fração mássica do CH_4 , O_2 , H_2O e CO_2

Nesta seção vamos comparar resultados obtidos para a fração de massa, na modelagem de uma chama difusiva turbulenta de metano/ar. Iniciamos com-

parando o perfil da fração mássica do metano (CH_4) ao longo da fração de mistura disposto na Figura 5.7; ela começa em zero pois em $Z = 0$ temos apenas oxigênio puro. A diferença entre os resultados é pequena, pois conseguiu-se um erro menor para o consumo de combustível; tal concordância pode ser observada também na Figura 5.8.

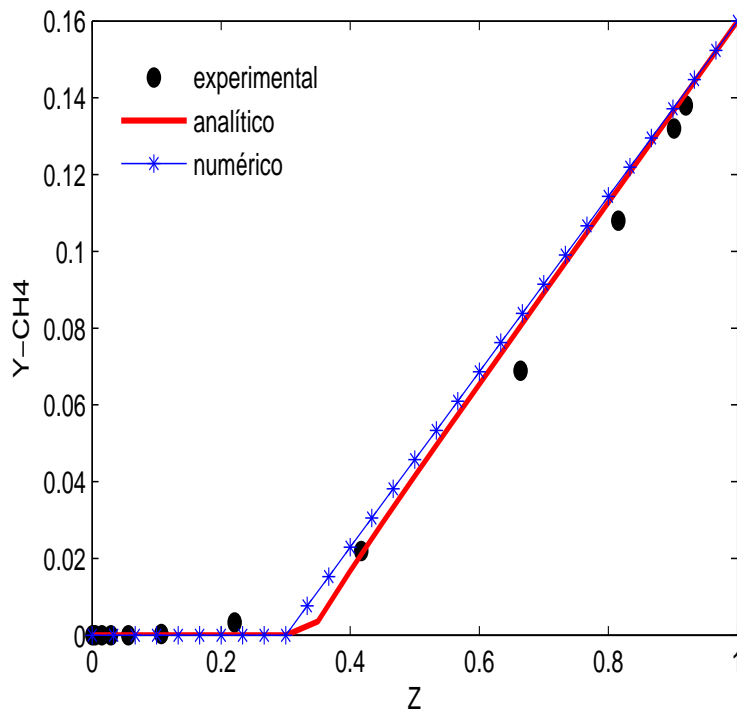


Figura 5.7: Fração mássica do CH_4 no espaço da fração de mistura para Chama Sandia D.

Na Figura 5.8 (superior) temos o perfil da fração mássica do CH_4 ao longo da linha central, onde o comportamento é semelhante ao da fração de mistura, como esperado, já que a fração de mistura representa o fluxo de combustível (CH_4) na mistura. Na Figura 5.8 (inferior) temos a fração mássica na secção radial posicionada em $x/d = 30$, que decresce rapidamente até a extinção da chama; a partir de $r/d = 1$ surgem diferenças em relação ao experimento, pois uma malha grossa acarreta perda de informação por difusão numérica.

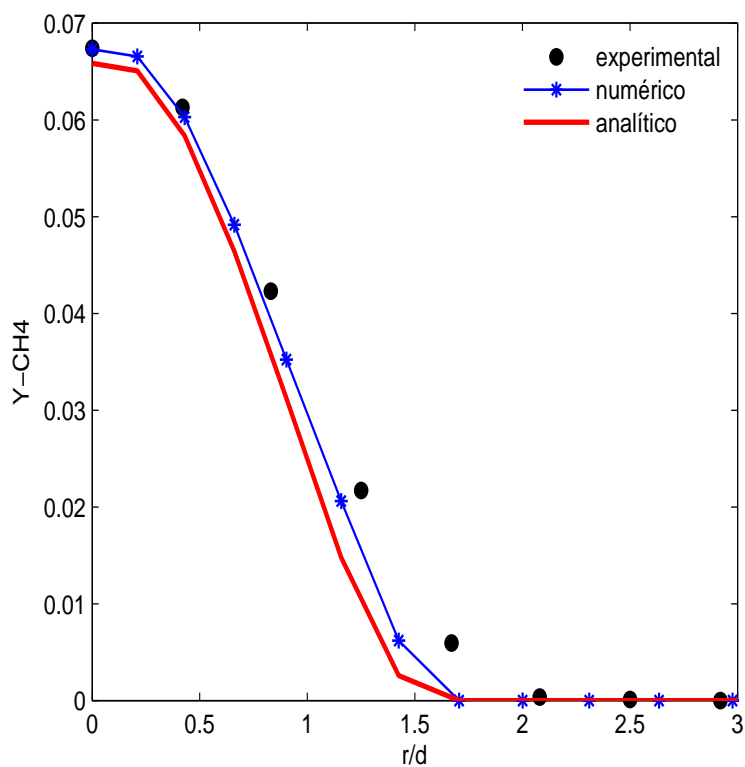
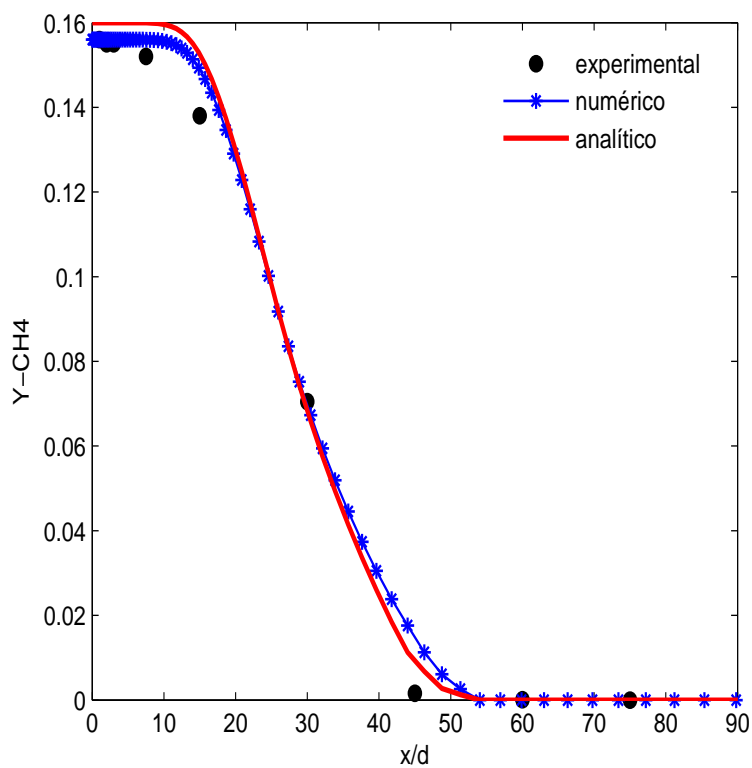


Figura 5.8: Fração mássica do CH_4 ao longo da linha central (superior) e na secção radial $x/d = 30$ (inferior) para Chama Sandia D.

Agora, vamos analisar os resultados do perfil de fração mássica do oxigênio (O_2). Na Figura 5.9 mostramos a evolução da fração mássica do O_2 ao longo da fração de mistura. Nota-se que há um decréscimo na fração mássica decorrente do consumo de oxigênio pela chama até atingir um ponto mínimo onde quase todo o oxigênio é consumido; esta é a condição estequiométrica. Logo depois ela volta a crescer pois estamos considerando que através do bico injetor também esteja saindo oxigênio junto com o combustível, devido à configuração da chama D mencionada anteriormente. A suavidade que existe nos dados experimentais na região próxima à zona estequiométrica ($Z \approx 0.4$) não está presente nos outros resultados como consequência da aproximação na exponencial da equação resolvida.

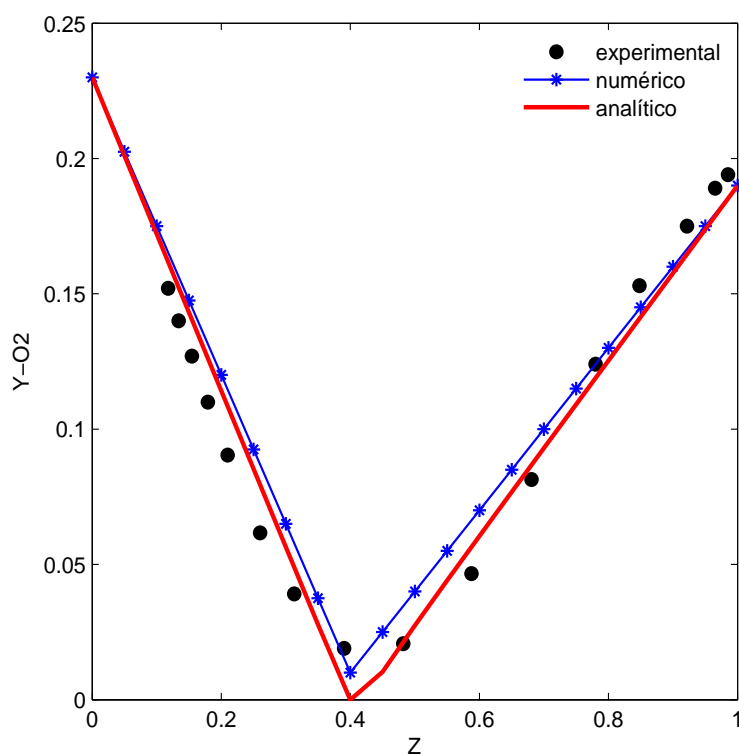


Figura 5.9: Fração mássica do O_2 no espaço da fração de mistura para Chama Sandia D.

A Figura 5.10 mostra o comportamento da fração mássica do O_2 ao longo do eixo de simetria; um decaimento da fração mássica acontece até atingir

a superfície estequiométrica; logo após ela volta a crescer pois é onde há menos combustível e a mistura combustível-ar torna-se rica em oxigênio, porém pobre em combustível.

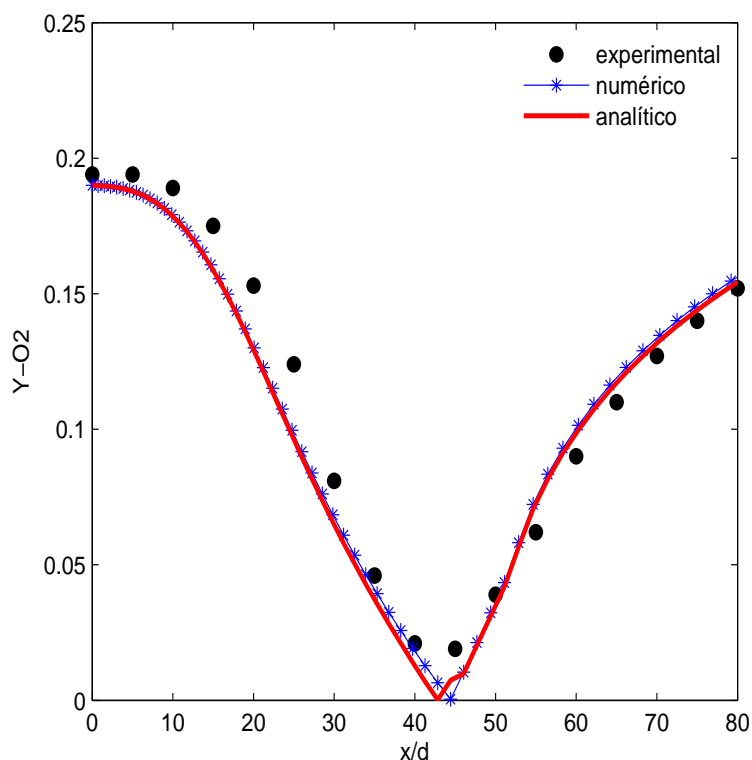


Figura 5.10: Fração mássica do O_2 ao longo da linha central para Chama Sandia D.

Da reação entre metano e ar surgem produtos de combustão como vapor d'água e o dióxido de carbono. A Figura 5.11 mostra a evolução da fração mássica do vapor d'água (H_2O) no espaço da fração de mistura, um escalar que vai de zero a um. Nos pontos $Z = 0$ e $Z = 1$ a concentração de H_2O é nula, pois nestes extremos temos ou combustível puro ($Z = 1$) ou oxigênio puro ($Z = 0$); a máxima concentração é alcançada na superfície estequiométrica. As soluções analítica, numérica e experimental estão em boa concordância.

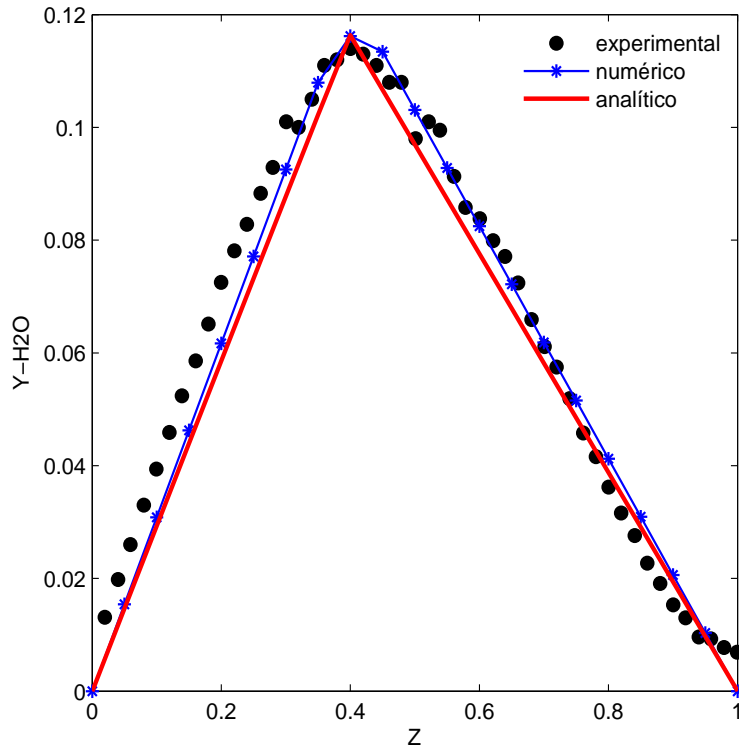


Figura 5.11: Fração mássica do H_2O no espaço da fração de mistura para Chama Sandia D.

A Figura 5.12 (superior) representa a fração mássica do vapor d'água ao longo do eixo de simetria; a solução numérica tem discrepância considerável com relação as outras soluções, provavelmente devido ao cálculo da viscosidade nesta região.

A Figura 5.12 (inferior) mostra a fração mássica do H_2O na secção radial em $x/d = 45$. Há decaimento da fração de massa ao longo do raio e as soluções experimental, analítica e numérica estão em razoável concordância. Devido as incertezas típicas dos valores das propriedades de transporte a alta temperatura, cerca da ordem de 10% ou mais, isto pode gerar incertezas de mesma ordem na estrutura da chama [50].

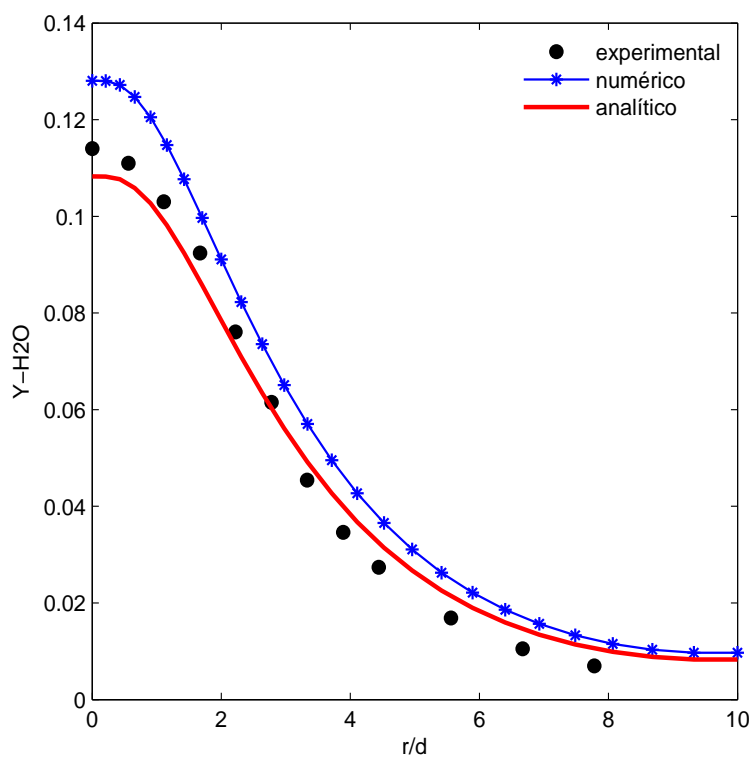
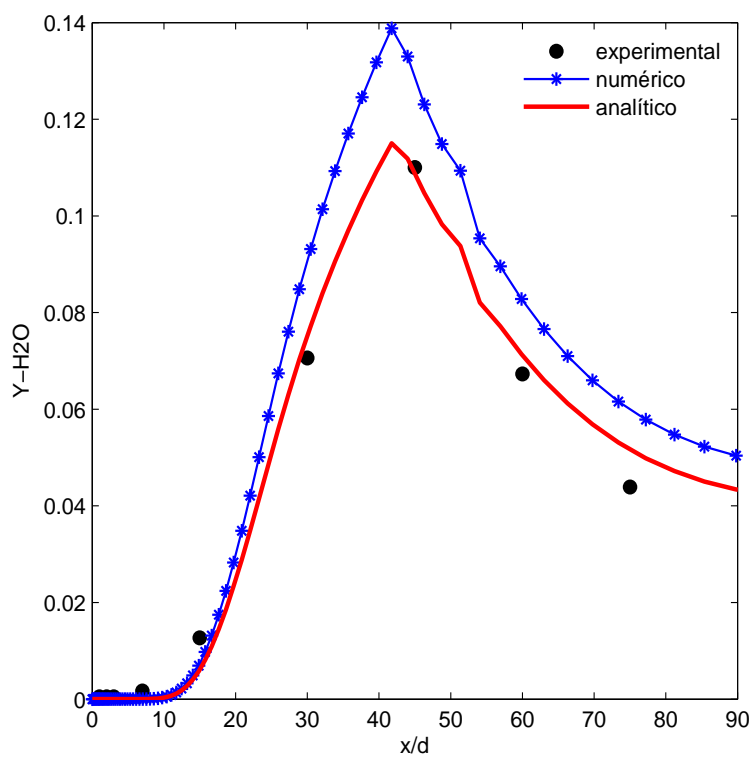


Figura 5.12: Fração mássica do H_2O ao longo da linha central (superior) e ao longo do raio em $x/d = 45$ (inferior) para Chama Sandia D.

Na Figura 5.13 tem-se a fração mássica do dióxido de carbono (CO_2) no espaço da fração de mistura. Nos seus extremos, em $Z = 0$ e $Z = 1$, não tem-se formação de produtos; verifica-se a concentração de CO_2 máxima quando se está na zona estequiométrica.

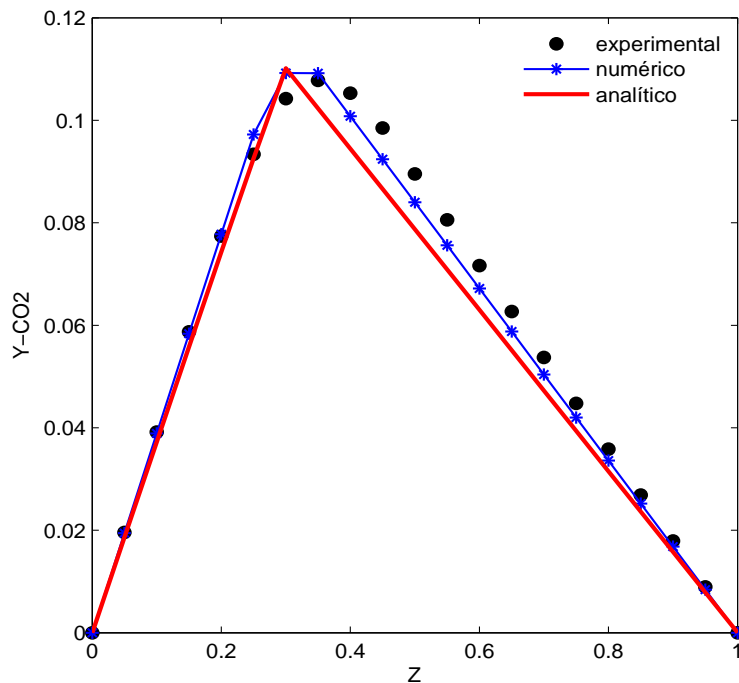


Figura 5.13: Fração mássica do CO_2 no espaço da fração de mistura para Chama Sandia D.

Na Figura 5.14 (superior) a fração mássica foi representada ao longo do eixo de simetria. Os resultados indicam que a fração mássica do CO_2 vai crescendo à medida que o jato se desenvolve, atingindo seu valor máximo próximo a $x/d = 45$, que é a posição de condição estequiométrica; após atingir este valor máximo, a fração mássica volta a decrescer.

Finalmente a Figura 5.14 (inferior) mostra o comportamento da fração mássica do CO_2 na secção radial em $x/d = 30$. A quantidade de dióxido de carbono cresce até atingir a condição estequiométrica e logo após decresce, semelhantemente ao que ocorre para a fração mássica de H_2O .

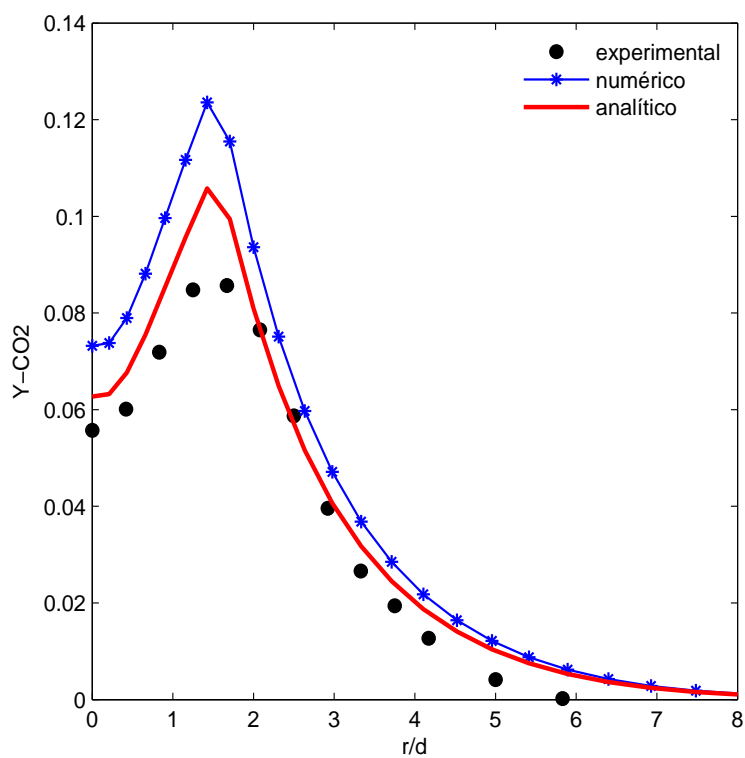
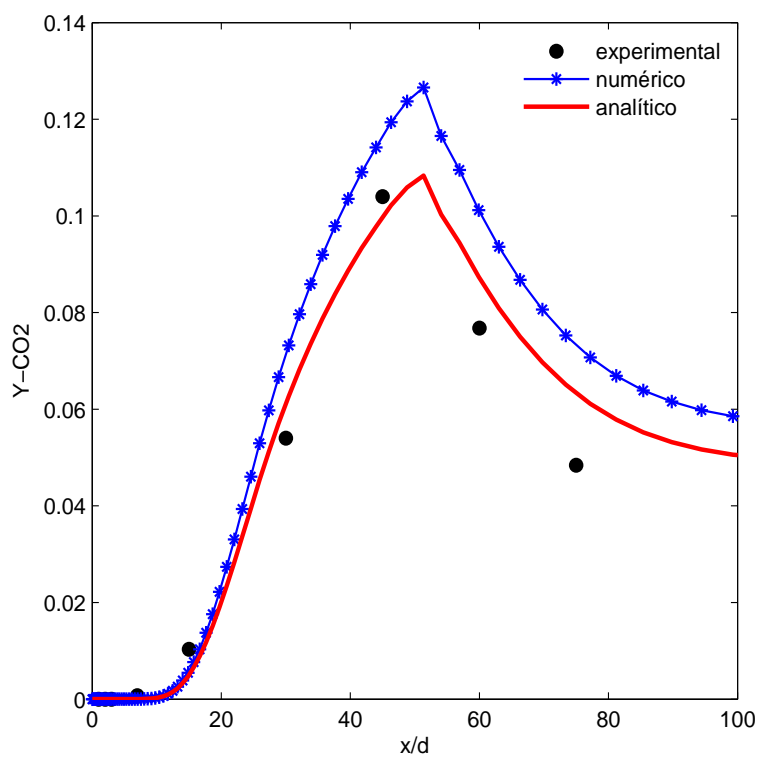


Figura 5.14: Fração mássica do CO_2 ao longo da linha central (superior) e ao longo do raio em $x/d = 30$ (inferior) para Chama Sandia D.

A diferença entre o resultado numérico e os demais poderia ser diminuída quando do uso de um outro modelo de viscosidade turbulento, como o de Germano por exemplo [19].

Assim, concluímos as comparações dos resultados analíticos, numéricos e experimentais para Chama Sandia D de metano.

6 CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS

O propósito deste trabalho foi o de aprofundar o conhecimento de chamas difusivas desenvolvendo soluções numéricas para uma chama de metano e obtendo soluções analíticas para as equações do modelo Flamelet Lagrangeano, ou seja, soluções para as equações da temperatura e da fração de massa em função da fração de mistura. Consideramos uma reação irreversível de um passo de mistura estequiométrica: $\nu_F CH_4 + \nu_O O_2 \longrightarrow \nu_{CO_2} CO_2 + \nu_{H_2O} H_2O$. A formulação foi baseada nas equações Flamelet para a química e fração de mistura para o fluxo.

Para desenvolver a solução analítica, para as equações do modelo Flamelet Lagrangeano, introduzimos algumas simplificações para transformar a EDP original, fortemente não linear, em uma mais acessível de tratar analiticamente. O problema foi dividido em duas partes, pois temos comportamentos diferentes para $Z < Z_{st}$ e $Z \geq Z_{st}$. Enfatizamos, ainda, que somente quando usamos um modelo apropriado, resultou em equações matemáticas que podem ser tratadas de modo mais acessível analiticamente e que ainda continuam representando o problema físico (de combustão) [44].

Na solução numérica, o código em FORTRAN em aprimoramento apresentou-se preciso e de baixo custo. Apesar de estarmos utilizando um domínio tridimensional o tempo computacional não afetou o desenvolvimento do trabalho. O método com número de Mach baixo com relaxação na massa específica, também ajudou a obter resultados de baixo custo.

A modelagem de chamas difusivas turbulentas usando Dinâmica dos Fluidos Computacional pode ser alcançada usando uma variedade de simulações numéricas. Entre elas, escolhemos LES, pois trabalhamos com malhas maiores, mais grossas que DNS. Para as escalas não resolvíveis na malha utilizou-se o modelo submalha de Smagorinsky, através do qual os gráficos demonstram a conformidade com o modelo de combustão.

Os resultados analíticos e numéricos foram comparados com dados experimentais. Verificamos, no capítulo anterior, que o comportamento global das soluções é concordante. Algumas discrepância entre os resultados devem-se a simplificações feitas no modelo e também porque os dados experimentais são estatísticos e a faixa de erro pode ser da ordem de 10%, já que o processo de queima numa chama é transiente.

O aumento contínuo do uso de energia contribui para o desenvolvimento de novas tecnologias para a obtenção de fontes de energia renováveis. Em especial, a biomassa pode ser gaseificada, o que significa a produção de gases como CO , H_2 e CH_4 para queima posterior. Os bio-combustíveis oferecem muitas vantagens como sustentabilidade, redução das emissões, segurança além de promover o desenvolvimento regional, especialmente no setor da agricultura. A biomassa também pode ser usada para produzir bio-álcool, como o metanol e o etanol, que estão se tornando cada vez mais populares como alternativas para motores de combustão interna a faísca. Desta forma, este trabalho corresponde ao início de uma contribuição maior a ser realizada na modelagem e simulação de chamas gasosas envolvendo bio-combustíveis.

Referências

- [1] AGRAWAL, A., AND PRASAD, A. K. Integral solution for the mean flow profiles of turbulent jets, plumes, and wakes. *Fluids Engineering 125* (2003), 813–822.
- [2] ARIMA, M. N., AND KRIEGER, G. C. Formação de CO e CO₂ em chamas de difusão de metano utilizando-se os métodos Eddy Breaky up, Eddy Dissipation e PDF com formas pré-assumidas. In *Encontro Nacional de Ciências Térmicas* (Porto Alegre-RS, 2000).
- [3] ASHURST, W. T. Vorticity generation in a nonpremixed flame sheet. *Lecture Notes in Physics 351* (1989), 1–21.
- [4] BARLOW, R., AND FRANK, J. Piloted CH₄/Air Flames C, D, E and F-Release 2.0. (2003), <http://www.ca.sandia.gov/TNF>.
- [5] BOERSMA, B. J. Direct Numerical Simulation of a turbulent reacting jets. *CTR-Annual Research Briefs* (1999), 59–72.
- [6] BOERSMA, B. J., AND LELE, S. K. Large Eddy Simulation of compressible turbulent jets. *CTR-Annual Research Briefs* (1999), 365–377.
- [7] BOYCE, W. E., AND DIPRIMA, R. C. *Equações Diferenciais Elementares e Problemas de Valores de Contorno*, 7th ed. LTC, 2002.
- [8] BUCKMASTER, J. D. *The Mathematics of Combustion*. Siam, 1985, ch. An Introduction to Combustion Theory, pp. 3–46.
- [9] BURCAT, A. *Combustion Chemistry*. Springer-Verlag, 1984, ch. Thermochemical Data for Combustion Calculations.
- [10] BURKE, S. P., AND SHUMANN, T. E. W. Difusion flames 1st symp. (int) on combustion. *First Symposium (International) on Combustion, The Combustion Institute* (1928), 2–11.

- [11] COOK, A. W., RILEY, J. J., AND KOSÁLY, G. A laminar flamelet approach to subgrid-scale chemistry in turbulent flows. *Combustion and Flame* 109 (1997), 332–341.
- [12] CRISTALDO, C. F. C. *Solução Numérica de uma Chama Difusiva e sua Validação*. Dissertação de mestrado, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2008.
- [13] DE BORTOLI, A. L. Large Eddy Simulation of a confined jet diffusion flame using a Finite Difference Method. *Progress in Computational Fluid Dynamics* 8 (2008), 379–383.
- [14] DE BORTOLI, A. L. Analytical/numerical solution for confined jet diffusion flame (Sandia Flame C). *Latin American Applied Research* 39 (2009), 157–163.
- [15] FACHINI, F. F. Extended Shvab-Zel’dovich formulation for multicomponent fuel diffusion flames. *International Journal of Heat and Mass Transfer* 50 (2007), 1035–1048.
- [16] FERZIGER, J. H., AND PERIC, M. *Computational Methods for Fluid Dynamics*, 3rd ed. Springer, 2001.
- [17] FLOHR, P., AND PITSCH, H. A turbulent flame speed closure model for LES of industrial burner flows. *CTR-Proceedings of the Summer Program* (2000), 169–179.
- [18] GAYDON, A. G., AND WOLFARD, H. G. *Flames: Their Structure, Radiation and Temperature*, 4th ed. Chapman and Hall, 1979.
- [19] GERMANO, M., PIOMELLI, U., MOIN, P., AND CABOT, W. H. A dynamic subgrid-scale eddy viscosity model. *Physics of Fluids A* 3 (1991), 1760–1765.
- [20] GOTTLIEB, S., AND SHU, C. W. Total variation diminishing Runge-Kutta schemes. *Mathematics of Computation* 67 (1998), 73–85.

- [21] HUGHES, W. F., AND BRIGHTON, J. A. *Dinâmica dos Fluidos*. McGraw-Hill, 1979.
- [22] KONZEN, P. H. A. *Estudo de um Modelo Convectivo-Difusivo-Reativo em Combustão baseado no Método de Elementos Finitos*. Dissertação de mestrado, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre-RS, março 2006.
- [23] KUO, K. K. *Principles of Combustion*. John Wiley and Sons, Inc., 2006.
- [24] LAW, C. K. Heat and mass transfer in combustion: Fundamental concepts and analytical techniques. *Progress in Energy and Combustion Science 10* (1984), 295–318.
- [25] LAW, C. K. *Combustion Physics*. Cambridge University Press, USA, 2006.
- [26] LESIEUR, M., MÉTAIS, O., AND COMTE, P. *Large-Eddy Simulations of Turbulence*. Cambridge University Press, USA, 2005.
- [27] LIBBY, P. A., AND WILLIAMS, F. A. Turbulent flows involving chemical reactions. *Annu. Rev. Fluid Mech.*, 8 (1976), 351–376.
- [28] LIÑÁN, A. *Fluid Dynamical Aspects of Combustion Theory*, vol. 223. Longman Scientific and Technical, United Kingdom, 1991, ch. The structure of diffusion flames, pp. 11–29.
- [29] PETERS, N. Laminar diffusion flamelet models in non-premixed turbulent combustion. *Progress in Energy and Combustion Science 10* (1984), 319–339.
- [30] PETERS, N. *Fifteen Lectures on Laminar and Turbulent Combustion*. Ercoftac Summer School, 1992.
- [31] PETERS, N. *Turbulent Combustion*. Cambridge University Press, 2006.
- [32] PETERS, N. Multiscale combustion and turbulence. *Proceedings of the Combustion Institute 32* (2009), 1–25.

- [33] PITSCH, H. Unsteady flamelet modeling of differential diffusion in turbulent jet diffusion flames. *Combustion and Flame* 123 (2000), 358–374.
- [34] PITSCH, H. Improved pollutant predictions in large-eddy simulations of turbulent nonpremixed combustion by considering scalar dissipation rate fluctuations. *Proceedings of the Combustion Institute* 29 (2002), 1971–1978.
- [35] PITSCH, H., AND STEINER, H. Large-eddy simulation of a turbulent piloted methane/air diffusion flame (Sandia Flame D). *Physics of Fluids* 12 (2000), 2541–2554.
- [36] POINSOT, T., AND VEYNANTE, D. *Theoretical and Numerical Combustion*, 2nd ed. Edward, 2005.
- [37] POLYANIN, A. D. Exact solutions of nonlinear sets of equations of the theory of heat and mass transfer in reactive media and mathematical biology. *Theoretical Foundations of Chemical Engineering* 38 (2004), 622–635.
- [38] RAMAN, V., AND PITSCH, H. LES/filtered-density function simulation of turbulent combustion with detailed chemistry. *CTR-Annual Research Briefs* (2005), 297–309.
- [39] RAWAT, R., PITSCH, H., AND RIPOLL, J. P. Large-eddy simulation of pool fires with detailed chemistry using an unsteady flamelet model. *CTR-Proceedings of Summer Program* (2002), 357–367.
- [40] RILEY, J. J., METCALFE, R. W., AND ORSZAG, S. A. Direct numerical simulation of chemically reacting turbulent mixing layers. *Physics of Fluids* 29 (1986), 406–423.
- [41] SCHNEIDER, C., DREIZLER, A., JANICKA, J., AND HASSEL, E. P. Flow field measurements of stable and locally extinguishing hydrocarbon-fuelled jet flames. *Combustion and Flame* 135 (2003), 185–190.

- [42] SHEIKHI, M. R. H., DROZDA, T. G., GIVI, P., JABERI, A. F., AND POPE, S. B. Large eddy simulation of a turbulent nonpremixed piloted methane jet flame (Sandia Flame D). *Proceedings of the Combustion Institute 30* (2005), 549–556.
- [43] TARRAZO, E. F., SÁNCHEZ, A. L., LIÑÁN, A., AND WILLIAMS, F. A. A simple one-step chemistry model for partially premixed hydrocarbon combustion. *Combustion and Flame 143* (2006), 32–38.
- [44] VAZ, F. A., AND DE BORTOLI, A. L. Development of analytical-numerical tools to analyse diffusion flames. *to appear*.
- [45] VAZ, F. A., AND DE BORTOLI, A. L. Analytical, numerical and experimental results for piloted jet diffusion flame (Sandia Flame D). In *Anais do XXXII Congresso Nacional de Matemática Aplicada e Computacional* (Cuiabá-MT, setembro 2009), vol. 2, UFMT, pp. 768–773.
- [46] VAZ, F. A., AND DE BORTOLI, A. L. An analytical solution for the Lagrangian Flamelet model equations. In *70° Seminário Brasileiro de Análise* (São Paulo-SP, novembro 2009), USP.
- [47] VAZ, F. A., AND DE BORTOLI, A. L. Analytical/numerical solution for the Lagrangian Flamelet model equations. In *3rd South Conference on Computational Modeling* (Rio Grande-RS, novembro 2009), vol. 3, FURG, pp. 24–29.
- [48] VEYNANTE, D., AND VERVISCH, L. Turbulent combustion modeling. *Progress in Energy and Combustion Science 28* (2002), 193–266.
- [49] WILLIAMS, F. A. *Combustion Theory: The Fundamental Theory of Chemically Reacting Flow Systems*, 2nd ed. Perseus Books, Massachusetts, 1985.
- [50] WILLIAMS, F. A. Progress in knowledge of flamelet structure and extinction. *Progress in Energy and Combustion Science 26* (2000), 657–682.