

MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO
UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA

SIMULAÇÃO NUMÉRICA DA
COMBUSTÃO DE METANO EM CÂMARA CILÍNDRICA UTILIZANDO O CFX 10.0

por

Bernardo Ronchetti

Dissertação para obtenção do Título de
Mestre em Engenharia

Porto Alegre, março de 2008

SIMULAÇÃO NUMÉRICA DA
COMBUSTÃO DE METANO EM CÂMARA CILÍNDRICA UTILIZANDO O CFX 10.0

por

Bernardo Ronchetti
Engenheiro mecânico

Dissertação submetida ao Corpo Docente do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, PROMEC, da Escola de Engenharia da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, como parte dos requisitos necessários para a obtenção do Título de

Mestre em Engenharia

Área de Concentração: Fenômenos do transporte

Orientador: Prof. Dr. Horácio Antônio Vielmo

Comissão de Avaliação:

Prof. Dr. Francis Henrique Ramos França

Prof. Dr. Adriane Prisco Petry

Prof. Dr. Cristiano Vitorino da Silva

Prof. Dr. Flávio José Lorini
Coordenador do PROMEC

Porto Alegre, 07, abril de 2008.

“A melhor maneira de prever o futuro é inventá-lo.”

Alan Kay

AGRADECIMENTOS

Agradeço aos meus pais amados, Solani e Bruno, que oportunizaram ótimos exemplos de dedicação, esforço, amor e trabalho para o bem comum e especialmente ao de nossa família, mostrando-me que a evolução do ser é estreitamente ligada ao interesse pelo aumento de seu conhecimento sobre o ambiente em que vive e as leis que regem os fenômenos deste. Eles são a luz de minha vida.

Agradeço ao companheirismo, compreensão, carinho e aos ótimos anos de convivência de Gabriela que é uma ótima pessoa e me acompanhou todos estes anos de mestrado.

Agradeço em especial ao meu orientador Horácio Vielmo pela confiança e serenidade no tratamento de minha tese, eu agradeço imensamente a oportunidade que me foi concedida de trabalhar com ele desde o trabalho de diplomação até esta tese, permitindo o conhecimento de métodos e maneiras de pesquisar.

Agradeço ao Prof. Francis França que com serenidade e disposição auxiliou na realização deste trabalho.

Agradeço a empresa CIBER Equipamentos Rodoviários Ltda. pela concessão de períodos para o estudo e confiança no meu trabalho e lealdade. Agradeço a Walter Rauen pela confiança em permitir estes anos de divisão entre estudos e trabalho, igualmente agradeço as inúmeras oportunidades de crescimento que acabaram por refletir na maturação deste trabalho e da minha pessoa.

Agradeço por fim a família que tenho que sempre me apoiou e aos amigos que direta ou indiretamente participaram desta conquista.

RESUMO

As ferramentas de simulação numérica têm evoluído consideravelmente nos últimos vinte anos e aproximam-se cada vez mais do dia a dia das soluções de Engenharia, fornecendo diversas funcionalidades que o Engenheiro pode implementar para a previsão de fenômenos, antes exclusivamente compreendidos experimentalmente. Mesmo sendo muito úteis e razoavelmente compreensíveis para os usuários, estas ferramentas não compreendem toda a gama de adaptações necessárias para resolver casos específicos, e podem trazer prejuízos à compreensão do problema e até uma solução errônea do caso em questão. O objetivo do presente trabalho é utilizar uma ferramenta comercial de simulação numérica para a solução de dois casos de escoamentos reativos. Visa também discutir criticamente a solução obtida e apresentar uma maneira de aplicar os conhecimentos adquiridos na simulação de uma câmara de combustão real.

O primeiro estudo de caso é uma câmara cilíndrica experimentada e apresentada em 1994 por Garreton e Simonin. Trata-se de um caso semelhante a fornalhas de aquecimento d'água e em processos com caldeiras fumotubulares. O queimador é de jatos concêntricos utilizando gás natural e ar atmosférico como reagentes. Uma análise das soluções obtidas com diferentes modelos de turbulência é realizada e discutida para uma segunda abordagem, onde a influência das condições de contorno do domínio e dos modelos de radiação são abordadas.

O segundo estudo de caso é a câmara de combustão experimentada por Meier, 2000. A geometria e condições do caso assemelham-se a de combustores de turbinas a gás, incineradores e fornos industriais. O caso apresenta um escoamento muito turbulento e instável, de gás natural e ar atmosférico. Uma discussão sobre a metodologia de solução deste problema é feita para explorar os pontos comuns a soluções de combustores industriais, como por exemplo, o de um forno secador de minério rotativo.

Os diferentes resultados numéricos obtidos nos dois casos mostram que todos os modelos geram resultados pelo menos qualitativamente coerentes, mas apresentam erros numéricos razoáveis. A partir da discussão dos resultados apresenta-se uma proposta de modelagem para um caso prático envolvendo uma geometria mais complexa, e apontam-se os pontos de risco para análise dos resultados.

ABSTRACT

Numerical simulation tools have reasonably evolved in the last twenty years and are getting increasingly closer to routine Engineering solutions, providing features that the Engineer can use to predict phenomena that were previously only experimentally understood. Despite being useful and easy-to-understand, these tools do not include all adaptations required to solve specific cases, leading to misunderstanding of the problem and even to wrong solutions. The present study aimed at using a commercial CFD code for the solution of two reacting flow cases, critically discussing the solutions and presenting an application of acquired the knowledge in simulations of real combustion chambers.

The first case study was a cylindrical chamber, tested and presented in 1994 by Garreton and Simonin, which is similar to water-heating boilers and parallel tube furnaces. The burner uses concentric jets, with natural gas and atmospheric air as reactants. An analysis of the obtained solutions applying different turbulence models was carried out, and the solutions were discussed in a second approach on boundary conditions and radiation transfer models.

The second case study was the combustion chamber tested by Meier, 2000. Its geometry and boundary conditions are similar to those of gas turbine combustors, incinerators, and industrial furnaces. The chamber presents a strongly turbulent and unstable flow of natural gas and atmospheric air. The methodology to solve this problem was discussed, considering issues also found in solutions for industrial burners, such as those used in mineral rotatory dryers.

The different numerical results obtained in both cases show that all models provide at least qualitatively coherent results, but present numerical errors. Based on the discussion of the results, a proposal for modeling a practical case involving a much more complex geometry is presented, and risk issues for further result analysis are pointed out.

INDÍCE

1. INTRODUÇÃO.....	1
1.1. Escopo e objetivo do trabalho.....	3
2. REVISÃO CONCEITUAL E BIBLIOGRÁFICA.....	6
2.1. Termodinâmica Química.....	6
2.1.1 Calores de Reação e Formação.....	6
2.1.2. Equilíbrio Químico: 2ª Lei da Termodinâmica.....	9
2.2. CINÉTICA QUÍMICA.....	11
2.2.1. Taxas de Reação e sua Dependência da Temperatura.....	11
2.2.2. Reações Simultâneas Interdependentes e em Cadeia.....	13
2.3. CHAMAS DE DIFUSÃO.....	15
2.3.1 Jatos de Combustíveis Gasosos.....	15
2.3.2. Chamas Tubulentas.....	18
2.4. IGNIÇÃO.....	21
2.4.1. Ignição Forçada.....	23
2.5. MECANISMOS DETALHADOS DE OXIDAÇÃO DO METANO.....	24
2.6. SIMULAÇÃO NUMÉRICA DO PROCESSO DE COMBUSTÃO.....	27
2.6.1. Modelo de Reações Químicas Simplificadas.....	36
2.6.2. Modelo de Taxa de Reação por Quebra de Vórtices.....	37
2.6.3. Modelos de Função Densidade de Probabilidade.....	39
2.7. A IMPORTÂNCIA DA VALIDAÇÃO DA MODELAGEM.....	39
3. MODELAGEM MATEMÁTICA DOS PROCESSOS DE COMBUSTÃO.....	40
3.1 Equação de Conservação de Massa	40
3.2 Conservação da Quantidade de Movimento.....	41
3.3 Turbulencia.....	43
3.3.1 Modelo $k - \varepsilon$	48
3.3.2 Modelo $k - \omega$	48
3.3.3. Modelo BSL.....	49
3.3.4. Modelo SST.....	50
3.3.5. Modelos de Transporte das Tensões de Reynolds.....	51
3.3.6. Modelo SSG.....	54
3.3.7. Modelagem do Escoamento Próximo a Parede.....	54
3.4. EQUAÇÃO DE CONSERVAÇÃO DE ESPÉCIES QUÍMICAS.....	56

3.4.1. Termo Fonte do Transporte de Espécies Químicas.....	59
3.5 EQUAÇÃO DA ENERGIA.....	62
3.6. TRANSPORTE DA RADIAÇÃO.....	62
3.6.1 Modelo para Aproximação Direcional de Rosseland.....	63
3.6.2 Modelo para Aproximação Direcional P-1.....	63
3.6.3 Modelo para Aproximação Direcional Dtrm.....	64
3.6.4 Modelo para Aproximação Espectral de Gás Cinza	65
3.7. EQUAÇÃO DE TRANSPORTE DE UMA VARIÁVEL.....	66
3.8. MÉTODO NUMÉRICO DE SOLUÇÃO.....	67
3.9 IMPLEMENTAÇÃO DO ANSYS CFX.....	71
4. VALIDAÇÃO DA MODELAGEM MATEMÁTICA.....	74
4.1. Primeiro Caso de Estudo.....	74
4.2. Resultados.....	79
4.2.1. Análise de Ponto de Recolamento.....	79
4.2.2. Perfil de Damkohler.....	80
4.2.3. Tempo Computacional.....	81
4.2.4. Resultados sem Modelo de Radiação.....	81
4.2.5. Resultados Considerando Radiação.....	87
4.2.6. Resultados Considerando Radiação e Empuxo.....	93
4.2.7. Resultados Considerando a Exaustão de 600 mm.....	99
4.2.8. Resultados das Malhas Considerando Exaustão de 1200 mm	105
4.2.9. Discussão dos Resultados para o Primeiro Estudo de Caso.....	110
4.3. Segundo Estudo de Caso.....	113
4.4 Discussões e Conclusões Sobre as Análises dos Casos.....	130
4.5. Estudo de Caso Baseado nas Análises Feitas.....	130
5. CONCLUSÃO.....	139
5.1. Conclusões.....	139
5.2. Propostas de Futuros Trabalhos.....	142
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	147
ANEXOS.....	155
A.1 Exemplo de Reação Simultânea Hidrogênio-Iodina.....	155
A.2 Temperatura de Auto-Ignicão.....	156
A.3 Análise Térmica do Mecanismo de Propagação de Chama	160
A.4. Limites de Explosão e Características de Oxidação de Hidrocarbonetos.....	162

A.5. Avaliação da Altura da Chama de Jatos Gasosos a Partir da Teoria Cinética.....	164
A.6. Aproximação da Ordem de Grandeza e Relações entre Velocidade Turbulenta e Laminar de Chama.....	166

LISTA DE SÍMBOLOS

Letras Romanas

A_k	Fator pré-exponencial []
A	Componente químico genérico[]
A_C	Área do cone [m ²]
a	Aceleração [m/s ²]
a	Tensor anisotropia para o modelo de turbulência SSG [-]
a_1	Constante modelo de turbulência BSL [-]
Br	Bromo []
c_p	Calor específico [kJ/kgK]
C_{comb}	Concentração de combustível na mistura [kmol/m ³]
$C_{\mu RS}$	Constante do modelo de turbulência SSG [-]
$C_{\varepsilon,1}$	Constante do modelo de turbulência $k - \varepsilon$ [-]
$c_{\varepsilon 1}$	Constante do modelo de turbulência SSG [-]
$C_{\varepsilon,2}$	Constante do modelo de turbulência $k - \varepsilon$ [-]
c_{e2}	Constante do modelo de turbulência SSG [-]
$C_{grafite}$	Carbono na forma de grafite [kmol/kg]
C_{r1}	Constante do modelo de turbulência SSG [-]
C_{r2}	Constante do modelo de turbulência SSG [-]
C_{r3}	Constante do modelo de turbulência SSG [-]
C_{r4}	Constante do modelo de turbulência SSG [-]
C_{r5}	Constante do modelo de turbulência SSG [-]
C_{μ}	Constante do modelo de turbulência $k - \varepsilon$ [-]
C_{s1}	Constante do modelo de turbulência SSG [-]
C_{s2}	Constante do modelo de turbulência SSG [-]
CH_4	Metano [kmol/kg]
CO	Monóxido de carbono [kmol/kg]

CO_2	Dióxido de carbono [kmol/kg]
c_p	Calor específico [J/kgK]
c_s	Constante do modelo de turbulência SSG [-]
D_i	Difusividade cinemática [m ⁵ /kgs]
Da	Número de Damkohler [-]
Da_{EXT}	Número de Damkohler limite onde ocorre extinção da chama [-]
Da_{LFA}	Número de Damkohler limite da chama laminar [-]
d_L	Espessura da chama laminar [m]
d_T	Espessura da chama turbulenta [m]
dn_A	Varição infinitesimal de moles do componente A [mol]
E_A	Energia de ativação [J/kmol]
F	Força [N]
F_1	Função de combinação modelo de turbulência BSL [-]
F_{21}	Função de combinação modelo de turbulência SST [-]
G	Função de Gibbs [J]
G_v	Radiação espectral incidente [W/m ²]
g	Função de Gibbs [j/mol]
g^0	Função de Gibbs no estado padrão [j/mol]
h	Altura do cone [m]
h	Entalpia específica [J/kg]
h_{tot}	Entalpia total [J/kg]
h_c	Coefficiente de troca por convecção [W/m ² K]
h_{rp}	Entalpia de reação [kJ/kg]
H	Entalpia [kJ/kg]
H	Hidrogênio
H^0	Entalpia no estado padrão [kJ/kg]
H_T^0	Entalpia no estado padrão a uma dada temperatura [kJ/kg]
I	Iodo [-]
I	Componente I [-]
$[I]$	Concentração do componente I [-]

I_b	Intensidade de emissão do corpo negro []
I_v	Intensidade de radiação espectral []
K	Constante de equilíbrio químico [-]
K_a	Coefficiente de absorção [-]
K_f	Constante equilíbrio químico da reação em avanço [-]
K_b	Constante equilíbrio químico da reação ao revés [-]
K_n	Índice de refração [-]
K_s	Coefficiente de espalhamento [-]
K_z	Número de Kozvashnyay
k	Energia cinética turbulenta [m ² /s ²]
k_B	Constante de Boltzman []
l	Escala de comprimento da turbulência [m]
l_d	Comprimento de mistura característico [m]
l_t	Escala integral de comprimento num escoamento [m]
l_k	Escala de Kolmogorov [m]
l_w	Escala de comprimento da parede [m]
l_λ	Escala de comprimento da microestruturas turbulentas [m]
l_z	Espessura da região de mistura [m]
M	Corpo externo na reação[-]
M_{VC}	Massa contida num volume de controle[kg]
\overline{MM}_{CH_4}	Massa molar do metano [kg/kmol]
m	Massa [kg]
\dot{m}	Vazão mássica [kg/s]
N_2	Nitrogênio [kmol/kg]
n_i	Número de moles do componente i [kmol/kg]
n_j	Número de moles do componente j [kmol/kg]
\vec{n}	Vetor normal [-]
OH	Oxidrila []
O_2	Oxigênio [kmol/kg]

P	Pressão [Pa]
P_0	Pressão de referência [Pa]
P_k	Produção turbulenta [kg/ms^3]
Q	Calor [kJ/kg]
\dot{Q}	Vazão volumétrica [m^3/s]
Q_P	Calor adicionado ou retirado de uma reação estacionária [kJ/kg]
q	Fluxo de calor [W/m^2]
q_c	Fluxo de calor por condução [W/m^2]
q_r	Fluxo de calor por radiação [W/m^2]
q_{rv}	Fluxo de calor por radiação [W/m^2]
r	Coordenada radial na direção do raio [m]
r_{kl}	Ordem do componente I na reação k [-]
r_j	Raio do bocal do queimador [m]
\vec{r}	Vetor posição [m]
r_Φ	Resíduo bruto da variável Φ [-]
\tilde{r}_P	Resíduo normalizado no ponto P [-]
r_S	Raio da chama de difusão [m]
\bar{R}	Constante universal dos gases [$8314,5 \text{ kJ}/\text{kmolK}$]
R	Constante universal dos gases [$8314,5 \text{ kJ}/\text{kmolK}$]
Re	Número de Reynolds [adimensional]
RR	Taxa de reação
S	Superfície [m^2]
S	Medida da taxa de deformação [m]
S	Comprimento percorrido por um raio [m]
S^m	Termo fonte de massa [kg/m^3]
S^E	Termo fonte de massa [kg/m^3]
S^{rad}	Termo fonte de massa [kg/m^3]
S_i^m	Termo fonte de massa do componente i [kg/m^3]
Sc_t	Número de Schmidt turbulento [-]
S_L	Velocidade laminar de chama [m/s]

S_T	Velocidade turbulenta de chama [m/s]
s_{eRS}	Constante do modelo de turbulência SSG [-]
\vec{s}	Vetor direção [-]
T	Temperatura [K]
T_F	Temperatura do envelope da chama [K]
T_I	Temperatura de ignição [K]
T_w	Temperatura na parede [K]
t	Tempo [s]
t_0	Tempo inicial [m/s]
U	Velocidade [m/s]
U'	Flutuação da velocidade [m/s]
\bar{U}	Velocidade média [m/s]
\tilde{U}_j	Campo de velocidades ponderado pela massa específica da mistura [m/s]
\tilde{U}_{ij}	Velocidade ponderada do componente fluido i [m/s]
u	Velocidade escalar na direção longitudinal [m/s]
\bar{u}	Média temporal da velocidade na direção longitudinal [m/s]
u'	Flutuação da velocidade na direção longitudinal [m/s]
v	Velocidade escalar na direção vertical [m/s]
V	Volume [m ³]
\vec{V}	Vetor velocidade [m/s]
\bar{v}	Média temporal da velocidade na direção vertical [m/s]
v'	Flutuação da velocidade na direção vertical [m/s]
x	Coordenada cartesiana na direção longitudinal [m]
y	Coordenada cartesiana na direção vertical [m]
y_+	Distância adimensional [-]
y_F	Altura da chama de difusão [m]
z	Coordenada cartesiana na direção transversal [m]
W	Vorticidade [-]
w	Velocidade escalar na direção transversal [m/s]
E	Energia interna [J/kg]

E^0	Energia interna no estado padrão [J/kg]
X	Deslocamento das partículas numa determinada direção [m]
X_i	Fração molar do componente i na mistura [mol/mol]
Y_i	Fração mássica [-]
Z	Fração de mistura [kmol/kmol]
Z_{AB}	Frequência de colisão entre os componentes A e B [s^{-1}]
Z'_{AB}	Frequência de colisão entre os componentes A e B antes da reação [s^{-1}]
Z''_{AB}	Frequência de colisão entre os componentes A e B após a reação [s^{-1}]

Letras Gregas

α_1	Constante qualquer [-]
α_1	Propriedade constitutiva qualquer [-]
α_1	Constante modelo de turbulência BSL [-]
α_2	Constante qualquer [-]
α_2	Constante modelo de turbulência BSL [-]
β	Constante modelo de turbulência $k - \omega$ [-]
β	Coefficiente de extinção da radiação [-]
β_1	Constante modelo de turbulência BSL [-]
β_2	Constante modelo de turbulência BSL [-]
β'	Constante modelo de turbulência $k - \omega$ [-]
ΔH	Diferença de entalpia [kJ/kg]
ΔH_T	Diferença de entalpia numa temperatura de referência [kJ/kg]
$(\Delta H_f^0)_{T,i}$	Entalpia de formação do componente i na temperatura T [kJ/kg]
$(\Delta H_f^0)_{298,CO_2}$	Entalpia de formação do CO_2 a 298 [K] [kJ/kg]
Δx	Distância na direção longitudinal [m]
Δy	Distância na direção vertical [m]
Δz	Distância na direção transversal [m]
∇	Operador gradiente [-]
$\nabla \bullet$	Operador divergente [-]

δ	Espessura da zona de reação [m]
ε	Difusividade turbulenta [m^2/s]
Γ	Coefficiente de difusão [m^2/s]
Γ_i	Coefficiente de difusão molecular do componente i [m^2/s]
λ	Condutividade térmica [W/mK]
λ_r	Condutividade radiativa total [W/mK]
η_{ki}	Coefficiente estequiométrico do componente i na reação k
η_A	Coefficiente estequiométrico do componente A
η_i'	Coefficiente estequiométrico do componente i nos produtos
η_i''	Coefficiente estequiométrico do componente i nos produtos
π	Pi [rad]
i	Fator estérico
σ	Tensão superficial [N/m^2]
σ_{AB}	Diâmetro de colisão entre as moléculas de A e B [m]
σ_k	Constante do modelo de turbulência $k - \varepsilon$ [-]
σ_{k1}	Constante do modelo de turbulência BSL [-]
σ_{k2}	Constante do modelo de turbulência BSL [-]
σ_ε	Constante do modelo de turbulência $k - \varepsilon$ [-]
σ_ω	Constante do modelo de turbulência $k - \omega$ [-]
$\sigma_{\omega1}$	Constante do modelo de turbulência BSL [-]
$\sigma_{\omega2}$	Constante do modelo de turbulência BSL [-]
τ	Tempo característicos de reação [s]
τ	Tensor de Reynolds [kg/ms^2]
τ_c	Tempo característicos de reação [s]
τ_k	Tempo característico Kolmogorov [s]
τ_L	Tempo característico laminar [s]
τ_m	Tempo aerodinâmico característico [s]
τ_T	Tempo característico turbulento [s]
ρ_i	Densidade do componente i [kg/m^3]

$\tilde{\rho}_i$	Densidade ponderada do componente i do fluido na mistura [kg/m ³]
ζ	Coordenada genérica [-]
Ω	Ângulo sólido [rad]
μ_t	Viscosidade turbulenta [m ² /s]
μ	Viscosidade absoluta [Ns/m ²]
μ_{eff}	Viscosidade efetiva [m ² /s]
ν	Frequência [Hz]
χ	Taxa de difusão escalar da fração de mistura [kmol/m ² s]
χ	Taxa de difusão escalar da fração de mistura estequiométrica [kmol/m ² s]
ϕ	Razão de equivalência [-]
Φ	Função de fase [rad]
Φ	Variável genérica [-]

INDÍCE DE FIGURAS

1.1	Representação do problema de [Garréton e Simonin, 1995].....	4
1.2	Representação do problema de Meier, 2000.....	4
1.3	Secador de agregados minerais e diagrama de funcionamento.....	5
2.1	Caminhos Temperatura-Reação, [Glassman, 1977].....	7
2.2	Variação da temperatura de chama com a razão oxidante combustível.....	10
2.3	Ramificações da oxidação do H.....	14
2.4	Formas previstas para uma chama de difusão, [Glassman, 1977].....	16
2.5	Distribuição de componentes químicos ao longo da seção da chama, [Glassman, 1977].....	16
2.6	Variação do envelope de chama versus velocidade do jato, Hottel e Hawthorne [1949].....	17
2.7	Distorção da frente laminar de chama, [Glassman, 1977].....	19
2.8	Gráfico com entalpias de formação de alguns compostos químicos, [IPT, 2000].....	21
2.9	Representação do equilíbrio e da necessidade de um acréscimo de energia para iniciar o movimento da esfera, [IPT, 2000].....	22
2.10	Representação do acréscimo de energia no sistema químico.....	22
2.11	Efeito do catalisador na energia de ativação, [Russel, 1982].....	24

2.12	Gráficos da simulação de [Nieckele et al., 2002] (a) Temperatura ao longo do eixo da câmara (b) Concentração de oxigênio ao longo do eixo da câmara.....	29
2.13	Campos de temperatura encontrados por (a) [Méier, 2000] e (b) [Frassoldati, 2005].....	30
2.14	Esquema de uma chama não pré-misturada. [Dennis, 2002].....	32
2.15	Esquema de regimes de combustão não pré-misturada como função de Da e Re	34
2.16	Representação gráfica dos pontos de vista da análise de chama, [Dennis, 2002].....	36
2.17	Representação do modelo SCRS [Silva, C.V, 2005].....	37
3.1	Conservação de massa num volume de controle.....	41
3.2	Divisão do escoamento próximo a parede.....	52
3.3	Mudança de estado de uma substância através de suas propriedades [CFX 2002].....	59
3.4	Malha qualquer sobre uma geometria retangular.....	68
3.5	Volume finito centrado num ponto da malha.....	68
3.6	Volume finito e seus pontos de integração.....	69
3.7	Algoritmo geral do Ansys CFX 10.....	72
3.8	Algoritmo empregado nos casos estudados no trabalho.....	72
4.1	Geometria da câmara de combustão experimentada por [Garreton e Simonin, 1994].....	74
4.2	Desenho representativo da câmara experimental, [Garreton e Simonin, 1994].....	76
4.3	Malha discretizando somente a câmara de combustão.....	77
4.4	Malha discretizando a câmara de combustão e 600 [mm] da câmara de exaustão.....	78
4.5	Malha discretizando a câmara de combustão e 1200 [mm] da câmara de exaustão.....	78
4.6	Gráfico de velocidades próximo a parede da câmara.....	79
4.7	Perfil axial do número de Damkohler.....	80
4.8	Tempo consumido por modelo na solução da malha de 715200 volumes.....	81
4.9	Perfil axial de temperatura.....	82
4.10	Perfil radial na cota (a)312 mm, (b) 912 mm e (c) 1312 mm.....	83

4.11	Perfil da concentração de monóxido de carbono (a) axial ; (b) na cota 1312 mm.....	84
4.12	Perfil da concentração de gás metano axial da câmara.....	84
4.13	Perfil da concentração de CO ₂ na cota (a) 312 mm, (b) 912 mm e (c) 1312 mm.....	85
4.14	Perfil da concentração de CO ₂ , axial da câmara.....	86
4.15	Perfil da concentração de O ₂ na cota (a)312 mm, (b) 912mm e (c) 1312 mm.....	86
4.16	Perfil de fração mássica axial de O ₂ ao longo da câmara.....	87
4.17	Perfil axial da câmara resultado dos diferentes modelos.....	88
4.18	Perfil radial de temperatura na cota (a) 312 mm, (b) 912 mm e (c) 1312 mm.....	88
4.19	Perfil (a) axial; (b) na cota 1312 mm, da concentração de monóxido de carbono.....	89
4.20	Perfil da concentração de gás metano axial.....	90
4.21	Perfil da concentração de CO ₂ na cota (a) 312 mm, (b) 912 mm e (c) 1312mm.....	90
4.22	Perfil de concentração de CO ₂ axial da câmara.....	91
4.23	Perfil de concentração de O ₂ na cota (a)312 mm, (b) 912 mm e (c) 1312 mm.....	92
4.24	Perfil de concentração de O ₂ axial da câmara.....	93
4.25	Perfil axial de temperatura resultado do modelo.....	94
4.26	Perfil Perfil radial de temperatura na cota (a) 312 mm (b) 912 mm e (c) 1312 mm.....	95
4.27	Perfil (a) axial e (b) cota 1312 mm da concentração de monóxido de carbono.....	96
4.28	Perfil de concentração de gás metano axial da câmara.....	96
4.29	Perfil de concentração de CO ₂ na cota (a) 312 mm, (b) 912 mm e (c) 1312 mm.....	97
4.30	Perfil de concentração de CO ₂ axial da câmara.....	98
4.31	Perfil de concentração de O ₂ na cota (a) 312 mm, (b) 912 mm e (c) 1312 mm.....	98
4.32	Perfil da concentração de O ₂ axial na câmara.....	99
4.33	Comparação entre malhas no perfil de temperaturas em 1312 mm.....	100

4.34	Perfil axial de temperaturas resultado do modelo com exaustão.....	100
4.35	Perfil radial de temperatura na cota (a) 312 mm, (b) 912 mm e (c) 1312 mm..	101
4.36	Perfil (a) axial e na cota (b) 1312 mm da concentração de monóxido de carbono.....	101
4.37	Perfil axial da concentração de gás metano.....	102
4.38	Perfil da cocentração de CO ₂ na cota (a) 312 mm, (b) 912 mm e (c) 1312 mm.....	103
4.39	Perfil axial da concentração de CO ₂ da câmara.....	104
4.40	Perfil da concentração de O ₂ na cota (a) 312 mm, (b) 912 mm e (c) 1312 mm.....	104
4.41	Perfil da concentração de O ₂ axial da câmara.....	105
4.42	Perfil axial de temperatura resultado do modelo.....	106
4.43	Perfil radial de temperatura na cota (a) 312 mm, (b) 912 mm e (c) 1312 mm..	106
4.44	Perfil (a) axial e na cota (b) 1312 mm da concentração de monóxido de carbono.....	107
4.45	Perfil axial da concentração de gás metano.....	107
4.46	Perfil da concentração de CO ₂ na cota (a) 312 mm, (b) 912 mm e (c) 1312 mm.....	108
4.47	Perfil da concentração de CO ₂ axial na câmara.....	109
4.48	Perfil da concentração de O ₂ na cota (a) 312 mm, (b) 912 mm e (c) 1312 mm.....	109
4.49	Perfil da concentração de O ₂ axial da câmara.....	110
4.50	Perfil de temperatura na cota 312 mm resultado de diferentes modelagens com o SST.....	111
4.51	Perfil de concentração de metano calculado pelo modelo SST em diferentes modelagens.....	111
4.52	Campos (a) de temperatura (b) monóxido de carbono e (c) dióxido de carbono.....	112
4.53	Perfil de concentração de oxigênio axial , calculado pelos modelos utilizando o modelo $k - \varepsilon$	113
4.54	(a) Geometria da câmara de combustão do experimento, (b) forma do combustor e (c) foto da chama visível durante o experimento.....	113
4.55	Perfis de velocidade na entrada do combustor (a) axial, (b) radial e (c) tangencial.....	114

4.56	Topologia adotada para as malhas (A), (B), (C) e (D).....	115
4.57	Imagem em corte da (a) Malha A (333116 volumes) e (b) Malha B (323565 volumes).....	115
4.58	Imagem em corte da (a) Malha C (259083 volumes) e (b) Malha D (304782 volumes).....	116
4.59	Topologia adotada para as malhas E e F.....	116
4.60	Imagem em corte da (a) Malha E (358891 volumes) e (b) Malha F (387732 volumes).....	117
4.61	Topologia adotada para a malha G.....	117
4.62	Imagem em corte da (a) Malha G (447070 volumes) e (b) detalhe da região do queimador.....	117
4.63	Topologia adotada para as malhas H.....	118
4.64	Imagem em corte da (a) Malha H (371745 volumes) e (b) detalhe da região do queimador.....	118
4.65	Perfis de velocidade axial obtidos com as diferentes malhas em (a) $x/D=0.16$ (b) $x/D=0.5$ e (c) $x/D=1.16$	119
4.66	Campo de temperaturas obtido por Meier, 2000, (a) Computacional ; (b)Experimental.....	120
4.67	Perfil de velocidade nas posições $x/D=$ (a) 1.16 (b) 0.5 e (c) 0.16.....	121
4.68	Perfil de velocidade tangencial (a) $x/D=1.16$, (b) $x/D= 0.5$ e (c) $x/D= 1.16$	122
4.69	Perfil de velocidade radial (a) $x/D=0.16$ (b) $x/D=0.5$ e (c) $x/D=1.16$	123
4.70	Campos de temperatura (a) Presente trabalho e (b) experimento [Meier, 2000].....	124
4.71	Campos de temperatura (a) experimento [Frassoldati, 2005] e (b) presente trabalho.....	124
4.72	Perfis de temperaturas na zona de reação comparados com o experimental (a) $x/D=1.16$, (b) $x/D=0.5$ e (c) $x/D=0.16$	125
4.73	Perfis de fração mássica de metano comparados com o experimental nas posições (a) $x/D=1$, (b) $x/D=0.5$ e (c) $x/D=0.16$	126
4.74	Perfil de fração mássica de metano comparado com o experimental nas posições (a) $x/D=0.16$, (b) $x/D=0.32$ e (c) $x/D=1$	127
4.75	Perfil de fração mássica de dióxido de carbono comparado com o experimental nas posições (a) $x/D=1.5$, (b) $x/D=0.32$ e (c) $x/D=0.16$	128

4.76	Perfis de fração mássica de oxigênio comparados com o experimental nas posições (a) $x/D=0.16$, (b) $x/D=0.32$ e (c) $x/D=1$	129
4.77	Gráfico comparativo entre o modelo com e sem cálculo radiativo em $x/D=1.5$	129
4.78	Esquema básico de funcionamento de uma usina de asfalto [CIBER, 2007].....	131
4.79	Imagem da cascata gerada pela rotação de um secador rotativo [CIBER,2007].....	131
4.80	Diagrama de funcionamento de um secador rotativo.....	132
4.81	Queimador de um secador rotativo.....	132
4.82	Gráfico demonstrativo da evolução da temperatura num secador.....	133
4.83	Gráfico de temperaturas da parede cilíndrica de um secador rotativo [CIBER, 2007].....	133
4.84	Queimadores industriais para usinas de asfalto.....	134
4.85	Representação da geometria de interesse no problema.....	135
4.86	Tipos básicos de nebulizadores (a) Jato maciço (b) Jato oco (c) Jato perpendicular. (d) Representação da formação das gotas dum filme líquido [IPT, 2000].....	135
4.87	Modelo da câmara de combustão a ser calculada.....	136
4.88	Campos de velocidade (a) axial e (b) tangencial, de uma geometria similar a modelada nesta seção [CIBER, 2007].....	137
5.1	Campo de temperaturas calculado (a) com radiação (b) sem radiação.....	140
5.2	Caldeira fumotubular em corte.....	140
5.3	Campo (a) calculado pelo presente trabalho e (b) medição experimental [Meier, 2000].....	141
A.1	Representação da análise termodinâmica, segundo Semenov.....	156
A.2	Gráfico qualitativo de temperatura de auto ignição x pressão, para uma dada mistura de combustível.....	159
A.3	Diferença qualitativa na liberação de calor para diversos teores de combustível.....	160
A.4	Efeito da temperatura na zona de ignição.....	160
A.5	Efeito da pressão na zona de ignição.....	160
A.6	Perfil da temperatura e concentração na frente de chama [IPT, 2000].....	161
A.7	Regiões de oxidação e explosão para alguns hidrocarbonetos.....	163

ÍNDICE DE TABELAS

2.1	Calores de formação padrão a 298,1 K de algumas substâncias, [Glassman, 1977].....	8
2.2	Temperaturas de chama para misturas estequiométricas em diferentes pressões, [Glassman, 1977].....	10
2.3	Sistema de equações representando a oxidação do metano.....	26
3.1	Constantes para o modelo $k - \varepsilon$	48
3.2	Constantes para o modelo $k - \omega$	49
3.3	Constantes utilizadas na solução do modelo BSL.....	50
3.4	Constantes utilizadas no modelo SSG.....	54
3.5	Equações de conservação a serem resolvidas para o problema.....	66
4.1	Propriedades termo físicas utilizadas no cálculo.....	76
4.2	Tabela dos coeficientes de interpolação para c_p em diferentes intervalos de T.....	77
A.1	Valores de velocidade e temperatura de chamas dadas temperaturas iniciais, [IPT, 2000].....	162

1. INTRODUÇÃO

Processos de combustão diariamente fornecem energia a inúmeros processos industriais, sejam fornalhas à lenha, leitos fluidizados, combustores de combustíveis líquidos, a gás ou mesmo sólido pulverizado. Dois processos onde ocorre combustão com variados combustíveis são a indústria cimenteira e a indústria produtora de concreto betuminoso usinado a quente. O Brasil possui uma vasta malha rodoviária que utiliza, no seu processo de construção e manutenção, equipamentos dependentes da energia vinda de combustores, seja no processo de transformação do cimento ou secagem de areia, seja no processo de secagem e aquecimento para produção de concreto betuminoso usinado à quente. As inúmeras modificações na matriz energética para tais equipamentos vêm pedindo flexibilidade destas unidades para adaptar-se aos combustíveis mais baratos ou disponíveis no momento.

A indústria produtora de equipamentos de beneficiamento mineral, que envolve na maioria das vezes os processos de aquecimento e secagem, está constantemente buscando soluções capazes de cumprir com as necessidades de seus clientes investindo em soluções de Engenharia. Atualmente uma ampla gama de programas de computador oferece aos Engenheiros ferramentas de cálculo capazes de simular processos de combustão, nas mais diversas geometrias de câmaras e combustores, e ainda variando combustíveis. As ferramentas de simulação numérica são instrumentos poderosos que podem auxiliar no projeto antecipado de experimentos e mesmo serem determinantes de projeto definitivo. Possibilitam assim a modificação de parâmetros de operação e projeto nos combustores, e fornecem uma visão mais detalhada dos fenômenos encontrados no processo de combustão. Mostram também quão ampla pode ser a gama de solução dos problemas industriais, dadas as variações de modelos de turbulência, modelos de taxas de reação, modelos de trocas radiativas, etc.. A análise dos resultados de um programa de cálculo é um instrumento importante para balizar a veracidade dos resultados e suas aplicações práticas.

Combustíveis fósseis são as maiores fontes de energia no mundo e possivelmente continuarão sendo por um longo tempo. Grandes esforços estão sendo feitos com relação ao uso destes combustíveis de uma forma mais eficiente e ambientalmente aceitável. Durante o último quarto de século uma parte significativa destes esforços teve como foco principal o desenvolvimento de modelos matemáticos multidimensionais capazes de simular vários equipamentos, tais como aquecedores, reatores, geradores de vapor e queimadores. O objetivo principal é que possam ser usados para projetar e analisar processos de combustão de combustíveis fósseis ou renováveis (biomassa). Estes modelos servem como ferramentas, que

reproduzem experimentos físicos através de equivalentes experimentos numéricos, [Eaton et al., 1999].

O desenvolvimento de tecnologias de combustão de combustíveis fósseis no passado foi largamente de natureza empírica, sendo baseada principalmente na experiência acumulada em operações em caldeiras, e sobre dados obtidos a partir de testes simplificados. A experiência e dados obtidos empiricamente possuem aplicabilidade limitada. Dados de câmaras de combustão de dimensões maiores são tipicamente limitados às medições dos seus produtos. Dados em escalas menores, enquanto fornecem informações mais precisas do fenômeno governante, são frequentemente de obtenção onerosa. Deste modo as conclusões para resultados desta natureza se tornam difíceis de serem extrapoladas para sistemas de grande porte. Isso ocorre principalmente por causa da complexidade da turbulência, e também dos processos reativos dos fluxos, pré-misturados ou não da chama, segundo Eaton et al., 1999. As metodologias de modelamento de processos de combustão podem fazer a ligação entre estes testes de escalas menores e a operação de câmaras em grandes escalas de potência. Isto se deve ao fato de prover informações sobre os processos de combustão que os dados experimentais por si só não podem prever.

Os modelamentos de processos de combustão podem assumir muitas formas, mas poucos possuem a capacidade de representar de maneira detalhada os principais fenômenos envolvidos (ex.: mecânica do escoamento, convecção, turbulência, reações químicas e radiação térmica). Algumas modelagens são melhores para um determinado caso, e para outros não. Existem modelagens que fazem um enfoque mais detalhado da cinética química envolvida no processo de combustão, mas ignoram, ou resolvem de forma muito simplificada a mecânica do escoamento, a turbulência, a convecção de calor e a radiação térmica. Outras resolvem bem o escoamento (turbulência e convecção), com razoável atenção a cinética química do processo de combustão, e não resolvem a transferência de calor por radiação. Outros modelos apresentam pouco detalhamento tanto para a mecânica do escoamento (incluindo turbulência e convecção) e cinética química, quanto para a radiação térmica presente no processo de combustão.

O escoamento turbulento num combustor introduz várias complicações ao cálculo, como vórtices de diferentes escalas, recirculações na câmara de combustão e gradientes fortes de velocidade. Para desenvolver um queimador usualmente são necessários tanto simulações numéricas, como experimentos práticos. Entretanto, em simulações numéricas, modelos padrões por vezes falham ao simular queimadores com alto 'swirl' ou com diferentes relações de tempo químico e mecânico do escoamento na mesma fornalha. Por isto deve-se atentar antes do uso de ferramentas computacionais, analisando a implicação de cada componente na sua modelagem.

Com os avanços da computação, a aplicação de mecânica dos fluidos computacional vem se tornando muito comum. Já é freqüente o uso de modelos de duas equações para representar o transporte turbulento, associadas a um tratamento simplificado da camada limite termodinâmica. Muitas vezes estes modelos alcançam uma boa concordância com o fenômeno físico, mas em algumas aplicações apresentam falhas na descrição da realidade pelo modelo matemático.

A simulação numérica direta é uma opção tentadora para a solução dos problemas de Engenharia, pois pode retratar com exatidão o escoamento, mesmo reativo, numa fornalha, dado que todas as escalas de comprimento e tempo são resolvidas. A vantagem da simulação numérica direta é que não são necessários modelos de turbulência. Sua desvantagem, entretanto, é o tempo computacional que é necessário, atualmente podendo somente resolver casos de pequenos Reynolds.

A boa utilização das ferramentas computacionais pode trazer muitos benefícios para a indústria de tais máquinas, acelerando o processo de desenho dos equipamentos, melhorando as condições de trabalho dos equipamentos, evitando combustão incompleta de gases e melhorando emissões que podem ser danosas à vizinhança das unidades industriais e à atmosfera.

1.1. ESCOPO E OBJETIVO DO TRABALHO

Este trabalho tem por objetivo principal estabelecer um procedimento para a modelagem de combustores em fornalhas industriais, com ferramentas de Engenharia, para fins de simulação numérica, comercialmente distribuídas e já presentes em escritórios de Engenharia e indústrias de bens de capital como usinas de asfalto, caldeiras, fornos de tratamento térmico, etc.. Os vários trabalhos pesquisados mostram que os modelos atuais tanto para simulação do escoamento como para taxa de reação dos reagentes podem variar e apresentar comportamentos diferentes dados regimes de escoamentos, comportamentos dos combustíveis, das concentrações de reagentes, das temperaturas, das condições de parede, etc.. A proposta inicial do trabalho é:

1. Simular um caso de uma câmara de combustão cilíndrica com jatos coaxiais, [Garreton e Simonin, 1995], Fig. 1.1, com um programa comercial de volumes finitos ANSYS CFX 10.0 numa geometria tridimensional simulando completamente a câmara afim de estudar a variação com diferentes modelos de turbulência, apresentando e discutindo os resultados de diferentes modelos de radiação e também a interferência das condições de contorno.

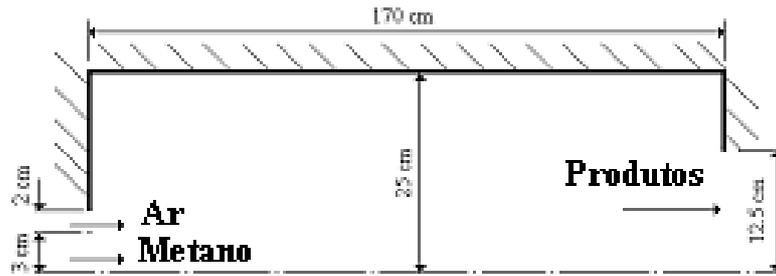


Figura 1.1 – Representação do problema de Garréton e Simonin, 1995.

2. Simular uma câmara com alto número de *swirl*, [Meier, 2000] Fig. 1.2, também com o mesmo programa comercial, ANSYS CFX 10.0, considerando a geometria tridimensional simulando e discutindo os resultados do caso. Os dados calculados são comparados com valores experimentais obtidos com auxílio de laser por Meier, 2000.

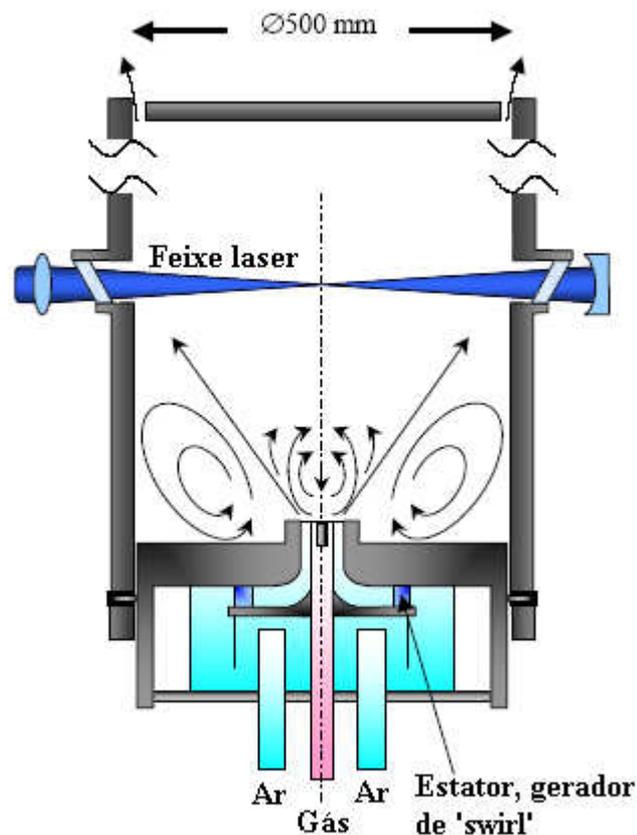


Figura 1.2 – Representação do problema de Meier, 2000.

3. Propor para uma geometria de fornalha representada por um combustor em um secador de agregados minerais (secador rotativo) cilíndrico um modelo para simulação numérica,

que tem por objetivo orientar um projeto mecânico futuro da implementação de um queimador para metano.

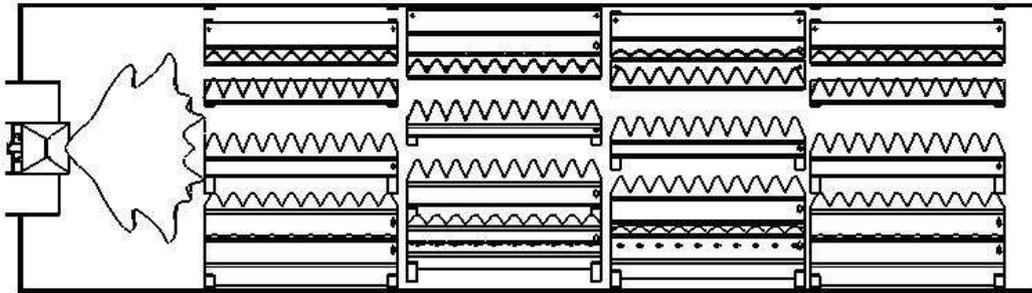


Figura 1.3 – Secador de agregados minerais e diagrama de funcionamento.

O trabalho é dividido nos capítulos seguintes apresentando no Cap. 2 uma revisão bibliográfica e conceitual dos conceitos dos fenômenos de combustão e sua simulação. Uma discussão breve sob aspectos termodinâmicos básicos é feita, pois muitos dos modelos de taxa de reação química baseiam-se em princípios fundamentais. Comenta-se sobre uma série de trabalhos que foram publicados sobre o assunto e discute-se sobre as hipóteses consideradas em cada estudo de caso.

O capítulo de apresentação da modelagem matemática utilizada para simular o escoamento reativo, turbulento, com transmissão de calor dentro de uma fornalha é discutido no Cap. 3. Todos os modelos matemáticos utilizados na solução dos estudos de caso citados é apresentada ali. Comenta-se sobre a aplicação dos modelos através do programa comercial escolhido para a solução dos casos e modelamento do caso prático.

Os resultados obtidos pela modelagem matemática com o programa comercial Ansys CFX 10 são apresentados no Cap. 4, utilizando principalmente gráficos dos perfis experimentais de concentração e T obtidos pelos trabalhos originais, campos de temperatura calculados e comentários sobre cada um destes pontos. Ao fim desse capítulo descreve-se um caso prático, um secador rotativo de agregados minerais, onde se pretende futuramente implementar a ferramenta no projeto de queimadores e fornalhas. As conclusões finais e sugestões para trabalhos futuros são apresentadas no Cap. 5.

2. REVISÃO CONCEITUAL E BIBLIOGRÁFICA

2.1. TERMODINÂMICA QUÍMICA

Os parâmetros necessários para a determinação de sistemas de combustão são os produtos de equilíbrio, temperatura e composição química. Se todo o calor envolvido na reação é empregado somente para aumentar a temperatura dos produtos, então esta temperatura é chamada temperatura adiabática de chama. Em processos reais existem perdas inevitáveis para a matéria, a qual se destina o calor (vapor, peças em tratamento térmico, material em secagem), paredes da fornalha, etc.

2.1.1 CALORES DE REAÇÃO E FORMAÇÃO

Todas as reações químicas são acompanhadas ou por uma absorção ou por uma liberação de energia, normalmente na forma de calor. É possível determinar este montante de energia e então a temperatura e a composição dos produtos da reação a partir de princípios básicos. Cálculos estatísticos permitem determinar a energia interna de uma substância. A energia interna de uma substância é dependente do seu estado termodinâmico. Então a mudança de energia interna de um sistema que resulta de uma mudança física ou reação química depende apenas dos estados inicial e final, [Glassman, 1977].

Para uma reação ocorrendo num escoamento com mudanças negligenciáveis de energia cinética, energia potencial, e sem nenhuma forma de trabalho além da necessária para o escoamento, o calor adicionado é igual a variação de entalpia do sistema.

$$Q = \Delta H \quad (2.1)$$

A maioria dos cálculos termoquímicos é feita para sistemas termodinâmicos fechados, onde a estequiometria é mais convenientemente representada em termos das quantidades molares determinadas através de cálculos estatísticos. Em problemas de escoamento compressível onde sistemas termodinâmicos abertos são essenciais, cabe o uso de quantidades mássicas [Glassman, 1977]. A variação de energia ou troca de calor associada com a reação a uma dada temperatura é dita calor de reação a esta temperatura.

Da definição de calor de reação, o calor liberado pela reação dependerá da temperatura na qual a reação e entalpias de produtos são avaliadas, [Glassman, 1977]. O calor de formação a uma temperatura T_0 pode ser relacionado à outra temperatura T_1 , observando a configuração de reação na Fig.2.1.

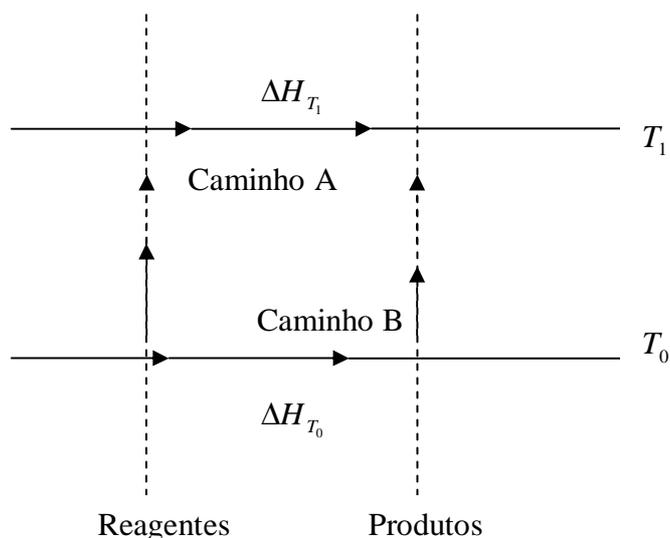
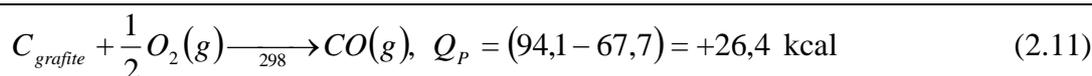
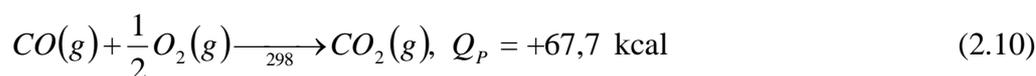
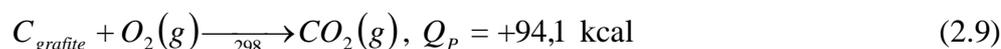


Figura 2.1 – Caminhos Temperatura-Reação, [Glassman, 1977].

De acordo com a primeira lei da termodinâmica as trocas de calor que procedem dos reagentes na temperatura T_0 para produtos na temperatura T_1 , tanto pelo caminho A quanto pelo caminho B, devem ser as mesmas. Pelo caminho A eleva-se a temperatura dos reagentes de T_0 a T_1 , e reage a T_1 . Pelo caminho B a reação ocorre a T_0 e aumentando a temperatura dos produtos de T_0 a T_1 . Então sabendo a diferença em conteúdo de energia a diferentes temperaturas para os produtos e dos reagentes, é possível determinar o calor de reação a uma dada temperatura através do calor de reação de outra, [Glassman, 1977].

Se os calores de reação a uma dada temperatura são conhecidos para duas reações separadas, o calor de reação de uma terceira reação na mesma temperatura pode ser determinado por simples adição algébrica. Por exemplo, duas reações que podem ser desenvolvidas normalmente por um calorímetro a pressão constante são



Normalmente ao invés de se trabalhar com uma lista grande de reações e seus calores, listam-se as reações básicas, mais comuns e também uma lista do que é conhecido, tais como os calores de formação de substâncias químicas. O calor padrão de formação é a entalpia de uma substância no seu estado padrão, referido a seus elementos nos seus estados padrões na mesma

temperatura. O valor do calor de formação de uma dada substância a partir de seus elementos pode ser o resultado da determinação do calor de uma reação. Então e para uma reação sem perdas pelas paredes queimando carbono para obter CO_2 é possível (conforme exemplo anterior) escrever o calor de formação do dióxido de carbono a 298 [K] como

$$\left(\Delta H_f^0\right)_{298,CO_2} = -94,1 \text{ [kcal/mol]} \quad (2.12)$$

O número de reações que devem ser medidas calorimetricamente é o mesmo número de substâncias que os calores de formação devem ser determinados. A consequência disso é que dados os calores de formação das substâncias que possibilitam qualquer reação particular, um pode determinar diretamente o calor de reação ou calor liberado na temperatura de referência como

$$\Delta H_T = \sum_{i_{\text{produtos}}} n_i \left(\Delta H_f^0\right)_{T,i} - \sum_{j_{\text{reagentes}}} n_j \left(\Delta H_f^0\right)_{T,j} = -Q_P \quad (2.13)$$

onde ΔH_T é a variação da entalpia na temperatura T , n_i é o número de moles do composto i , $\left(\Delta H_f^0\right)_{T,i}$ é o calor de formação do composto i na temperatura T , Q_P é o calor da reação a pressão constante. Existem tabelas extensas com calores de formação padrão, a Tab.2.1 mostra alguns exemplos.

Tabela 2.1 – Calores de formação padrão a 298,1 K de algumas substâncias, [Glassman, 1977].

Símbolo químico	Nome	Estado	ΔH_f^0 [kcal/mol]
<i>C</i>	Carbono	Vapor	126,36
<i>N</i>	Nitrogênio atômico	Gás	112,75
<i>C₂H₂</i>	Acetileno	Gás	64,19
<i>H</i>	Hidrogênio atômico	Gás	52,09
<i>O₃</i>	Ozônio	Gás	34,00
<i>NO</i>	Óxido nítrico	Gás	21,60
<i>C₆H₆</i>	Benzeno	Gás	19,80
<i>C₂H₄</i>	Etano	Gás	12,50
<i>OH</i>	Radical hidroxila	Gás	10,06
<i>NH₃</i>	Amônia	Gás	-11,04
<i>C₂H₄O</i>	Etileno óxido	Gás	-12,19
<i>CH₄</i>	Metano	Gás	-17,89
<i>C₂H₄</i>	Etano	Gás	-20,24
<i>CO</i>	Monóxido de carbono	Gás	-26,42
<i>C₄H₁₀</i>	Butano	Gás	-29,81
<i>CH₃OH</i>	Metanol	Líquido	-57,04
<i>C₈H₁₈</i>	Octano	Líquido	-59,74
<i>H₂O</i>	Água	Líquido	-68,32
<i>SO₂</i>	Dióxido sulfúrico	Gás	-71,00
<i>C₁₂H₁₆</i>	Dodecano	Líquido	-83,00
<i>CO₂</i>	Dióxido de carbono	Gás	-94,05

2.1.2. EQUILÍBRIO QUÍMICO: 2ª LEI DA TERMODINÂMICA

Na realidade as reações químicas não se completam. Em um sistema adiabático elas procedem até que a função entropia atinja seu máximo, para então cessar. Ao cessar as concentrações das espécies individuais não variam mais. Caso o sistema não seja adiabático, existe um procedimento de cálculo para obter as concentrações atingidas no equilíbrio químico.

Para um sistema estar em equilíbrio químico não devem ocorrer variações temporais na sua composição química, [IPT, 2000]. A condição geral para um sistema a uma dada temperatura estar em equilíbrio é relacionada a função de Gibbs, *G*. Quando seu valor for mínimo tem-se o equilíbrio químico. Assim,

$$G = H - TS, \quad dG_{T,p} \equiv 0 \text{ (equilíbrio)} \quad (2.14)$$

A partir desta definição pode-se chegar, [IPT, 2000], a uma relação que define uma constante específica da reação com o calor liberado por ela e a temperatura em que ocorre.

$$\frac{d \ln K}{dT} = \frac{\Delta H^0}{RT^2} \quad (2.15)$$

Para uma dada temperatura, a composição da mistura deve variar se a pressão variar. Isto não é válido quando a soma dos coeficientes estequiométricos dos reagentes for igual a dos produtos, [Glassman, 1977].

A reação entre os reagentes e os produtos é considerada não reversível, de tal forma que os produtos existem no sistema em análise. Então, se os reagentes são H_2 e O_2 , por exemplo, ambos aparecerão no lado dos produtos também. Ao lidar com reações de equilíbrio, as quantidades molares dos reagentes H_2 e O_2 são dadas ou conhecidas. Os conteúdos de H_2 e O_2 na mistura de produtos serão incógnitas. Este ponto deve ser considerado cuidadosamente, apesar de óbvio. Esta é a fonte de grandes erros nas primeiras tentativas de calcular temperaturas de chama. Existem vários métodos matemáticos de solução destas equações por métodos numéricos. Não será discutido aqui este tema. Glassman e Sawyer, 1970, mostram detalhes dos métodos.

Em cálculos de combustão, a variação da temperatura varia com o oxidante na razão de combustível que é desejado. Para tanto, ao resolver problemas de temperatura de chama, é normal considerar o número de moles de combustível como unitário e o número de moles de oxidante como o dado pela razão oxidante/combustível, [Glassman, 1977]. Desta maneira os coeficientes são 1 e um número normalmente maior que 1. Gráficos de temperatura de chama versus razão oxidante/combustível têm seu pico na mistura estequiométrica, exemplo Fig. 2.2. Se o sistema for mais oxidante, haverá excesso de oxigênio que deverá ser aquecido até a temperatura dos produtos, e então a temperatura dos produtos cai abaixo dos valores estequiométricos. Se pouco oxidante está presente, então não existe oxigênio suficiente para queimar na totalidade o carbono ou o hidrogênio, por exemplo, ao seu estado mais oxidado, e a liberação de energia é menor havendo queda da temperatura. A temperatura de chama é representada como uma função de razão de equivalência, Fig. 2.2, onde a razão de equivalência é definida como combustível/oxidante.

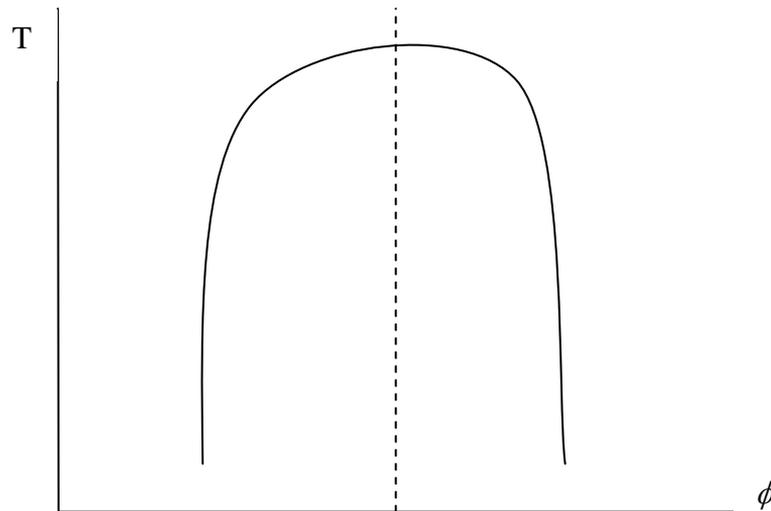


Figura 2.2 – Variação da temperatura de chama com a razão oxidante combustível.

A razão de equivalência é dada pelo símbolo ϕ . Para sistemas ricos em combustível, existe mais de uma quantidade estequiométrica de combustível e $\phi > 1$. Para sistemas mais oxidantes, ou sistemas com pouco combustível, $\phi < 1$; E estequiometricamente, $\phi = 1$.

Verifica-se que alguns sistemas têm seu pico de temperatura no lado mais rico de combustível. Este resultado ocorre porque, se o sistema é um pouco mais oxidante, o calor específico dos produtos é reduzido e então há um aumento da temperatura da chama. Algumas temperaturas máximas de chama são dadas, na Tab. 2.2.

Tabela 2.2 – Temperaturas de chama para misturas estequiométricas em diferentes pressões, [Glassman, 1977].

Combustível	Oxidante	Pressão (atm)	T (K)
Acetileno	Ar	1	2600
Acetileno	Oxigênio	1	3410
Monóxido de Carbono	Ar	1	2400
Monóxido de Carbono	Oxigênio	1	3220
Heptano	Ar	1	2290
Heptano	Oxigênio	1	3100
Hidrogênio	Ar	1	2400
Hidrogênio	Oxigênio	1	3080
Metano	Ar	1	2210
Metano	Ar	20	2270
Metano	Oxigênio	1	3030
Metano	Oxigênio	20	3460

2.2. CINÉTICA QUÍMICA

Segundo Glassman, 1977, as chamas se propagam somente através daquelas misturas químicas que são capazes de reagir suficientemente rápido para serem consideradas de caráter

explosivo. Realmente a expressão “explosiva” tem significado específico para reações muito rápidas. Do ponto de vista da combustão, o interesse no fenômeno de cinética química é dirigido, geralmente, considerando as condições sob as quais sistemas químicos sofrem reações explosivas. Entretanto, o interesse maior existe no conhecimento das taxas e dos mecanismos dos processos de reações químicas (não-explosivas) permanentes, pois a maioria dos processos industriais se desenvolve neste regime e a maioria dos poluentes se forma em zonas de reações permanentes, usualmente de menores temperaturas, no processo de combustão.

2.2.1. TAXAS DE REAÇÃO QUÍMICA E SUA DEPENDÊNCIA DA TEMPERATURA

Toda a reação química, seja ela uma hidrólise, ácido-base ou combustão, ocorre a uma taxa definida, dependendo das condições do sistema. As condições mais importantes são a concentração dos reagentes, a temperatura, os efeitos radiativos e a presença de um catalisador ou inibidor. A taxa de reação deve ser expressa em termos de concentração de qualquer das substâncias reagindo ou qualquer produto da reação, ou ainda como a taxa de decréscimo da concentração de um reagente ou como a taxa de acréscimo de um produto da reação.

A lei de ação das massas determina que o desaparecimento de espécies químicas seja proporcional ao produto das concentrações de espécies químicas reagentes, sendo que cada concentração é elevada ao correspondente coeficiente estequiométrico. Assim,

$$RR = K \prod_{j=1}^m (M_j)^{\eta_j} \quad (2.24)$$

onde K é a constante de proporcionalidade chamada de constante específica de reação, (M_j) representa a concentração do composto j , η_j é o coeficiente estequiométrico de j na reação e RR é a taxa de reação. O somatório $\sum \eta_j$ também é o número total de compostos (n) e é a ordem total da reação. No sistema reagente a taxa de mudança da concentração de uma dada espécie i é dada por

$$d(M_i)/dt = [\eta_i'' - \eta_i'] RR = [\eta_i'' - \eta_i'] K \prod_{j=1}^m (M_j)^{\eta_j} \quad (2.25)$$

desde que η_i'' moles de M_i são formados para cada η_i' moles de M_i consumidos.

A maioria das reações químicas ocorre devido a colisões de dois ou mais reagentes que têm a capacidade de reagir. Então as mais simples reações são de segunda ordem. É possível encontrar reações que aparentemente são de primeira ordem, mas a grande parte destas reações cai na classe de processos de decomposição.

Dada uma reação qualquer de segunda ordem



Especificar a reação desta forma não significa (fisicamente) que cada colisão entre os reagentes A e B gerará produtos ou causar o desaparecimento de certa quantidade de A e B. Arrhenius, 1889, sugere uma teoria simples que leva em conta este fato e contabiliza a dependência à temperatura de K . Arrhenius estabeleceu que apenas aquelas moléculas que possuem energia adicional necessária maior que certa quantidade E_A reagirá. Moléculas adquirem a energia adicional necessária a partir de colisões que produzem energia em excesso além de E_A . Estas moléculas ativas com alta energia levam aos produtos. O postulado de Arrhenius pode ser escrito como

$$RR = Z_{AB} \exp\left\{-\frac{E_A}{RT}\right\} \quad (2.29)$$

onde Z_{AB} é a frequência de colisão e $\exp\left\{-\frac{E_A}{RT}\right\}$ é o fator de Boltzmann. O fator de Boltzmann, derivado da teoria cinética, especifica a fração de todas as colisões que têm energia maior que E_A . Da teoria cinética

$$Z_{AB} = (A)(B)\sigma_{AB} \left[\frac{8\pi k_B T}{\psi} \right]^{1/2} \quad (2.30)$$

onde σ_{AB} é o diâmetro de colisão, k_B é a constante de Boltzmann e ψ é a massa reduzida. Z_{AB} pode ser escrita na forma

$$Z_{AB} = Z'_{AB} (A)(B) \quad (2.31)$$

Z'_{AB} é apenas uma constante que representa os demais termos que caracterizam a colisão entre moléculas a serem consumidas. Então a fórmula de Arrhenius para a taxa de reação é

$$RR = Z'_{AB} (A)(B) \exp\left\{-\frac{E_A}{RT}\right\} \quad (2.32)$$

Quando comparada a taxa de reação escrita a partir da lei de ação das massas, o resultado encontrado é

$$K = Z'_{AB} \exp\left\{-\frac{E_A}{RT}\right\} = Z''_{AB} T^{1/2} \exp\left\{-\frac{E_A}{RT}\right\} \quad (2.33)$$

Então a conclusão importante é que a constante específica de taxa de reação é apenas dependente da temperatura, e independente da concentração. Z'_{AB} é uma constante que representa os demais termos que caracterizam a colisão entre moléculas a serem consumidas.

Entretanto quando moléculas complexas estão reagindo, nem toda colisão tem a orientação apropriada para a reação especificada ocorrer. Então K pode ser escrita como

$$K = Z_{AB}'' T^{1/2} \exp\left\{-\frac{E_A}{RT}\right\}^t \quad (2.34)$$

onde t é um fator determinado experimentalmente, que pode ser um número muito pequeno. A fórmula de Arrhenius é escrita da seguinte forma

$$K = \text{const} \exp\left\{-\frac{E_A}{RT}\right\} = A \exp\left\{-\frac{E_A}{RT}\right\} \quad (2.35)$$

onde a constante A leva em conta os termos de colisão, a dependência da temperatura, e o fator experimental. Esta expressão serve para a maioria das reações, mostra um aumento de K com a temperatura. Entretanto, existem duas classes de reações que não são bem descritas por esta expressão: reações com radicais livres com baixa energia de ativação, onde a dependência da temperatura no termo anterior ao exponencial se torna mais importante; E recombinações de radicais, quando radicais simples recombina para formar um simples produto.

A expressão de Arrhenius é importante no conhecimento para modelagem de sistemas de combustão, pois é a base de alguns modelos de taxa de reação implementados em ferramentas de simulação computacional.

2.2.2. REAÇÕES SIMULTÂNEAS INTERDEPENDENTES E EM CADEIA

Em sistemas reagentes complexos uma simples expressão de taxa de um passo não é suficiente. Geralmente encontram-se reações interdependentes ou em cadeia. Estes princípios são os que determinam a modelagem da reação oxidante-combustível em um número determinado de passos afetando ou não a aproximação de uma simulação.

O mecanismo mais freqüente que ocorre em reações simultâneas interdependentes é o caso em que o produto, quando sua concentração é aumentada, dissocia-se nos reagentes. Um exemplo clássico é a reação Hidrogênio-Iodina, podendo ser mais bem visualizada no Anexo A.

Existe outro tipo de passo nas reações químicas em cadeia que é, a princípio, o mais importante dos vários tipos de passos na reação, neste tipo é necessário alcançar uma explosão não térmica na qual dois radicais são criados para cada radical consumido. É chamada ramificação da cadeia.

Ramificações normalmente ocorrem quando um mono radical, formado pela quebra de uma ligação simples, reage com uma espécie contendo uma ligação dupla ou um bi radical, formado pela quebra de uma ligação dupla, que reage com uma molécula saturada Exemplificando este conceito de ramificação Kanury, 1975, mostra a reação de oxidação do

hidrogênio, Fig. 2.3. Um ponto é colocado ao lado do sistema químico como convenção para designar um radical.

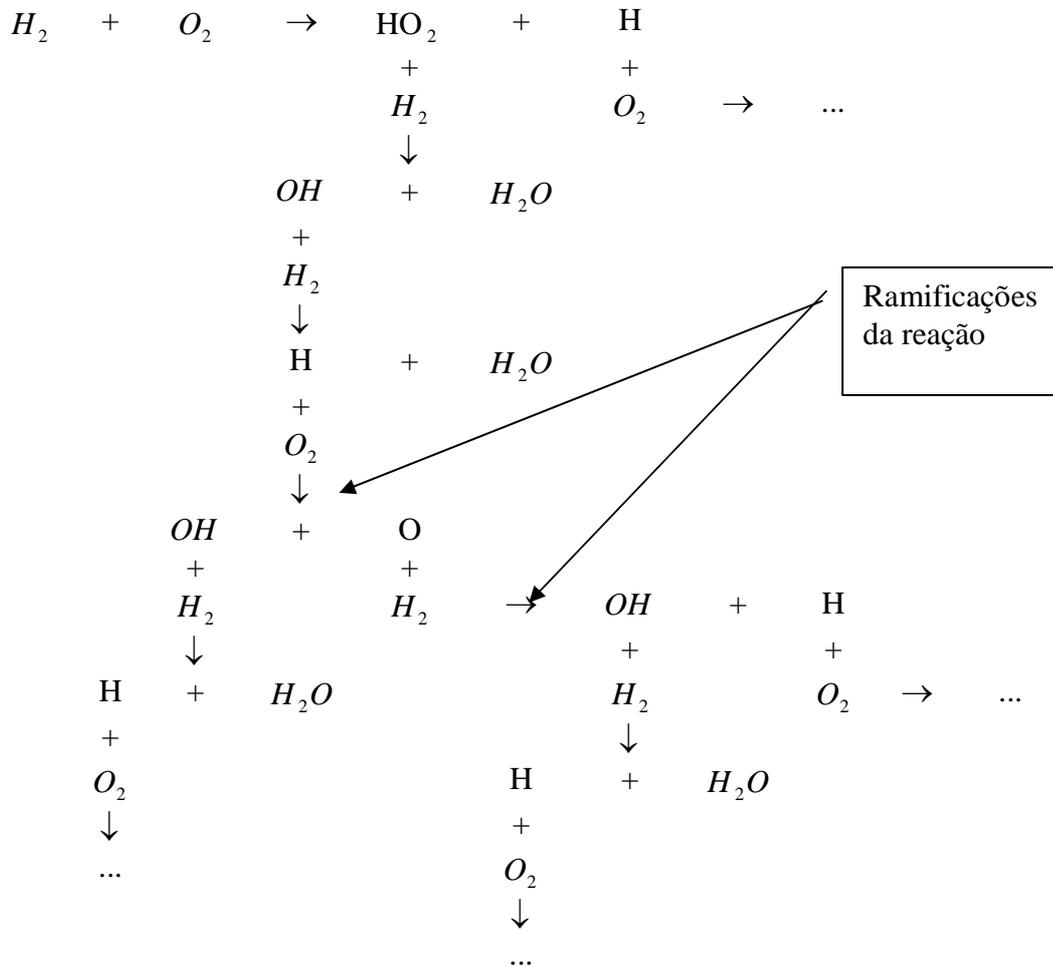
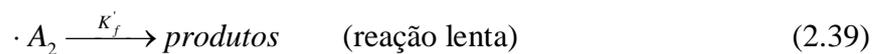
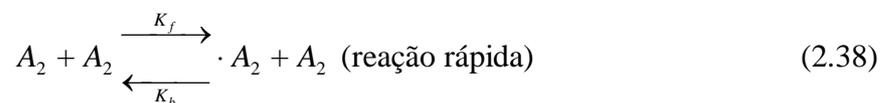


Figura 2.3 – Ramificações da oxidação do H.

Praticamente todas as reações ocorrem graças a colisões bi moleculares. Entretanto certas reações exibem cinética de primeira ordem. Esta possível anomalia foi explicada por Lindenmann, 1922, propondo que um processo de primeira ordem obtido como resultado de uma reação de dois passos tal como



O processo acima permanece de primeira ordem sempre que o passo rápido conseguir ser rápido o suficiente para manter uma concentração de equilíbrio de $\cdot A_2$, o complexo ativado de maior energia que dissocia. Como as colisões binárias diminuem com a pressão, espera-se que o primeiro passo diminua a velocidade com aumento da pressão, e a ordem geral da reação tornar-

se-á de segunda ordem em pressões menores. Verifica-se esta troca de ordem dos mecanismos de reação que parecem de primeira ordem em altas pressões, que é o que torna a explosão em deflagração na frente de chama numa reação muito rápida.

2.3. CHAMAS DE DIFUSÃO

Considerações feitas nas seções anteriores focaram-se em misturas de oxidantes e combustível que estavam distribuídas uniformemente. Se a mistura ocorrer rapidamente se comparada com as reações de combustão, ou muito a frente da zona de chama (como em um bico de Bunsen), a queima deve ser considerada em processo homogêneo. No entanto existem sistemas em que a mistura é lenta se comparada com as taxas de reação, tal que a mistura controla as taxas de reação. A maioria dos sistemas em uso na Engenharia cai sob esta classificação, as quais são chamadas chamas de difusão onde o combustível e oxidante chegam juntos a zona de reação através de difusão molecular e turbulenta. O combustível pode estar na forma de um jato gasoso ou uma fase condensada (líquido), ou ainda particulado sólido; A característica distintiva de uma chama de difusão é que a taxa de queima (ou consumo) é determinada pela taxa na qual o combustível e o oxidante são trazidos juntos nas proporções ideais para reação.

Entre estes extremos nos quais de um lado a reação química e de outro a mistura controla a taxa de queima, existe a região na qual a química e a mistura têm taxas similares e devem ser consideradas juntas.

2.3.1 JATOS DE COMBUSTÍVEIS GASOSOS

Somente a forma de um jato laminar de combustível depende da qualidade da mistura e da quantidade de oxidante suprido. Se um excesso de ar está presente a chama é fechada com uma forma alongada. Tais chamas ocorrem quando um jato é admitido dentro de um grande volume de ar quiescente, ou quando dois jatos coaxiais são usados, o interior contendo combustível e o exterior contendo oxidante em excesso. Se o fornecimento de ar no tubo externo é reduzido abaixo do estequiométrico, uma chama de maior diâmetro e menor altura é produzida como na Fig. 2.4.

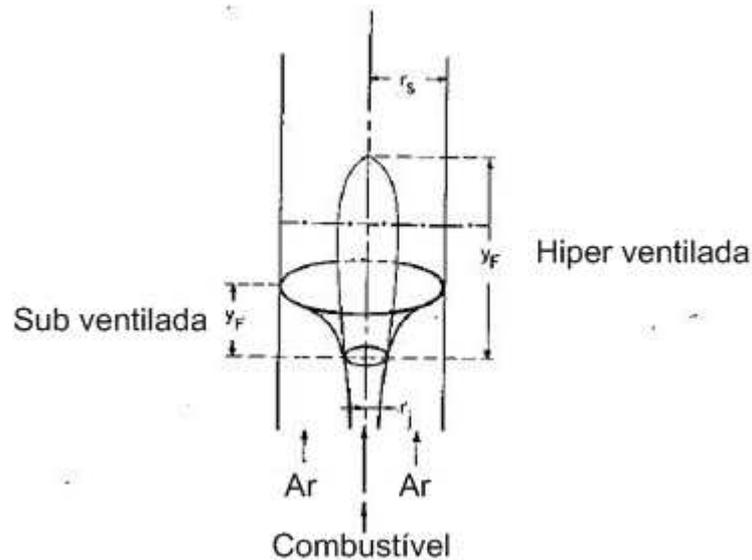


Figura 2.4 – Formas previstas para uma chama de difusão, [Glassman, 1977].

Ao contrário da chama pré-misturada, que tem uma forma fina e alongada, a chama de difusão tem uma região larga onde a composição dos gases muda. Estas mudanças ocorrem principalmente pela difusão dos reagentes e produtos, pois a reação atual aparentemente ocorre numa região alongada e fina.

Hotel e Hawthorne, 1949, mediram a distribuição de espécies através de uma chama laminar de difusão $H_2 - ar$. Os resultados que foram obtidos para uma distribuição radial que corresponde à linha cortando a seção da Fig. 2.4 é vista na Fig. 2.5.

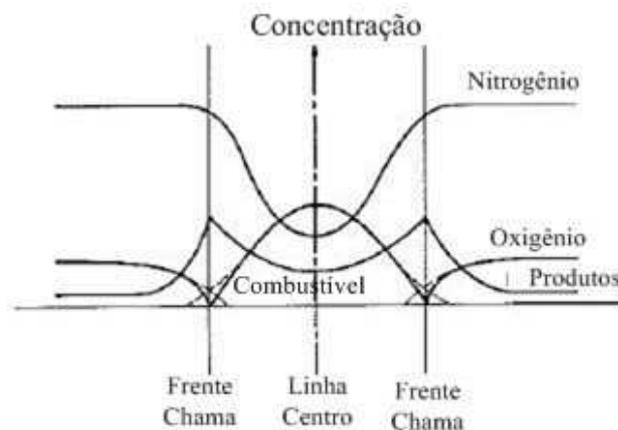


Figura 2.5 – Distribuição de componentes químicos ao longo da seção da chama, [Glassman, 1977].

As concentrações de combustível e oxidante são mínimas na frente de chama, onde as concentrações dos produtos são máximas. Estas condições se relacionam com o processo de difusão. Os perfis de concentração mostrados seriam os mesmos tanto se fosse o combustível e oxidante escoando na direção y como na Fig. 2.4 ou um simples jato de combustível em um reservatório muito grande de atmosfera quiescente. É muito importante verificar que a difusão

determina uma velocidade na direção x (ou r). A partir da frente de chama para o exterior, existem produtos saindo e, no caso do ar, oxigênio e nitrogênio entrando. Normalmente em regime permanente o volume dos produtos é maior que a soma dos outros dois. Portanto esta velocidade radial tem direção da chama para o exterior. A velocidade que o oxigênio entra na frente de chama tem direção oposta à velocidade dos produtos, advinda da difusão. Não há sumidouro na linha de centro e em regime permanente, a concentração dos produtos atinge um valor permanente na linha de centro. Este valor é determinado pela difusão dos produtos entrando e o montante transportado para fora pela velocidade de difusão.

O total desaparecimento da frente de chama indicaria taxas de reação infinitas, é mais plausível a representação da distribuição radial dada pelas linhas tracejadas da Fig. 2.5. As linhas tracejadas exageram um pouco a espessura da frente de chama, mesmo com taxas finitas de reação a zona de chama é fina. Hottel e Hawthorne, 1949, mostraram que em chamas de difusão o combustível e o oxidante difundem em direção um do outro em taxas que são de proporções estequiométricas, caracterizando um sumidouro para duas espécies.

Atualmente já é possível acessar grande quantidade de informação sobre a queima de jatos livres de combustível. A hipótese fundamental que é feita é que o processo de combustão não afeta a taxa de mistura entre o jato de combustível e o ambiente oxidante. A maior parte dos modelos supõe que enquanto o oxidante se mistura com o combustível, ocorre reação. No problema cilíndrico, o quanto o oxidante tiver difundido a partir da fronteira do jato para a linha de centro, o combustível deverá ter sido completamente queimado. O término da chama está no limite onde não há mais combustível na linha de centro e então a altura da chama é conhecida.

Hottel e Hawthorne, 1949, caracterizam a variação do envelope de chama versus a velocidade no tubo, conforme a Fig. 2.6.

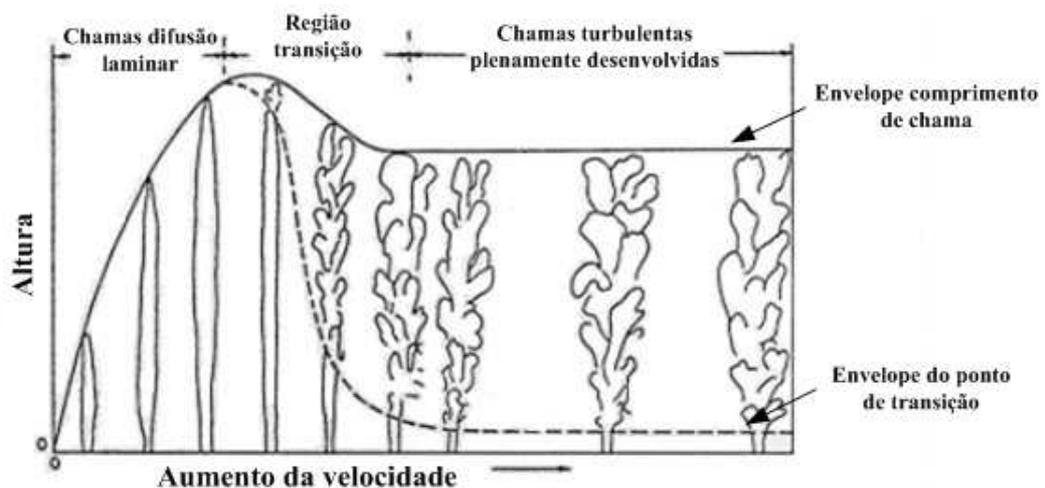


Figura 2.6 – Variação do envelope de chama versus velocidade do jato, [Hottel e Hawthorne, 1949].

2.3.2. CHAMAS TURBULENTAS

Quando o escoamento de gases é turbulento desenvolve-se uma chama mais ondulada e a taxa em que a mistura de combustível é consumida aumenta significativamente. A chama turbulenta ao contrário da chama laminar é normalmente acompanhada por ruído devido a variação de pressão.

Para a chama laminar, é possível definir uma velocidade de chama que, sob limites razoáveis, é independente da técnica experimental. É desejável tal parâmetro para chamas turbulentas também, mas nestes casos as velocidades de propagação turbulentas dependem não somente da técnica experimental, mas do conceito adotado para análise da chama turbulenta. O estudo prático de chamas turbulentas tem forte conexão com desenvolvimento e adaptação de sistemas de queimadores, onde se conhece o fato que a intensa turbulência no escoamento aumenta efetivamente velocidades de propagação.

A taxa de queima de uma mistura combustível-oxidante em chamas turbulentas comparada com chamas laminares deve-se a combinação de um ou mais dos seguintes processos

- a. O escoamento turbulento distorce a chama o que aumenta significativamente a superfície, enquanto que a velocidade dos gases continua a mesma para um caso laminar.
- b. Turbulência aumenta a taxa de transporte de calor e espécies químicas ativas, aumentando a velocidade de queima normal a superfície da chama
- c. Turbulência rapidamente mistura os gases queimados com os não queimados de tal forma que a chama se torna uma zona de reação homogênea em que a taxa depende na razão entre gases queimados e não-queimados produzidos no processo de mistura.

Os dois primeiros processos receberam maior enfoque em primeiras pesquisas, o terceiro foi considerado em casos de problemas específicos com combustores. Considerações teóricas baseadas nestes conceitos foram consideradas e começaram com Damkohler, 1940, na Alemanha e Schelkin, 1943, na Rússia.

Damkohler distinguiu dois modos de desenvolvimento da chama sendo pequena escala, turbulência de alta intensidade nas quais a relação do tamanho dos vórtices ao da espessura de chama é pequena; E grande escala, turbulência de baixa intensidade na qual a relação é grande. Foi suposto que ambas as situações são existentes na maioria das chamas e determinado que turbulência de maior escala é de grande importância em aplicações com combustores.

O estudo de Damkohler mostra também que a turbulência de menores escalas simplesmente aumentou as propriedades de transporte na deflagração. Damkohler aponta que a

somente difusividade turbulenta ε não é suficiente para descrever o efeito da turbulência nas chamas já que

$$\varepsilon \sim l \left(\overline{u'^2} \right)^{1/2} \quad (2.47)$$

onde l é a escala e $\left(\overline{u'^2} \right)^{1/2}$ a intensidade de turbulência e ambos têm diferentes influências na propagação de chama, sendo estas variáveis de interesse.

No caso de turbulência de grande escala e baixa intensidade, a chama irá criar ondulações, mas as propriedades de transporte se manterão as mesmas. Já que para velocidade laminar de chama, S_L , constante, a área da chama é proporcional a velocidade do escoamento, espera-se que o aumento de área devido à turbulência seja proporcional a u' . Conceitualmente, esta proporcionalidade pode ser vista na Fig. 2.7.

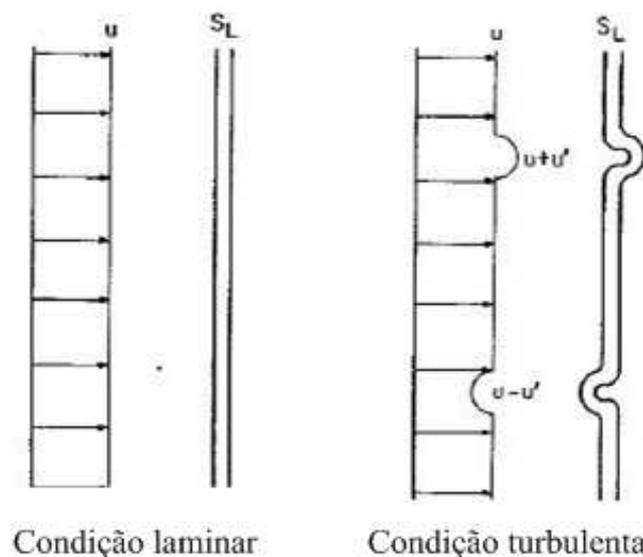


Figura 2.7 – Distorção da frente laminar de chama, [Glassman, 1977].

Para turbulência de pequena escala, mudanças na transferência de calor e características de difusão devem ser esperadas.

A hipótese que a chama turbulenta consiste de uma chama laminar constante é explícita em vários dos estudos qualitativos de combustão turbulenta. Os trabalhos de Damkohler e Schelkin geraram uma série de trabalhos posteriores de outros autores, que seguindo o mesmo conceito da chama enrugada, consideraram a quebra da superfície da chama mais extensa e então encontrando formulações mais e mais complexas.

Estudos fotográficos mostram que a chama turbulenta é mais espessa que a laminar, sendo uma chama mais compacta, [Glassman, 1977]. Estas imagens informam que em muitas

chamas turbulentas, particularmente aquelas em que turbulência de grande intensidade e grande escala não existe, o conceito de relação da velocidade com o tempo químico falha. A falha do conceito de chama enrugada levou alguns ao conceito de zona de reação distribuída, ou reatores distribuídos.

Mostrou-se experimentalmente que mudanças na razão de equivalência e temperatura de mistura podem causar uma mudança no fluxo radiante de uma zona de chama laminar. Modificações nas razões de mistura e pré-aquecimento são esperadas para ocorrer localmente em uma zona de escoamento turbulento. Em outras palavras, o problema surge ao formar um modelo para uma zona de reação distribuída que traz por coincidência a determinação experimental antes citada que a zona de reação não é somente uma chama laminar distorcida e os resultados experimentais em que a química da zona de reação não pareça ser fortemente afetada pela turbulência. A formação do radical radiante é rápida se comparada com a mistura turbulenta.

Uma hipótese trazida por John e Mayer, 1957, diz que os mecanismos de mistura e reação podem ser interpretados em termos de um tempo característico químico τ_c e o tempo característico do escoamento τ_m .

O tempo químico é definido como

$$\tau_c = \frac{d_L}{S_L} \quad (2.67)$$

onde d_L é a espessura da chama laminar. τ_c aumenta com a redução da pressão e da atividade química. O tempo do escoamento pode ser definido como

$$\tau_m = \frac{l_\lambda}{\left(\overline{u'^2}\right)^{1/2}} \quad (2.68)$$

onde l_λ é a micro escala da turbulência, como antes, $\left(\overline{u'^2}\right)^{1/2}$ é a intensidade de turbulência. τ_m aumenta com diminuição da velocidade do escoamento e com aumento da escala de turbulência.

Turbulência fraca ($\tau_m \gg \tau_c$) perturba pouco a frente de chama. Neste caso τ_m e τ_c são interpretados como sendo inversamente proporcionais aos gradientes característicos de velocidade do escoamento aproximando a frente de chama e a velocidade laminar de chama, respectivamente.

Turbulência forte ($\tau_m \approx \tau_c$) quebra a frente de chama laminar. Ao quebrar esta frente de chama, τ_m e τ_c perdem seu significado como gradientes de velocidades recíprocos. É suposto que a zona de combustão contenha distribuição estatística de centros de deflagração. Neste caso,

τ_m é interpretado como a vida média de um vórtice e τ_c como o tempo de reação química nestes bolsões de combustíveis.

Uma maior turbulência ($\tau_m \ll \tau_c$) mostra seus efeitos ao dissolver localmente e pré-aquecer os centros iniciais de deflagração e no limite onde irá resultar em misturas reagentes homogêneas.

2.4. IGNIÇÃO

Analisando a entalpia de formação [Wylen, 1970] de alguns compostos químicos, apresentadas na Fig. 2.8, verifica-se que a mistura de um combustível com o oxigênio poderá reagir quimicamente, pois os produtos resultantes da reação, tais como CO_2 , H_2O etc., apresentam um arranjo com potencial químico em nível inferior ao da mistura reagente.

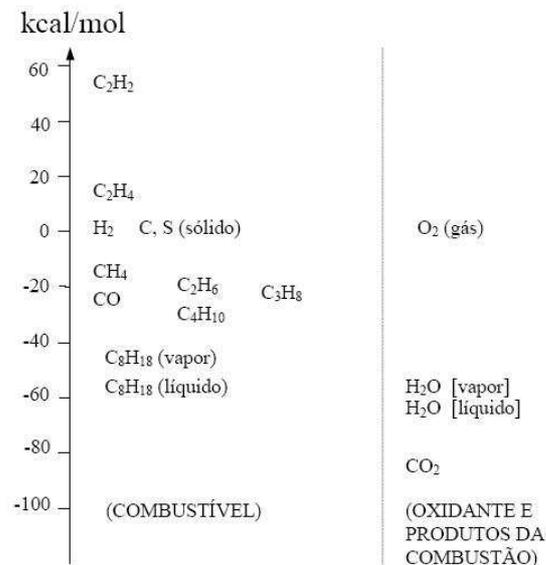


Figura 2.8 – Gráfico com entalpias de formação de alguns compostos químicos, [IPT, 2000].

Entretanto, na condição ambiente, $P \sim 1$ [atm] e $T \sim 300$ [K], quase a totalidade das misturas de combustível gasoso com o oxidante não reagem espontaneamente.

Observando-se que a mistura se encontra em equilíbrio do tipo meta-estável, análogo a uma configuração mecânica sugerida na Fig. 2.9, onde a esfera encontra-se numa posição em equilíbrio estável para pequenas excitações, mas se a excitação for suficiente para deslocar a esfera para um potencial superior a $H + \Delta H$, então ela se moverá para uma nova posição de equilíbrio. Analogamente a ignição é a excitação que desencadeia a combustão para uma mistura de combustível com o oxidante.

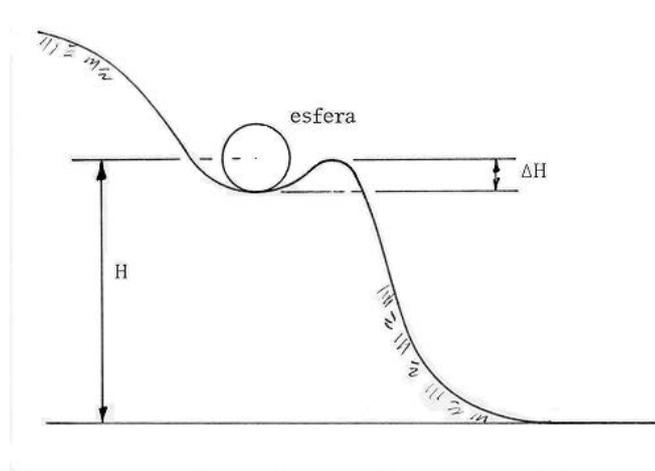


Figura 2.9 – Representação do equilíbrio e da necessidade de um acréscimo de energia para iniciar o movimento da esfera, [IPT. 2000].

Semelhantemente nos sistemas contendo misturas gasosas é necessário um acréscimo de energia inicial para garantir a formação dos produtos, Fig. 2.10, e constante liberação de calor pelo sistema. Uma vez iniciada a reação deverá se manter dentro dos critérios de limite de flamabilidade, que envolvem pressão, temperatura e concentração.

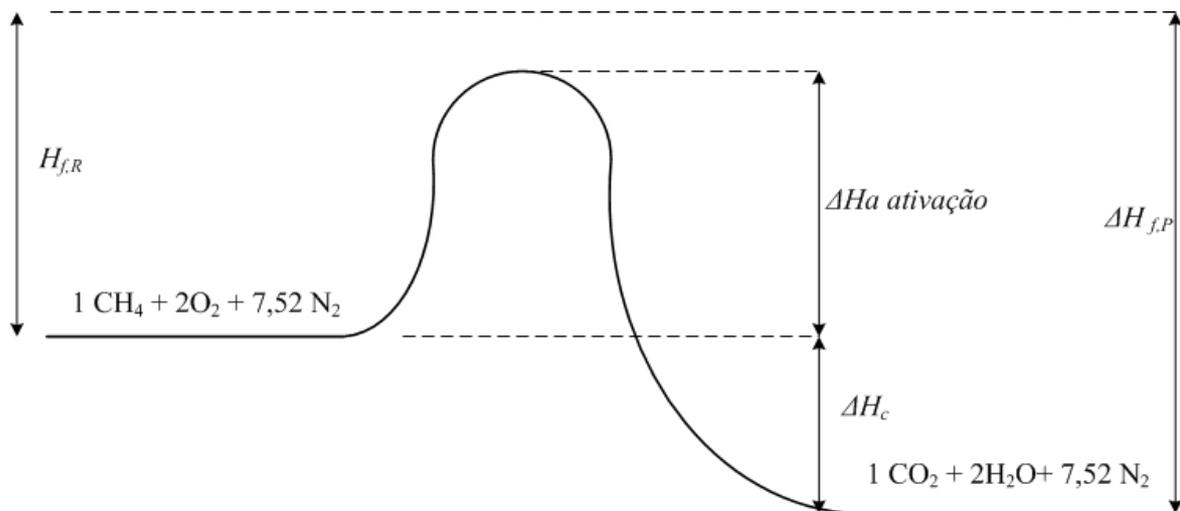


Figura 2.10 – Representação do acréscimo de energia no sistema químico.

Observa-se, na Fig. 2.8, que as substâncias C_2H_2 e C_2H_4 , principalmente o acetileno, possuem a entalpia de formação positiva, diferenciando-se das demais substâncias. Portanto, como estas substâncias se encontram em equilíbrio do tipo meta-estável, análogo à configuração mecânica da Fig. 2.9, estas podem se decompor em C_n e H_2 , ou ainda se polimerizar, formando hidrocarbonetos de cadeia maior com liberação de energia.

Esta instabilidade do acetileno puro (sem mistura com oxigênio) manifesta-se através de uma transformação violenta, para pressões absolutas superiores a 3,5 [kgf./cm²], na temperatura

ambiente. Portanto recomendam-se pressões de trabalho inferiores a 2,0 [kgf./cm²] no seu manuseio.

A ignição pode ser induzida por dois métodos, que são:

- aquecimento dos reagentes até ocorrer a auto-ignição, melhor detalhada no Anexo A;
- excitação, através de uma fonte num ponto singular, tal como: faísca elétrica, corpo incandescente ou uma chama externa “piloto”, caracterizando a ignição forçada.

2.4.1. IGNIÇÃO FORÇADA

A ignição forçada ocorre quando uma mistura reagente é rapidamente e localmente aquecida por uma fonte de calor como uma partícula sólida incandescente, um filamento elétrico aquecido ou uma centelha, uma quantia de gás quente, uma chama piloto, etc. elevando a taxa de reação. Uma chama pode ser iniciada na proximidade desta fonte de calor e propagar para o resto da mistura fria (meio reagente) através do mecanismo de propagação da chama, envolvendo basicamente os fenômenos de transmissão de calor e massa. Tal chama de iniciação e propagante são definidas como ignição forçada. A partir desta definição é possível perceber que aquecimento local é muito menos eficaz que aquecimento do volume todo.

A ignição forçada é influenciada pela pressão e temperatura da mistura reagente e também pelas condições de contorno, pela própria fonte e pela condição de escoamento. A influência das condições de contorno pode ser devida à natureza química das paredes, que podem ser construídas com materiais refratários (óxidos, carbetos de silício, etc.) ou metais (ferro, cobre, etc.), resultando efeitos catalíticos e trocas de calor diferente na mistura reagente, ambos interferindo na taxa de reação.

Um catalisador, devido à sua propriedade de adsorção preferencial para certas substâncias, altera a energia de ativação E_A da reação química, conforme ilustrado no gráfico da Fig. 2.11, [Russel, 1982].

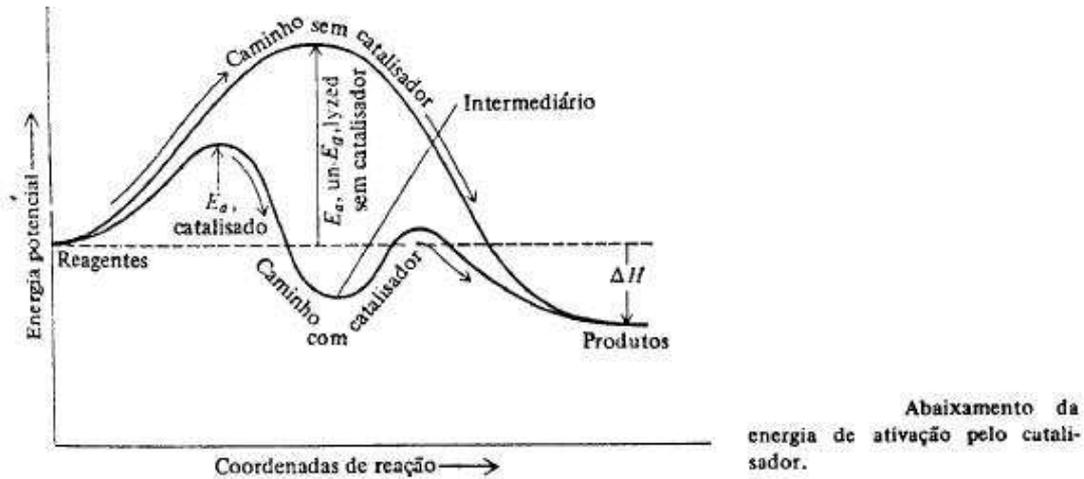


Figura 2.11 – Efeito do catalisador na energia de ativação, [Russel, 1982].

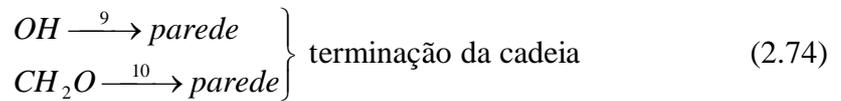
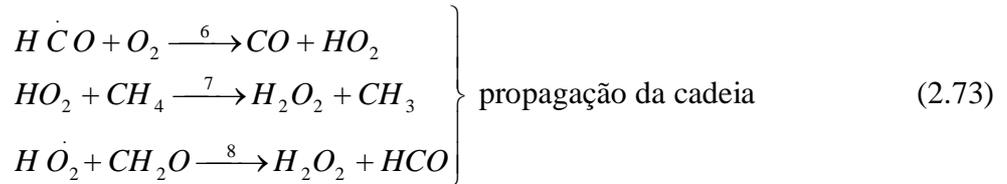
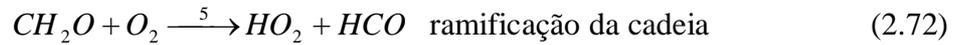
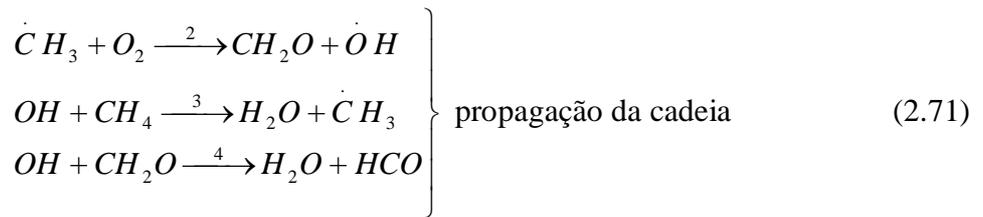
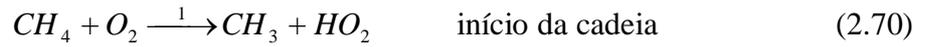
A existência de uma parede fria na presença da chama provoca um efeito de extinção da chama quiescente. A parede esfria os gases da sua vizinhança, reduzindo a taxa de reação e extinguindo o processo de combustão. Percebe-se visualmente que há uma separação entre a superfície fria e a frente de chama. A menor distância estabelecida entre a parede e a chama é denominada de distância de extinção.

2.5. MECANISMOS DETALHADOS DE OXIDAÇÃO DO METANO

O Metano exibe certas características que são diferentes de todos os outros hidrocarbonetos. Tabelas de energia de ligação mostram que a primeira quebra da ligação C-H no metano é kilocalorias maior do que outras, e certamente maior que a segunda ligação C-H em um hidrocarboneto de cadeia maior. Então não é surpreendente que várias evidências experimentais levem a acreditar que é mais difícil fazer a ignição de misturas metano/ar (oxigênio) que outros hidrocarbonetos. Em baixas temperaturas, até mesmo o ataque do radical oxigênio é lento.

A partir do fato que o metano contém apenas um átomo de carbono, este não forma aldeídos, que fornece ramificações da reação em cadeia rapidamente mesmo sob condições de baixa temperatura. Formam-se formaldeídos, que fornecem ramificação da reação em cadeia necessária para explosão, [Glassman, 1977].

O esquema a seguir explica simplificada os resultados da oxidação do metano sob baixas temperaturas



Como citado anteriormente à reação (1) é lenta. As reações (2) e (3) são rápidas já que envolvem um radical e um dos reagentes iniciais. O mesmo é verdade para as reações (5)-(7). A reação (5) representa o passo de ramificação necessária. Reações (4) e (8) introduzem o radical formil conhecido por existir no processo de combustão a baixa temperatura.

A combustão do metano à maior temperatura envolve oxidação posterior ainda do monóxido de carbono gerando dióxido de carbono. Em sistemas com hidrocarbonetos, pode-se dizer que uma referência particular no estudo deste assunto é a discussão da oxidação a baixas temperaturas, devido ao fato do monóxido de carbono não produzir dióxido de carbono na sua reação. Se a conversão de CO em CO_2 não está escrita, então o sistema de taxas é para baixa temperatura. A conversão de CO em CO_2 compete com a direta oxidação de CH_4 retardando a mesma. É determinado que a reação



compete com a reação (3) e é uma ordem de magnitude mais lenta. Então, quando a concentração de CO aumenta, o efeito do passo acima citado é grande.

Em temperaturas mais elevadas, passos de energia de ativação mais alta começam a ocorrer particularmente reações de pirólise. A presença de grandes concentrações de radicais de O e H também afetam o sistema. Um sistema mais detalhado de equações e constantes de taxa aproximadas foi descrito por Seery e Bowman, 1970, como mostrado na Tab. 2.3.

Tabela 2.3 – Sistema de equações representando a oxidação do metano, [Kanury, 1975].

Reação	K , constante de taxa
1 $CH_4 + M \rightarrow CH_3 + H + M$	$1.5 \times 10^{19} \exp(-100600/RT)$
2 $CH_4 + O_2 \rightarrow CH_3 + HO_2$	$1.0 \times 10^{14} \exp(-45400/RT)$
3 $O_2 + M \rightarrow 2O + M$	$3.6 \times 10^{18} T^{-1} \exp(-118800/RT)$
4 $CH_4 + O \rightarrow CH_3 + OH$	$1.7 \times 10^{13} \exp(-8760/RT)$
5 $CH_4 + H \rightarrow CH_3 + H_2$	$6.3 \times 10^{13} \exp(-12700/RT)$
6 $CH_4 + OH \rightarrow CH_3 + H_2O$	$2.8 \times 10^{13} \exp(-5000/RT)$
7 $CH_3 + O \rightarrow H_2CO + H$	$10^{13} - 10^{15}$
8 $CH_3 + O_2 \rightarrow H_2CO + OH$	$10^{11} - 10^{14}$
9 $H_2CO + OH \rightarrow HCO + H_2O$	$10^{13} - 10^{15}$
10 $HCO + OH \rightarrow CO + H_2O$	$10^{12} - 10^{15}$
11 $CO + OH \rightarrow CO_2 + H$	$3.1 \times 10^{11} \exp(-600/RT)$
12 $H + O_2 \rightarrow OH + O$	$2.2 \times 10^{14} \exp(-16600/RT)$
13 $O + H_2 \rightarrow OH + H$	$4.0 \times 10^{14} \exp(-9460/RT)$
14 $O + H_2O \rightarrow 2OH$	$8.4 \times 10^{14} \exp(-18240/RT)$
15 $H + H_2O \rightarrow H_2 + OH$	$1.0 \times 10^{14} \exp(-20400/RT)$
16 $H + OH + M \rightarrow H_2O + M$	$2.0 \times 10^1 T^{-1}$
17 $CH_3 + O_2 \rightarrow HCO + H_2O$	$10^{11} - 10^{12}$
18 $HCO + M \rightarrow H + CO + M$	$2.0 \times 10^{13} T^{1/2} \exp(-28800/RT)$

Determinou-se por Seery e Bowman, 1970, que em temperaturas da ordem de 2000 K, a reação (1) é a única, das três primeiras reações que iniciarão com radicais, que será rápida o suficiente para explicar a ignição por ondas de choque. O ataque do CH_4 por vários radicais formados ao longo do tempo no sistema é mostrado nas reações (4)-(6). Considerando-se as concentrações, OH e H iriam dominar e a efetividade da reação de baixa ativação do OH é então considerável. Em certas situações cinéticas, deve-se tomar cuidado ao negligenciar a reação (4). Em altas temperaturas os sistemas contendo metano e todos outros hidrocarbonetos, o primeiro passo de iniciação é quase sempre com certeza a pirólise da molécula de hidrocarboneto para fornecer radicais de alquila (este é o motivo da presença do 3º corpo, M).

Vários estudos sobre chamas mostraram que o radical metil é atacado por O e O_2 formando formaldeídos, como mostrado nas reações (7) e (8). Quando em temperaturas ainda mais elevadas (aprox. 1000 [°C]), Benson, 1972, demonstrou a reação (8) sob fundamentos termodinâmicos. A reação (7) deve seguir pelo caminho



Os passos do formaldeído seguem nas reações (9) e (10).

Durante o período de indução quando $(O)/(O_2) \ll 10^{-3}$, Seery e Bowman, 1970, determinaram que a reação (7) pode ser negligenciada em comparação com a reação (8), esta determinação foi feita anteriormente a determinação analítica de Benson.

Para $K_9 / K_8 > 10^2$, as reações (8) e (9) podem ser combinadas



gerando a reação (17).

A reação (18), que demonstra a decomposição de formil, podendo tornar-se importante também. Não surpreende que tanto em mecanismos de baixas ou altas temperaturas a adição de formaldeído reduz o período de indução da oxidação do metano. Nota-se também que o radical HO_2 não está incluído no esquema de alta temperatura, isto devido ao fato de sua vida nestas temperaturas ser muito curta.

O passo da oxidação do CO pelo OH, e os passos de reação $H_2 - O_2$ devem ser incluídos porque a reação (11) produz radicais H e a concentração de radicais O também é maior em temperaturas elevadas. Nenhum destes passos é apropriado para oxidação à baixa temperatura.

2.6. SIMULAÇÃO NUMÉRICA DO PROCESSO DE COMBUSTÃO

A bibliografia relata diversos trabalhos em simulação de processos de combustão do metano, diversos autores apresentam soluções próprias de cálculo das equações necessárias para solução do sistema e vários trabalhos relatam soluções em programas comerciais de mecânica dos fluidos computacional.

Garreton e Simonin, 1995, apresentam um encontro de diferentes centros de pesquisa em experimentação e simulação de combustão comparando resultados de diferentes programas comerciais modelados pelos centros convidados e também programas produzidos por alguns destes centros, com dados experimentais de uma câmara de combustão testada por eles. Os resultados apresentam bastantes diferenças e comenta-se bastante sobre a dificuldade da modelagem.

Em outro trabalho Magel et al., 1996a, investigam numericamente o processo de combustão de gás natural utilizando o experimento de Garreton e Simonin, 1995, para validação. O conceito do modelo EDC é utilizado, entretanto também se utiliza o conceito de reatores distribuídos ao longo da câmara para avaliar também a cinética química. Como resultado de suas sete investigações obtiveram perfis de temperatura, de concentrações de oxigênio, de monóxido de carbono e de dióxido de carbono para varias posições de interesse no interior da câmara de

combustão. Dando seqüência ao trabalho de Magel et al., 1996a, Magel et al., 1996b, fazem um estudo, também numérico, do processo de combustão turbulenta no interior da mesma câmara de combustão. Neste trabalho é realizada uma simulação mais detalhada das reações químicas para um processo de combustão turbulenta sem pré-mistura. A radiação térmica foi considerada usando o método de Ordenadas Discretas, assumindo coeficiente de absorção do gás igual a 0,5 [m^{-1}]. Dentre os resultados obtidos também estão os perfis de NOx, obtidos com cálculos de pós-processamento. Os resultados deste trabalho também foram comparados com os dados experimentais de Garreton e Simonin, 1995, obtendo boa concordância.

Isnard e Gomes, 1999, apresentaram bons resultados simulando a câmara de Garreton e Simonin, 1995, utilizando um modelo bidimensional, modelando a turbulência pelo modelo $k - \varepsilon$, utilizando modelo misto na reação de oxidação a dois passos do metano. O modelo de radiação utilizado é o DTRM. Somente na modelagem da formação de óxido de nitrogênio que houve desvio em relação aos dados experimentais. As conclusões são que um modelo de dois passos permite melhor previsão de CO o que garante uma melhor determinação do campo de temperaturas.

Nieckele et al., 2001, realizam uma análise numérica envolvendo processos de combustão em uma câmara cilíndrica, usando o programa de mecânica dos fluidos computacional FLUENT, para a qual dados experimentais foram avaliados. Neste trabalho é apresentado um estudo comparativo entre diferentes modelos de combustão, comparando os resultados obtidos com dados experimentais apresentados em Magel et al., 1996a, de Garreton e Simonin, 1995. Dentre os modelos de combustão utilizados podem-se citar os de taxas finitas generalizadas, tais como o E-A (*Eddy Break-Up Arrhenius*), e os modelos pre-PDF. Foi mostrado que o modelo de combustão que mais se aproxima dos dados experimentais foi o combinado de Arrhenius e Magnussen, E-A, obtendo excelente concordância com os resultados experimentais, mas ainda com algumas diferenças, conforme Fig. 2.12. Na seqüência deste trabalho Nieckele et al., 2002, desenvolveram um estudo numérico sobre a mesma geometria do trabalho anterior, utilizando o modelo misto de taxas finitas generalizadas e quebra de vórtices para cálculo das taxas de reações químicas (equações de Arrhenius e Magnussen), porém analisando duas situações para o processo de combustão. Na primeira situação foi utilizada uma única reação global para prever a queima do combustível (metano). Na segunda foi considerada a reação química do metano em duas etapas. Os resultados obtidos também foram comparados com dados experimentais de Garreton e Simonin, 1995, obtendo boa concordância, sendo que o caso com duas etapas apresentou os melhores resultados, muito próximos dos valores experimentais.

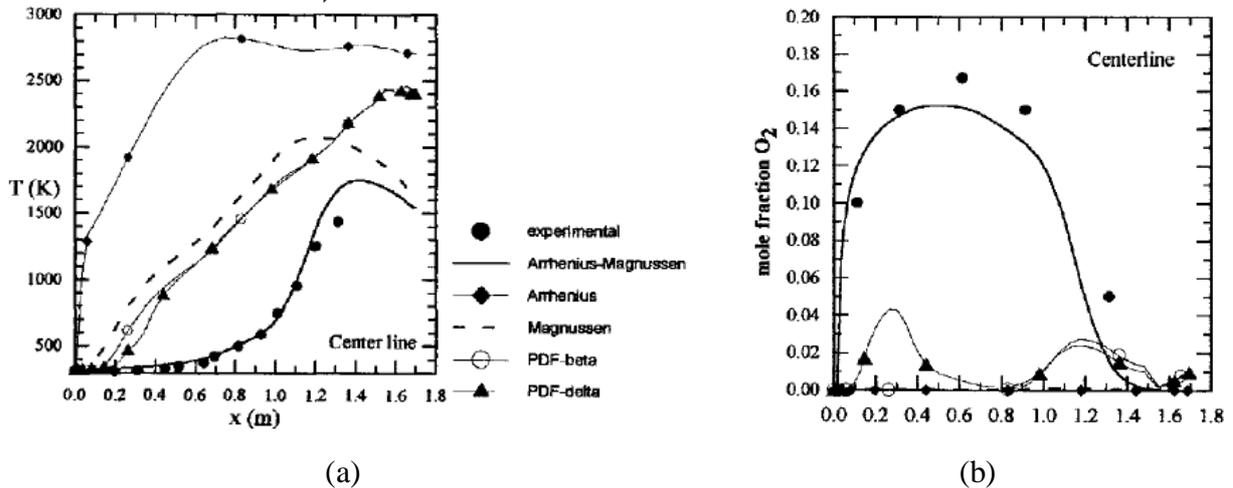


Figura 2.12 – Gráficos da simulação de Nieckele et al., 2002, (a) Temperatura ao longo do eixo da câmara (b) Concentração de oxigênio ao longo do eixo da câmara.

Ibanez e Oliveira, 2006, mostram em seu trabalho resultados importantes com diferenças entre modelos de turbulência na solução de jatos dentro de câmaras cilíndricas. O resultado positivo do modelo de turbulência SST, denota sua boa capacidade de resolver escoamentos com recirculações e expansões. O modelo $k-\varepsilon$ também apresenta bom desempenho. O trabalho utiliza o programa Ansys CFX 10.0 para determinar um modelo computacional indicado para simulação de casos de injetores de gás para queimadores atmosféricos. Os casos estudados são os casos experimentais de Pitts, 1991a, e Djeridane, 1996. No primeiro caso, onde é queimado CH_4 , os modelos de turbulência ($k-\varepsilon$ e SST) mostraram bons resultados, não excedendo um desvio de 6% dos dados experimentais. Já um modelo de transporte de tensões de Reynolds SSG apresenta desvios de 20%. No segundo caso também se repete a melhor precisão dos modelos de turbulência a duas equações quando comparados com os dados experimentais e com maiores números de Reynolds pode-se verificar ligeira melhora na precisão do modelos de transporte de tensões de Reynolds. Somente por indicação da bibliografia que o autor não indica o modelo de duas equações $k-\varepsilon$, pois os resultados numéricos mostraram-se bem próximos dos experimentais.

A maioria dos trabalhos envolvendo queimadores a gás tem por objetivo melhorar sistemas de combustão para equipamentos industriais, por exemplo, turbinas a gás que além de necessitarem boa eficiência necessitam de baixas emissões de poluentes. Ao pesquisar a bibliografia encontra-se, portanto uma série de trabalhos com este foco.

Marias, et al., 2002, realiza um trabalho de comparação também com o programa comercial FLUENT para a análise de jatos livres reativos e para a simulação de um queimador com *swirl*. São comparadas combinações de interpolação do termo advectivo e modelos de

turbulência. O modelo $k - \varepsilon$ apresenta bons resultados e o esquema de interpolação de segunda ordem mostra bons resultados também, entretanto o autor alerta que a modelagem é altamente dependente do interesse do Engenheiro e que as soluções do software não são tão abrangentes como esperado.

Meier, 2000, experimenta um queimador com alto *swirl* (0.9) e depois realiza uma simulação numérica no programa comercial FLUENT, para validação e melhor visualização do fenômeno. O resultado é muito ruim e inclusive apresenta uma forma deformada da chama, Fig. 2.13, citando no trabalho a incapacidade de programas comerciais de simular tal fenômeno turbulento e complexo. Sadiki, et al., 2000, simula o mesmo queimador com um modelo de taxa de reação baseado em funções de densidade de probabilidade e consegue resultados mais próximos que a simulação desenvolvida por Meier, 2000. Somente Frassoldati, 2005, apresenta um procedimento para modelagem do queimador experimentado por Meier, 2000, chegando a resultados muito próximos do experimental, também usando FLUENT e o modelo misto de cálculo da taxa de reação.

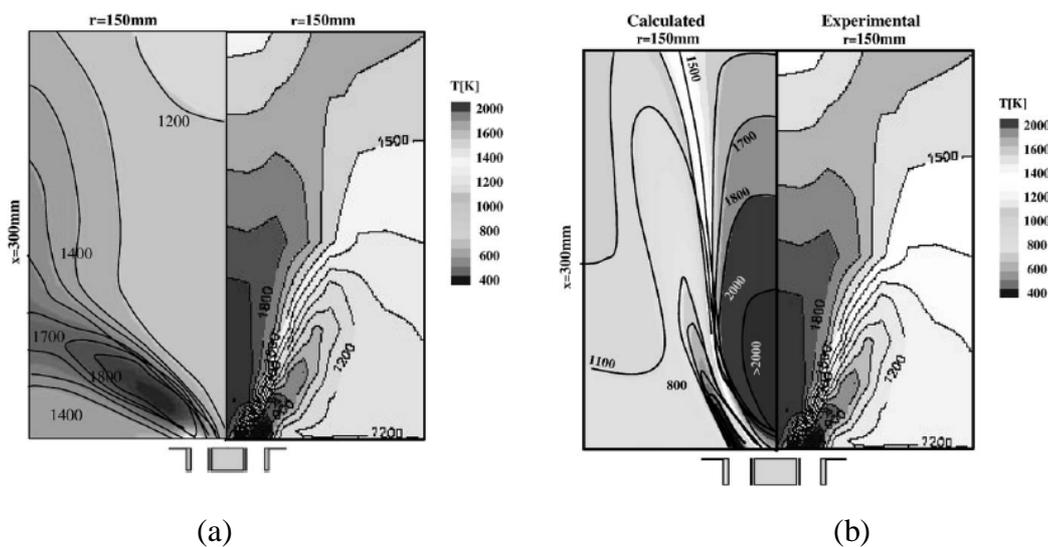


Figura 2.13 – Campos de temperatura encontrados por (a) Meier, 2000, e (b) Frassoldati, 2005.

Os trabalhos na área de simulação computacional da combustão focam principalmente em modelos de turbulência que consigam boa determinação do escoamento, modelos de reação que consigam modelar realisticamente o termo fonte da equação de transporte de espécies químicas e energia, modelos de radiação robustos que desenvolvam bem a solução do termo radiativo na equação da energia sem aumentar demasiadamente o tempo computacional, e modos de conjugar estas três funcionalidades nas diversas formas de fornalhas e queimadores.

Segundo Dennis, 2002, a taxa média de combustão RR não pode ser encontrada através de uma média das leis de Arrhenius. Uma aproximação física é necessária para derivar modelos

para combustão turbulenta. Combustão turbulenta envolve diversas escalas de comprimento, velocidade e tempo descrevendo campo de velocidades e reações químicas. A análise física é em grande parte baseada na comparação destas escalas. Isto pois a média do termo exponencial dependente da temperatura não é igual a exponencial da temperatura média.

O escoamento turbulento é caracterizado por um número de Reynolds comparando transporte turbulento a forças viscosas:

$$\text{Re} = \frac{ul_t}{\nu} \quad (2.78)$$

onde u é a velocidade rms (relacionada ao quadrado da energia cinética k), l_t é a escala integral de comprimento e ν a viscosidade cinemática do escoamento.

O número de Damkohler compara as escalas de tempo turbulento (τ_t) e de reação química (τ_c):

$$\text{Da} = \frac{\tau_t}{\tau_c} \quad (2.79)$$

No limite de altos números de Damkohler ($\text{Da} \gg 1$), o tempo químico é comparado ao turbulento, correspondendo a uma zona fina de reação, distorcida e transportada (convecção) pelo escoamento. A estrutura interna da chama não é fortemente afetada pela turbulência e pode ser descrita como um elemento de chama laminar chamado *flamelet*. As estruturas turbulentas recolhem e esticam a superfície da chama. Por outro lado, um baixo número de Damkohler ($\text{Da} \ll 1$) corresponde a uma reação química lenta. Reagentes e produtos são misturados por estruturas turbulentas antes da reação. Neste perfeito reator, a reação média pode ser expressa pelas leis de Arrhenius usando frações mássicas médias e temperatura.

Em chamas turbulentas enquanto que a extinção não ocorrer, a maioria das situações práticas corresponde a altos ou médios números de Damkohler.

Dois números, uma razão de comprimentos e uma razão de velocidades, são utilizados para identificar combustão de chamas pré-misturadas. O problema é mais difícil em combustão turbulenta não pré-misturada porque chamas de difusão não se propagam e, portanto, exibem uma velocidade característica. Também a espessura da chama depende da aerodinâmica que controla a espessura das zonas locais de mistura entre combustível e oxidante e nenhuma escala de comprimento que possa ser facilmente identificada pra chamas de difusão. Esta dificuldade é bem ilustrada na literatura, onde várias escalas características foram suprimidas dependendo dos autores, segundo Dennis, 2002. Estas classificações de chamas não pré-misturadas turbulentas devem ser organizadas em três principais grupos:

- O regime de escoamento turbulento é caracterizado por um número de Reynolds, onde um número de Damkohler é escolhido para a zona de reação [Libby, 1994].
- O campo de fração de mistura é usado para descrever a mistura usando Z e um número de Damkohler (razão do número de Kolmogorov e tempo químico) caracterizando a chama [Bray, 1994].
- Uma relação de velocidades (intensidade turbulenta em relação à velocidade de chama) e uma relação de comprimentos (escala integral em relação à espessura de chama pré-misturada) devem ser construídas, [Borghi, 1988], para delinear os regimes.

Uma chama laminar difusiva é totalmente determinada a partir de um número de Damkohler

$$Da^* = (\tau_c \chi_{st})^{-1} \quad (2.80)$$

onde o valor do tempo químico τ_c depende da química do combustível [Liñán, 1994]. Neste caso, a taxa de dissipação (difusão) escalar sob condição estequiométrica ($Z = Z_{st}$), $\chi = \Gamma |\nabla Z|_{st}^2$, mede ao mesmo tempo um tempo mecânico, $\tau_\chi = \chi_{st}^{-1}$, e um comprimento de mistura característico, $l_d = \left(\frac{\Gamma}{\chi_{st}}\right)^{1/2}$. De acordo com Liñán, 1974, a zona de reação tem espessura da ordem de $l_r \approx l_d (Da^*)^{-1/(a+1)}$, onde a é a ordem de uma reação global de um passo.

Em chamas não pré-misturadas turbulentas as zonas de reação desenvolvem dentro de uma região de mistura onde a espessura l_z é da ordem do comprimento turbulento l_t , Fig.2.14.

$$l_z \approx \left| \nabla \tilde{Z} \right|^{-1} \approx l_t \approx \left(\frac{k^{3/2}}{\varepsilon} \right) \quad (2.81)$$

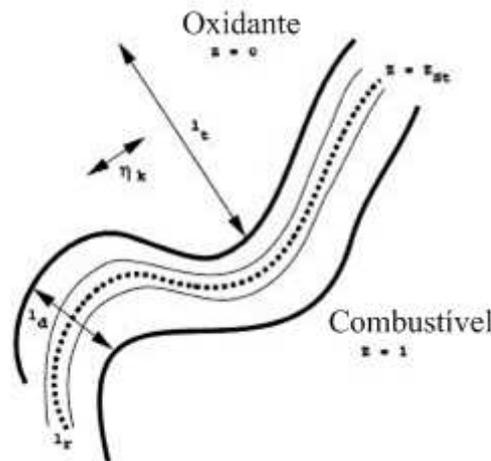


Figura 2.14 – Esquema de uma chama não pré-misturada, [Dennis, 2002].

A escala de mistura turbulenta depende principalmente tanto das flutuações de velocidade, transportando as superfícies com mesma fração de mistura (Z), e difusão entre estas superfícies que compõem a espessura da camada de mistura l_d , com

$$l_d \approx \left(\frac{D}{\tilde{\chi}_{st}} \right)^{1/2} \quad (2.82)$$

onde $\tilde{\chi}_{st}$ é o valor médio da dissipação escalar χ para $Z = Z_{st}$.

Quando o transporte de espécies e calor por flutuações de velocidade é maior que a transferência na chama difusiva, uma mudança para estruturas *flamelet* laminar é esperada. Também, quando a escala de Kolmogorov l_k é da ordem da espessura de chama a estrutura interna da zona de reação deve ser modificada pela turbulência. Como as escalas das chamas de difusão dependem fortemente dos movimentos dos escoamentos locais, pode-se escrever:

$$l_d \approx \alpha_1 l_k \text{ e } \tilde{\chi}_{st} \approx \frac{\alpha_2}{\tau_k} \quad (2.83)$$

onde $\alpha_1 \geq 1$ e $\alpha_2 \leq 1$ (a maior taxa de deformação corresponde a $l_d = l_k$).

Então usando $\tau_t/\tau_k = \sqrt{Re}$, o número de Damkohler comparando escala de chama turbulenta e escala de reação química de chama é reescrita como

$$Da = \frac{\tau_t}{\tau_c} = \frac{\tau_t}{\tau_k} \frac{\tau_k}{\tau_c} \approx \frac{\tau_t}{\tau_k} \frac{\alpha_2}{\tilde{\chi}_{st} \tau_c} \approx \alpha_2 \sqrt{Re} Da^* \quad (2.84)$$

Os números constantes de Damkohler, Da^* , correspondem às linhas de inclinação $1/2$ no diagrama log-log (Da , Re), Fig. 2.15. Quando a cinética química é suficientemente rápida (altos valores de Da), a chama é esperada que tenha uma estrutura laminar. Esta condição deve ser expressa como $Da^* \geq Da_{LFA}$, onde Da_{LFA} é o Damkohler que representa a transição de uma chama laminar para turbulenta. Por outro lado, para grandes tempos químicos (quando $Da^* \leq Da_{ext}$), onde Da_{ext} é o Damkohler que representa a extinção da chama, extinção ocorre. Chamas laminares são encontradas em baixos Reynolds ($Re < 1$). Resultados são mostrados na Fig. 2.15.

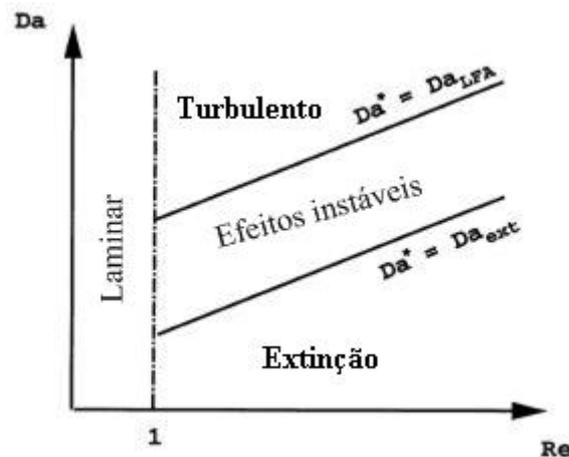


Figura 2.15 – Esquema de regimes de combustão não pré-misturada como função de Da e Re .

Em dispositivos práticos de combustão, α_1 e α_2 devem evoluir em espaço e tempo de acordo com as flutuações do escoamento, velocidade e espectro de energia. Em um dado queimador, é muito provável que se observe em diferentes posições comportamento do tipo *flamelet* e fortes instabilidades, ou até mesmo extinção.

Segundo Dennis, 2002, a maneira mais simples e direta para modelar combustão seria desenvolver a taxa de reação química em série de Taylor como uma função das frações mássicas das espécies químicas e da temperatura, conforme já visto em seções anteriores. Esta análise é limitada por sua baixa precisão e pela complexidade da química envolvida nas reações. Conclui-se então que o caráter não-linear do problema requer outras ferramentas. Estas novas ferramentas devem ser projetadas para descrever chamas turbulentas e têm de fornecer uma estimativa das taxas de produção ou consumo médio. Elas também precisam estar baseadas em quantidades conhecidas (características de escoamento médias, por exemplo) ou em quantidades que possam ser facilmente modeladas ou obtidas de equações de balanço fechadas.

Os ingredientes básicos para descrever chamas turbulentas permanecem sendo as quantidades observadas nas chamas laminares: a variável de progresso c para combustão pré-misturada ($c=0$ para gases ‘frescos’ e $c=1$ para gases queimados), e a fração de mistura Z para chamas não pré-misturadas (Z é um escalar passivo, com $Z=0$ existe somente oxidante e $Z=1$ somente combustível). A posição da chama deverá corresponder aos valores da variável de progresso $0 < c < 1$, ou para Z a partir dos valores na vizinhança de $Z = Z_{st}$.

Os três principais conceitos de aproximação podem ser resumidos, conforme Fig. 2.16:

Quando a taxa de queima deve ser quantificada em termos de mistura turbulenta. Quando o número de Damköhler é grande (uma hipótese muito comum em modelagem de combustão), a taxa de reação é limitada pela mistura turbulenta, descrita em termos de taxas de dissipação

escalar. A taxa de dissipação de pequena escala controla a mistura dos reagentes, por isso desenvolve um papel dominante na modelagem da combustão, até mesmo para taxa química finita (FRC, *Finite Rate Chemistry*).

Segundo Dennis, 2002, na análise geométrica a chama é descrita como uma superfície física. Esta aproximação é usualmente ligada à hipótese de *flamelet* (a chama é fina se comparada com todas as escalas do escoamento). Seguindo este tipo de análise, campos escalares são estudados em termos de propriedades dinâmicas e físicas de superfícies de mesmo valor de c ou Z , definidas como superfícies de chama (iso- c ou iso- Z). A chama é então vista como uma interface entre combustível e oxidante (não pré-misturada) ou entre gases frescos ou queimados (pré-misturada). Uma análise normal da chama é derivada ao focar a atenção na estrutura do escoamento reativo ao longo da normal da superfície da chama. Isto leva ao modelamento *flamelet* quando esta estrutura é comparada a chamas laminares unidimensionais. A densidade de superfícies por unidade de volume é também útil para estimar a taxa de queima.

As propriedades estatísticas de campos escalares devem ser coletadas e analisadas para qualquer posição no escoamento. Valores médios e correlações são então extraídos pelo conhecimento das funções de probabilidade *one-point*. A determinação destas funções densidade de probabilidade leva a modelagem chamada PDF. Uma análise estatística pontual restrita a um valor particular do campo escalar está relacionada ao estudo da estatística condicional. Estatística condicional que é ligada à análise geométrica e as superfícies de chama quando o valor condicionante é c^* ou Z_{st} , [Dennis, 2002].

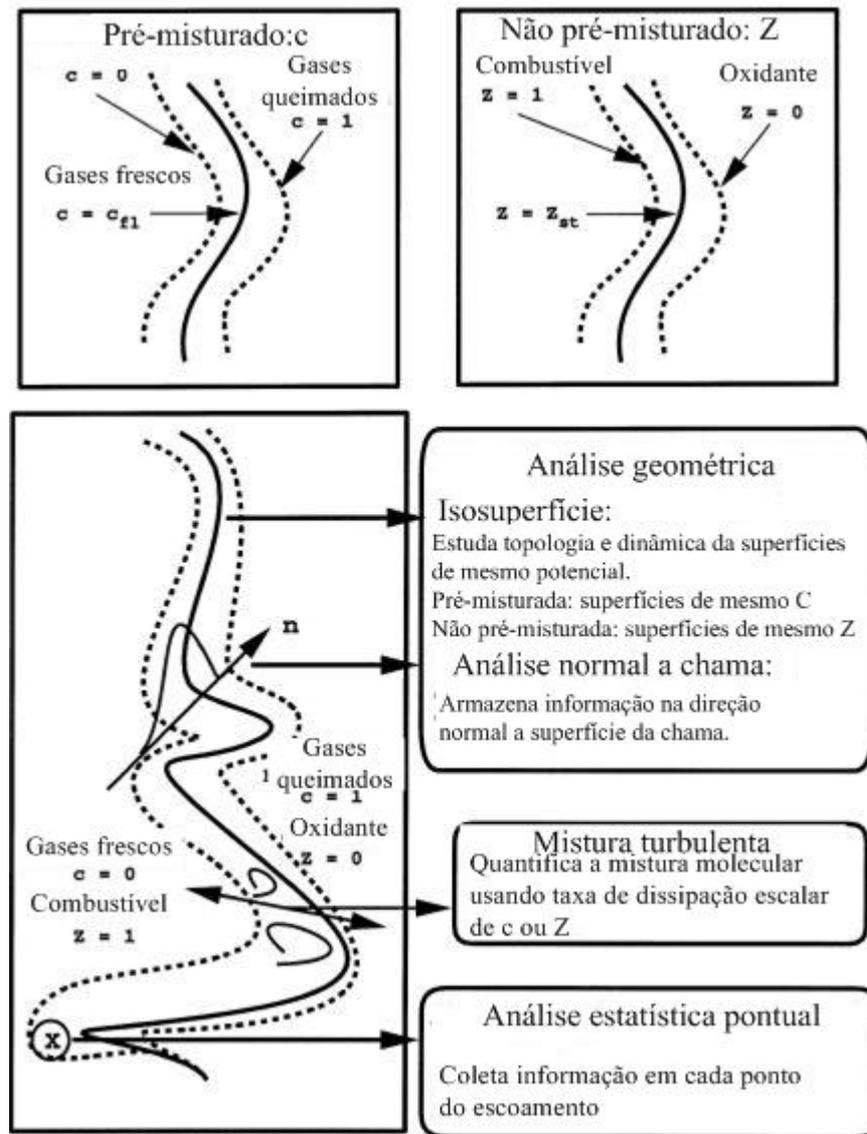


Figura 2.16 – Representação gráfica dos pontos de vista da análise de chama, [Dennis, 2002].

Conforme as abordagens comentadas nesta seção comentam-se alguns dos modelos de taxa de reação utilizados na simulação computacional da combustão.

2.6.1. MODELO DE REAÇÕES QUÍMICAS SIMPLIFICADAS

Silva, 2005, apresenta detalhadamente em seu trabalho um resumo do modelo chamado SCRS apresentado por Spalding, 1979. Trata-se de uma simplificação do fenômeno químico num conceito que supõe que a reação química é instantânea e que o tempo característico da reação é governado pelo tempo característico do escoamento. Neste modelo considera-se na reação apenas dois componentes, o combustível e o oxidante, Fig. 2.17.

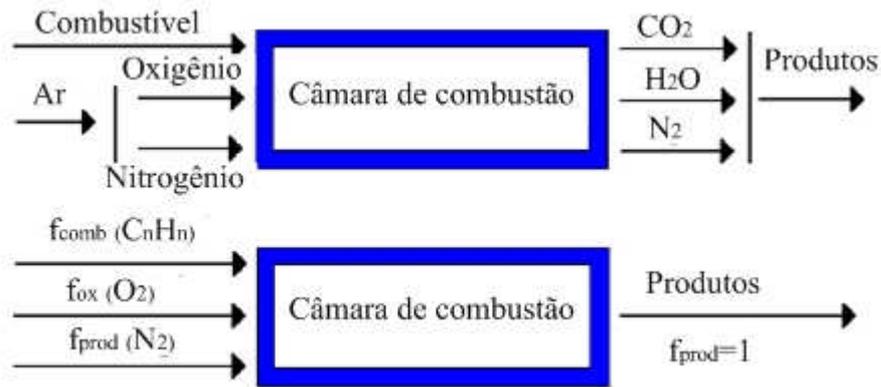


Figura 2.17 – Representação do modelo SCRS, [Silva, C.V, 2005].

Conforme o resultado da equação de transporte das frações mássicas dos reagentes e, se houver uma condição de extinção, gera-se o campo de produtos que conforme sua criação adiciona ao termo fonte da energia a energia de formação.

Silva, 2005, relata e apresenta que os resultados obtidos com o uso do SCRS são estimados acima do real no caso de Garreton e Simonin, 1995. Este modelo a princípio poderia ser sugerido para casos de reação extremamente turbulentos em condições de temperaturas acima do normal, onde já se espera reação e pode-se economizar esforço computacional no cálculo da mesma.

2.6.2. MODELO DE TAXA DE REAÇÃO POR QUEBRA DE VÓRTICES

Apresentado por Spalding, 1971, este modelo é baseado numa análise fenomenológica da combustão turbulenta assumindo altos números de Reynolds ($Re \gg 100$) e de Damkohler ($Da \gg 1$). A zona de reação é vista como uma coleção de bolsões de gases frescos e queimados. Seguindo a cascata de Kolmogorov, a turbulência leva à quebra das estruturas dos gases frescos. Desta forma a taxa de reação média é principalmente controlada pelo tempo de mistura turbulento τ_t . Quando o oxidante está em excesso, a taxa de reação média é expressa como

$$\overline{RR} = -C_{EBU} \overline{\rho} \sqrt{\tilde{Y}_F''^2} \quad (2.85)$$

onde Y_F'' representa as flutuações de fração mássica do combustível e C_{EBU} é uma constante do modelo de ordem 1. O tempo de mistura turbulento, τ_t , é estimado da energia cinética turbulenta k e da sua dissipação ε conforme

$$\tau_t = \frac{k}{\varepsilon} \quad (2.86)$$

Como uma aproximação do tempo característico das escalas de comprimento integral do escoamento turbulento.

a taxa de reação pode ser reescrita em termo da variável de progresso, c , como:

$$\overline{RR} = -C_{EBU} \overline{\rho} \frac{\sqrt{\tilde{c}''^2}}{\tau_t} \quad (2.87)$$

Flutuações de fração mássica \tilde{Y}_F'' (ou da variável de progresso \tilde{c}''^2) devem ser modeladas e estimadas a partir de uma equação de balanço. A evolução destas equações leva a inconsistências, segundo Dennis, 2002, e por isso foi desenvolvida uma versão corrigida do modelo EDU, sem a raiz quadrada (fonte das inconsistências), que é usada para simulações práticas:

$$\overline{RR} = C_{EBU} \overline{\rho} \frac{\varepsilon}{k} \tilde{c}(1 - \tilde{c}) \quad (2.88)$$

ou em termos de fração mássica de combustível

$$\overline{RR} = C_{EBU} \overline{\rho} \frac{\varepsilon}{k} \frac{\tilde{Y}_F}{Y_F^0} \left(1 - \frac{\tilde{Y}_F}{Y_F^0}\right) \quad (2.89)$$

onde Y_F^0 é a fração mássica de combustível inicial no escoamento reativo, assumindo excesso de oxidante.

O modelo EBU é muito atrativo graças a sua taxa de reação que é simplesmente escrita como uma função de quantidades conhecidas sem nenhuma equação de transporte adicional e está disponível em quase todos os códigos de mecânica dos fluidos computacional comerciais. A taxa de reação modelada não depende das características químicas e assume turbulência homogênea e isotrópica. Alguns ajustes da constante C_{EBU} do modelo já foram propostos para pequenos acertos químicos nas reações. A modelagem EBU tende a uma estimativa acima do real da taxa de reação, especialmente em regiões de alto cisalhamento, onde a relação ε/k é grande (corpos rombudos, paredes, jatos, etc.). Este modelo também pode ser acoplado ao modelo de Arrhenius para formação de um modelo misto, em que as taxas são avaliadas ao serem calculadas por cada modelo e implementadas segundo alguma regra do algoritmo.

2.6.3. MODELOS DE FUNÇÃO DENSIDADE DE PROBABILIDADE

São modelos mais detalhados, para a reação química especificamente, que adotam curvas características de fração de mistura e um segundo parâmetro que leve em conta a química não em equilíbrio da reação. A estatística da fração de mistura é normalmente aproximada ao calcular a fração de mistura média e a sua variância pelas equações de transporte modeladas. Então a função densidade de probabilidade é construída assumindo uma forma pré-definida, por exemplo, uma função de Gauss ou uma função β dependendo da média e da variância das variáveis de espaços como parâmetros.

Este tipo de modelo permite que seja conhecido o estado termoquímico pontual, dada sua situação de fração de mistura e temperatura, por exemplo, ao contrário do conceito genérico de cálculo de reação baseado no cálculo médio das reações. O problema deste tipo de modelo é a definição das funções de forma da densidade de probabilidade, que pode ser um fator que possibilita ou não a solução de um problema. Alguns pacotes comerciais fornecem programas que calculam estas variáveis em paralelo, a programas de mecânica dos fluidos computacional.

2.7. A IMPORTÂNCIA DA VALIDAÇÃO DA MODELAGEM

Enquanto que a tecnologia de combustão oferece enorme potencial, um desafio maior no uso de tal tecnologia é obter confiança que uma aproximação de modelagem caracterize adequadamente, tanto qualitativamente como quantitativamente, o processo de combustão de interesse. Isto é normalmente alcançado ao fazer comparações de resultados de códigos numéricos com dados experimentais de chamas em reatores que possibilitem o controle dos parâmetros dos aspectos pertinentes da combustão do combustível de interesse. Conseqüentemente dados de diferentes instalações com diferentes tamanhos são necessários para validar a adequação das simulações numéricas e estabelecer o grau de precisão que um código numérico pode fornecer ao simular o comportamento de fornalhas industriais. Dados mais detalhados fornecem novos conhecimentos nos processos e estratégias de combustão. Dados de sistemas de grande e pequena escala são necessários porque as medidas detalhadas possíveis no laboratório, normalmente complementam medidas mais grosseiras e esparsas de padrões de escoamento tridimensional e características de chama, obtidos em fornalhas de escala industrial.

3. MODELAGEM MATEMÁTICA DOS PROCESSOS DE COMBUSTÃO

O estudo do escoamento turbulento de gases tem como hipótese básica a consideração do gás como meio contínuo, tanto que a distância entre as moléculas do gás e também o seu caminho livre médio são muito pequenas se comparadas com a escala geométrica do problema de interesse. Dada esta hipótese, para escoamentos não reativos incompressíveis e com transferência de calor, existem cinco variáveis básicas que devem ser consideradas no movimento fluido: três componentes de velocidade e duas propriedades termodinâmicas. Determinar os valores destas cinco variáveis como uma função do espaço e tempo, que é a solução para o campo do escoamento, é a função dos modelos matemáticos. Dado que cinco variáveis são de interesse, o modelo matemático deve conseguir resolver pelo menos cinco equações com seus acoplamentos. Equações constitutivas adicionais são inseridas se variáveis adicionais são introduzidas. Como um exemplo, se uma terceira propriedade termodinâmica deve ser considerada, uma equação adicional pode ser adicionada na forma de equação de estado.

As deduções destas cinco equações, que constituem um modelo matemático do escoamento com transferência de calor, são encontradas nas referências. Três leis fundamentais devem ser empregadas: (1) conservação de massa; (2) conservação da quantidade de movimento; e (3) conservação de energia (primeira lei da termodinâmica).

Estas leis podem ser usadas para deduzir relações integrais para volumes de controle, ou equações diferenciais para pontos locais no espaço. Equações diferenciais parciais constituem a forma mais utilizada ao desenvolver a mecânica dos fluidos computacional.

3.1 EQUAÇÃO DE CONSERVAÇÃO DE MASSA

A primeira lei fundamental a ser apresentada é a mais antiga e conhecida, [Bejan, 2004]. A conservação de massa em um sistema fechado ou a conservação da massa ao longo de um escoamento (sistema aberto), aplicada a um volume de controle, assume a seguinte forma

$$\frac{\partial M_{vc}}{\partial t} = \sum_{entrada} \dot{m} - \sum_{saída} \dot{m} \quad (3.1)$$

onde M_{vc} é a massa contida no volume de controle e \dot{m} são as vazões mássicas associadas ao escoamento entrando e saindo dele. Considerando-se um volume de dimensões Δx , Δy e Δz em torno de uma posição (x, y, z) em um campo de escoamento, conforme a Fig. 3.1, que apresenta-se uma projeção deste volume num plano xy , tem-se que

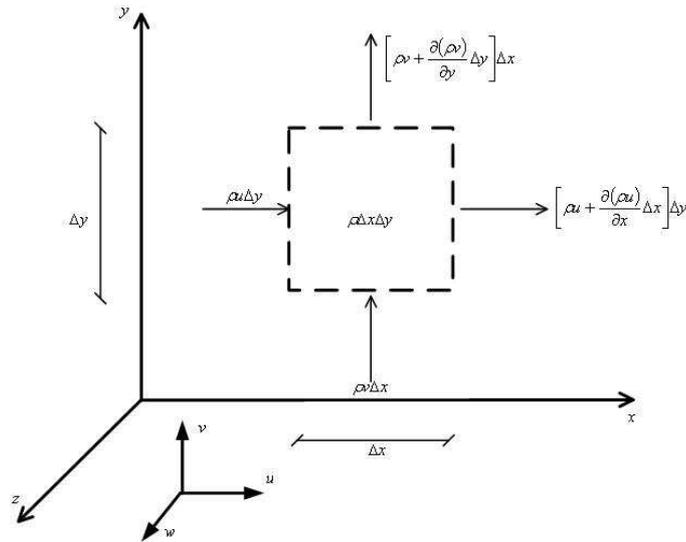


Figura 3.1 – Conservação de massa num volume de controle.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\Delta x\Delta y) = \rho u\Delta y + \rho v\Delta x - \left[\rho u + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x}\Delta x\right]\Delta y - \left[\rho v + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y}\Delta y\right]\Delta x \quad (3.2)$$

Dividindo a equação pelo volume do volume de controle ($\Delta x\Delta y$),

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} = 0 \quad (3.3)$$

Para o caso tridimensional analogamente chega-se a

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho w)}{\partial z} = 0 \quad (3.4)$$

Havendo uma fonte ou sumidouro de massa dentro do contorno do volume, há a necessidade de inserir-se um termo fonte na equação.

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho w)}{\partial z} = S^m \quad (3.5)$$

3.2 CONSERVAÇÃO DA QUANTIDADE DE MOVIMENTO

Pela segunda lei de Newton, a força resultante em uma partícula é igual à massa da partícula vezes sua aceleração.

$$F = ma \quad (3.6)$$

Não existindo objetos de tamanho nulo ou massa nula, o movimento de objetos de massa e tamanho finitos é tratado como o de partículas. Por exemplo, uma bola de golfe picando contra o solo pode ser tratada como partícula, e várias bolas de golfe picando contra o solo podem ser tratadas como partículas.

Pode-se imaginar tratar o movimento de sólidos ou fluidos conforme o comportamento das inúmeras partículas que formam estes objetos finitos, no entanto o simples ato de contabilizar a quantidade de moléculas constituintes destes objetos exigiria computadores gigantescos para um cálculo de translação.

É possível tratar o problema como um meio contínuo, onde grandezas físicas estão distribuídas de forma uniforme ao longo do domínio de estudo. Considerando a matéria como vários pacotes muito próximos uns dos outros, qualquer movimento de um destes interfere nos seus vizinhos.

A segunda lei de Newton para o movimento de uma partícula pode ser aplicada, numa forma mais complexa para a matéria dita contínua. A equação resultante com a forma diferencial descrevendo o movimento do contínuo em termos do campo de velocidade pode ser apresentada como a lei do movimento de Cauchy

$$\rho \left[\frac{\partial \vec{V}}{\partial t} + \vec{V} \cdot \nabla \vec{V} \right] = \nabla \cdot \sigma + F \quad (3.7)$$

onde a massa é representada pela densidade ρ , a aceleração pelo termo contendo o campo de velocidades \vec{V} , as forças superficiais pelo tensor de tensões $\nabla \cdot \sigma$ e as forças de corpo F , de origem do empuxo, magnética, gravidade, etc.

A forma mais conhecida e estudada das equações que descrevem o transporte de momento pelo fluido são as equações de Navier-Stokes, que podem ser também deduzidas ao mostrar-se o equilíbrio entre tensões e as deformações de um fluido similar ao balanço de forças da segunda lei de Newton, [Schlichting, 1979]

$$\rho \left(\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} + w \frac{\partial u}{\partial z} \right) = F_x - \frac{\partial P}{\partial x} + \mu \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right) \quad (3.8)$$

$$\rho \left(\frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} + w \frac{\partial v}{\partial z} \right) = F_y - \frac{\partial P}{\partial y} + \mu \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial z^2} \right) \quad (3.9)$$

$$\rho \left(\frac{\partial w}{\partial t} + u \frac{\partial w}{\partial x} + v \frac{\partial w}{\partial y} + w \frac{\partial w}{\partial z} \right) = F_z - \frac{\partial P}{\partial z} + \mu \left(\frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial z^2} \right) \quad (3.10)$$

Para o regime laminar as soluções destas equações, dadas as condições de contorno, determinam o movimento do fluido no domínio determinado com uma metodologia auxiliar para a determinação da pressão e da densidade, se esta variar.

3.3 TURBULÊNCIA

Escoamentos turbulentos são dominantes em atividades de Engenharia que envolvam dinâmica dos fluidos, incluindo a maioria dos regimes de escoamento em queimadores e câmaras de combustão. A emissão de vórtices em esteiras turbilhonares, os descolamentos e recolamentos são influenciados pelas características turbulentas dos escoamentos. A forte advecção presente em escoamentos turbulentos acelera de forma drástica a difusão de calor e massa, fazendo com que processos naturais ou industriais possam ser acelerados.

Em 1887, Boussinesq propôs o conceito de viscosidade turbulenta, através do qual o tensor de Reynolds oriundo da decomposição das equações de Navier-Stokes seria modelado de forma análoga ao modelo de Stokes para as tensões viscosas moleculares.

Prandtl, 1925, propôs o modelo de comprimento de mistura que calcula a viscosidade turbulenta variável no espaço e no tempo.

Brown e Roshko, 1974, realizaram o experimento com uma camada de mistura evidenciando a existência das instabilidades de Kelvin-Helmholtz, denominadas por eles de estruturas coerentes.

Duas correntes distintas surgiram, uma baseada nas equações médias de Reynolds (RANS – *Reynolds Average Navier-Stokes*) e outra no conceito de Grandes Escalas (LES – *Large Eddy Simulation*) iniciada com o trabalho de Smagorinsky, 1963.

Técnicas experimentais também têm sido desenvolvidas com o intuito de caracterizar e quantificar escoamentos turbulentos, tais como Laser-Doppler e PIV (*Particle Image Velocimetry*), permitindo visualizar estruturas turbilhonares em escoamentos complexos e obter dados estatísticos de velocidades médias e flutuações. Técnicas mais tradicionais, como anemometria de fio quente e a utilização de traçadores também tiveram evoluções permanecendo como importantes métodos experimentais na mecânica dos fluidos, com fins práticos e didáticos, [Spode, 2006].

A simulação numérica de escoamentos já atingiu um nível elevado, podendo ser chamada de experimentação numérica, numa analogia à experimentação física.

A turbulência nos fluidos apresenta certas características que lhe conferem um comportamento não linear, observando-se que a turbulência é uma característica do escoamento e não do fluido. Pode-se caracterizar a turbulência como um fenômeno:

- Tridimensional e rotacional: a turbulência só ocorre em escoamentos rotacionais, onde se pode identificar algum processo de geração de vorticidade. Aplicando o operador rotacional às equações de Navier-Stokes se obtém uma equação de

transporte para a vorticidade, a chamada Equação de Helmholtz. Para um escoamento bidimensional o termo de geração de vorticidade é nulo, o que implica que a turbulência deve ser encarada de forma tridimensional;

- Altamente difusivo: por apresentar flutuações de velocidade nas três dimensões, a turbulência é um potente acelerador da difusão de calor, massa e quantidade de movimento;
- Altamente dissipativo: os altos cisalhamentos provocados pelos fortes gradientes de velocidade acentuam o processo de transformação de energia cinética em dissipação viscosa, sendo necessário o fornecimento contínuo de energia para que o escoamento permaneça turbulento. Caso contrário as flutuações serão atenuadas até ser atingido o estado estacionário;
- Contínuo: apesar das menores estruturas turbilhonares serem de dimensões bastante reduzidas, elas superam ainda em mais de uma ordem de grandeza o livre caminho médio das partículas. Portanto a turbulência pode ser modelada sob a hipótese do contínuo;
- Impredicível: devido à alta não linearidade dos escoamentos turbulentos, é impossível reproduzir, em fase, duas ou mais realizações de um mesmo fenômeno físico, ou pelo menos, não existem ainda instrumentos e técnicas capazes. As condições iniciais impostas nunca serão perfeitamente idênticas, fornecendo diferentes caminhos para que as instabilidades se gerem e se propaguem ao longo do tempo. No entanto, é possível prever a formação de estruturas turbilhonares e suas iterações, retirando valiosas informações.

Além dos adjetivos acima mencionados, escoamentos turbulentos apresentam um amplo espectro de energia, possuindo uma larga banda de frequências, ou seja, apresentam estruturas com baixas (grandes comprimento de onda) e altas frequências (pequenos comprimentos de onda). As interações entre estruturas de tamanhos e frequências variadas constituem um complexo processo de troca de energia, que influencia fortemente a mistura dos reagentes no processo de combustão.

Apesar de a turbulência ser classificada como impredicível, é possível, através de processos estatísticos, determinar médias e flutuações a fim de caracterizar o fenômeno. Segundo Ferziger, 2001, para escoamentos turbulentos identifica-se uma parte determinística constituindo cerca de apenas 10% do escoamento na forma de estruturas coerentes. Estas são responsáveis por aproximadamente 90% do transporte de energia. A outra parte é randômica (aproximadamente

90%) e aparece na forma de ruído isolado, ou mesmo como pequenas oscilações sobre as estruturas coerentes.

Assume-se que a média temporal da velocidade seja

$$\bar{U} = \frac{1}{t} \int_{t_0-t/2}^{t_0+t/2} U dt \quad (3.11)$$

Este valor médio pode ser estabelecido num intervalo de tempo pequeno que, dependendo do escoamento, pode representar uns segundos ou mesmo alguns milésimos de segundo. Em regiões do escoamento totalmente turbulento a velocidade média pode ser avaliada de forma razoável num intervalo de tempo da ordem de $10^2 l'/u$, onde u e l' são as magnitudes das escalas de velocidade e comprimento, respectivamente, dos maiores vórtices. Desta forma, \bar{U} , pode, em princípio, ser usada para a definição de valores médios, mesmo em escoamentos não estacionários, desde que ao longo do tempo mínimo t , necessário para a média.

A diferença entre as velocidades instantânea e seu valor médio é definida como

$$U' = U - \bar{U} \quad (3.12)$$

onde, U' é a flutuação da velocidade. Igualmente é possível realizar esta analogia com uma variável qualquer, por exemplo, Φ

$$\Phi = \bar{\Phi} + \Phi' \quad (3.13)$$

Por tratar-se de uma flutuação em torno da média, com valores positivos e negativos, a média temporal será nula ($\overline{\Phi'} = 0$). Esta variável pode ser utilizada para inserir nas equações básicas de transporte antes apresentadas. Para isto é necessário ter em mãos relações para inserir nas equações

$$\overline{\frac{\partial \Phi}{\partial \zeta}} = \frac{\partial \bar{\Phi}}{\partial \zeta} \quad \therefore \quad \overline{\frac{\partial \Phi'}{\partial \zeta}} = \frac{\partial \bar{\Phi}'}{\partial \zeta} = 0 \quad (3.14)$$

Aplicando estas novas equações nas equações de conservação, pode-se chegar a novas equações de conservação levando em conta as flutuações de velocidade.

Para conservação de massa chega-se em

$$\frac{\partial}{\partial x} (\rho \bar{u}) = 0 \quad (3.15)$$

A equação de conservação da quantidade de movimento em regime permanente resulta em

$$\frac{\partial (\rho \overline{u_i u_j})}{\partial x_j} = -\frac{\partial \bar{P}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\mu \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) \right) + F_i \quad (3.16)$$

Considera-se aqui que as flutuações de massa específica e da viscosidade são desprezíveis ao causar efeitos sobre a turbulência.

Realizando a média da equação anterior

$$\overline{u_j} \frac{\partial(\overline{\rho u_i})}{\partial x} = \frac{\partial \overline{P}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mu \left(\frac{\partial \overline{u_i}}{\partial x_j} \right) - \overline{\rho u_i' u_j'} \right) + F_i \quad (3.17)$$

Estas são ditas equações de Reynolds, e o termo $\overline{\rho u_i' u_j'}$ denominado tensor de Reynolds, o qual representa a transferência de quantidade de movimento adicional causada pela turbulência.

Metodologias como a Simulação Numérica Direta (DNS – *Direct Numerical Simulation*), que consiste em resolver as equações de Navier-Stokes diretamente, implica na utilização de uma malha capaz de descrever todo o espectro de frequências, desde as maiores (grandes estruturas) até a as menores (Escala de Kolmogorov – pequenas estruturas de alta frequência). Além do refino de malha, são exigidos esquemas de discretização espacial e temporal de alta ordem, que imponham pouca difusão numérica ao cálculo. Soma-se a isso o cuidadoso uso de condições de contorno adequadas, com níveis de perturbação específicos para cada caso [Spode, 2006]. Não podendo resolver todas as escalas da turbulência, surge o conceito de decomposição das escalas da turbulência, podendo ser realizada via média temporal ou filtragem espacial. Quando se aplica o conceito de média temporal, decompondo a velocidade em uma parte média e outra flutuante, obtêm-se as Equações Médias de Reynolds. Para os casos onde é aplicada a filtragem espacial das equações de Navier-Stokes surgem as equações filtradas, utilizadas na metodologia de LES. Diferente dos métodos RANS, onde todo o espectro de energia é modelado, na metodologia LES as grandes escalas são resolvidas e apenas as menores escalas são modeladas, dependendo obviamente da discretização espacial e temporal empregadas.

Independente da metodologia o problema em fazer uma filtragem temporal ou espacial é o surgimento de novos termos nas equações de Navier-Stokes, ficando assim com um sistema que possui mais incógnitas do que equações: é o chamado problema de fechamento da turbulência. Modelos são desenvolvidos para suprir essa necessidade, os chamados modelos de turbulência, que tem por objetivo modelar o tensor de Reynolds, o termo mais importante derivado da filtragem aplicada.

Boussinesq, através do conceito de viscosidade turbulenta, introduz o fechamento das equações de Navier-Stokes modelando as tensões de Reynolds, $\overline{\rho u' v'}$, em uma analogia ao modelo de viscosidade molecular adotado por Stokes.

Considerando um escoamento unidirecional ao longo de uma placa plana infinita, Boussinesq propôs que, assim como no caso de tensão viscosa, a contribuição da turbulência na transferência de quantidade de movimento poderia ser modelada por

$$-\overline{\rho u'v'} = \mu_t \frac{\partial U}{\partial y} \quad (3.18)$$

onde u' e v' são as flutuações de velocidade associadas às componentes de velocidades instantâneas u e v , paralelas e normais à superfície, respectivamente, e y é a direção normal a esta superfície. Em contraste à viscosidade molecular, μ_t não é uma propriedade física do fluido, mas sim uma medida local do nível de turbulência, variando de ponto a ponto e de escoamento para escoamento.

Ao longo dos últimos anos, a hipótese de Boussinesq, numa forma generalizada proposta por Kolmogorov, 1942, tem sido um dos métodos mais empregados para a previsão de escoamentos turbulentos. Segundo Kolmogorov, o tensor de Reynolds pode ser avaliado através da seguinte relação,

$$-\overline{\rho u'v'} = \mu_t \left(\frac{\partial \bar{u}}{\partial y} + \frac{\partial \bar{v}}{\partial x} \right) - \frac{2}{3} k \quad (3.19)$$

onde, k é a energia cinética das flutuações de velocidade. Modelos utilizando esta hipótese avaliam μ_t utilizando desde simples relações algébricas até mesmo equações diferenciais, tal como o modelo $k - \varepsilon$. A energia cinética k não precisa ser obtida obrigatoriamente do modelo, já que ela pode ser eliminada pela definição de uma nova pressão

$$P^* = \bar{P} + \frac{2}{3} k \quad (3.20)$$

onde a energia cinética turbulenta das flutuações de velocidade é definida como

$$k = \frac{(\bar{u}^2 + \bar{v}^2)}{2} \quad (3.21)$$

Modelos de turbulência de duas equações são amplamente utilizados, pois oferecem um compromisso de esforço numérico com boa acuracidade, [CFX, 2005]. Os modelos de duas equações $k - \varepsilon$ e $k - \omega$, por exemplo, usam a hipótese do gradiente de difusão para relacionar as tensões de Reynolds aos gradientes médios de velocidade e a viscosidade turbulenta. Em modelos de duas equações a escala da velocidade turbulenta é calculada a partir da energia cinética turbulenta, que é fornecida da solução da sua equação de transporte. A escala de comprimento turbulenta é estimada de duas propriedades do campo turbulento, normalmente a energia cinética turbulenta e sua taxa de dissipação. A taxa de dissipação cinética turbulenta é fornecida pela solução da equação de transporte.

3.3.1 MODELO $k - \varepsilon$

O modelo $k - \varepsilon$ utiliza uma equação de conservação para energia cinética turbulenta, k , e outra para a sua dissipação ε [Lauder e Spalding, 1974; ANSYS-CFX, 2006]. Relacionando a viscosidade turbulenta com a energia cinética e sua dissipação.

$$\mu_t = C_\mu \rho \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (3.22)$$

Resolvem-se equações de transporte para as novas variáveis de acordo com a forma da equação de transporte genérica (considerando as perturbações turbulentas)

$$\nabla \cdot (\rho \vec{V} k) = \nabla \cdot \left(\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \nabla k \right) + P_k - \rho \varepsilon \quad (3.23)$$

e

$$\nabla \cdot (\rho \vec{V} \varepsilon) = \nabla \cdot \left(\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \nabla \varepsilon \right) + C_{\varepsilon,1} \frac{\varepsilon}{k} P_k - C_{\varepsilon,2} \frac{\varepsilon^2}{k} \quad (3.24)$$

onde P_k é o termo de produção ou dissipação de energia cinética turbulenta

$$P_k = \mu_t \nabla \vec{V} \cdot (\nabla \vec{V} + \nabla \vec{V}^T) - \frac{2}{3} \nabla \cdot \vec{V} (3\mu_t \nabla \cdot \vec{V} + \rho k) \quad (3.25)$$

As constantes $C_{\varepsilon,1}$, $C_{\varepsilon,2}$, C_μ , σ_k e σ_ε têm seus respectivos valores, conforme Tab. 3.1.

Tabela 3.1 – Constantes para o modelo $k - \varepsilon$.

$C_{\varepsilon,1}$	$C_{\varepsilon,2}$	C_μ	σ_k	σ_ε
1.44	1.92	0.09	1.0	1.3

Neste modelo são usadas funções de parede para relacionar o contorno do domínio computacional com o limite da subcamada viscosa.

3.3.2 MODELO $k - \omega$

Uma das vantagens da formulação é o tratamento próximo à parede para Re baixos. O modelo não envolve funções complexas de amortecimento necessárias no modelo $k - \varepsilon$. Os modelos $k - \omega$ assumem que a viscosidade turbulenta está ligada à energia cinética turbulenta pela relação

$$\mu_t = \rho \frac{k}{\omega} \quad (3.26)$$

Segundo Wilcox , 1998, o modelo resolve duas equações de transporte, uma para a energia cinética turbulenta, k , e uma para a frequência turbulenta, ω . O tensor de tensões é calculado pelo conceito de viscosidade turbulenta.

As equação para de k e ω são

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{V} k) = \nabla \cdot \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \nabla k \right] + P_k - \beta' \rho k \omega \quad (3.27)$$

$$\frac{\partial(\rho \omega)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{V} \omega) = \nabla \cdot \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\omega} \right) \nabla \omega \right] + \alpha \frac{\omega}{k} P_k - \beta \rho \omega^2 \quad (3.28)$$

Em adição às variáveis independentes, densidade e vetor velocidade, são também inseridas as quantidades advindas do cálculo das equações de Navier-Stokes. P_k é a taxa de produção turbulenta, que é calculada conforme modelo $k - \varepsilon$. As constantes do modelo são dadas na Tab. 3.2.

Tabela 3.2 – Constantes para o modelo $k - \omega$.

β'	α	β	σ_k	σ_ω
0.09	5/9	0.075	2	2

Para evitar o aumento da energia cinética turbulenta em regiões de estagnação, um limitante ao termo de produção é introduzido nas equações,

$$\tilde{P}_k = \min(P_k, c_{\text{lim}} \varepsilon) \quad (3.29)$$

com $c_{\text{lim}} \varepsilon = 10$ para modelos ω .

3.3.3. MODELO BSL

Uma das desvantagens da formulação $k - \omega$ é a alta sensibilidade do modelo aos efeitos de jatos cisalhantes e escoamento livre. Existe uma forte dependência das condições iniciais, especialmente quando especificado um valor para ω . Resultados inconsistentes podem surgir, então é feita uma combinação entre os modelos $k - \omega$, na região próxima à parede, e $k - \varepsilon$ na região externa. Esta combinação é feita na transformação do modelo $k - \varepsilon$ numa formulação $k - \omega$ e uma posterior adição das equações correspondentes. O modelo clássico $k - \omega$ de Wilcox é multiplicado por uma função de combinação F_1 e o modelo $k - \varepsilon$ transformado por

$(1 - F_1)$. F_1 é igual a 1 próximo a parede e torna-se nulo quando dentro da camada limite. No limite e exterior da camada limite o modelo $k - \varepsilon$ tradicional volta a ser calculado. Conforme o modelo de Wilcox, Eq. (3.30) e (3.31), transforma-se o modelo $k - \varepsilon$

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{V} k) = \nabla \cdot \left(\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_{k2}} \right) \nabla k \right) + P_k - \beta' \rho k \omega \quad (3.30)$$

$$\frac{\partial(\rho \omega)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{V} \omega) = \nabla \cdot \left(\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_{\omega 2}} \right) \nabla \omega \right) + 2\rho \frac{1}{\sigma_{\omega 2} \omega} \nabla k \nabla \omega + \alpha_2 \frac{\omega}{k} P_k - \beta_2 \rho \omega^2 \quad (3.31)$$

As equações do modelo $k - \omega$ são multiplicadas pela função F_1 e o modelo transformado $k - \varepsilon$ por $(1 - F_1)$. As equações modificadas são adicionadas para resultar no modelo BSL

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{V} k) = \nabla \cdot \left(\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_{k3}} \right) \nabla k \right) + P_k - \beta' \rho k \omega \quad (3.32)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho \omega)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{V} \omega) = \nabla \cdot \left(\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_{\omega 3}} \right) \nabla \omega \right) + \dots \\ \dots + (1 - F_1) 2\rho \frac{1}{\sigma_{\omega 2} \omega} \nabla k \nabla \omega + \alpha_3 \frac{\omega}{k} P_k - \beta_3 \rho \omega^2 \end{aligned} \quad (3.33)$$

As constantes do modelo BSL são apresentadas na Tab. 2.3.

Tabela 3.3 – Constantes utilizadas na solução do modelo BSL.

β'	α_1	β_1	σ_{k1}	$\sigma_{\omega 1}$	α_2	β_2	σ_{k2}	$\sigma_{\omega 2}$
0.09	5/9	0.075	2	2	0.44	0.0828	1	1/0.856

3.3.4. MODELO SST

O modelo SST (Shear Stress Transport) baseado no modelo $k - \omega$ traz boa aproximação para casos de descolamento de camada limite e alguns casos de camada cisalhante livre, pois leva em conta o efeito do transporte da tensão cisalhante. Nos modelos anteriormente citados pode-se superestimar a viscosidade turbulenta por não considerar estes efeitos (transporte de tensões de Reynolds). Uma maneira de evitar esta estimativa superior ao real é impor um limitante a viscosidade turbulenta

$$\mu_t = \rho \frac{a_1 k}{\max(a_1 \omega, SF_2)} \quad (3.34)$$

onde a_1 é uma constante e F_2 é uma função de combinação, semelhante a do modelo BSL. As funções de combinação são fundamentais neste modelo, sendo baseadas na distância da superfície mais próxima e nas variáveis do escoamento

$$F_1 = \tanh(\arg_1^4) \quad (3.35)$$

$$\arg_1 = \min\left(\max\left(\frac{\sqrt{k}}{\beta' \omega y}, \frac{500\nu}{y^2 \omega}\right), \frac{4\rho k}{CD_{k\omega} \sigma_{\omega 2} y^2}\right) \quad (3.36)$$

$$CD_{k\omega} = \max\left(2\rho \frac{1}{\sigma_{\omega 2} \omega} \nabla k \nabla \omega, 1 \times 10^{-10}\right) \quad (3.37)$$

onde y é a distância da superfície mais próxima

$$F_2 = \tanh(\arg_2^4) \quad (3.38)$$

$$\arg_2 = \max\left(\frac{\sqrt{k}}{\beta' \omega y}, \frac{500\nu}{y^2 \omega}\right) \quad (3.39)$$

Tanto na solução do modelo SST quanto na solução do modelo BSL é necessário saber a distância de um nó à parede, uma escala de comprimento para determinar em que local do domínio deve-se utilizar o modelo misto entre o $k-\varepsilon$ e o $k-\omega$. A distância em relação à parede é calculada a partir da escala de comprimento da parede, l_w , onde $\nabla^2 l_w = 1$, e a distância da parede é dada por

$$\text{Distância da parede} = \sqrt{(|l_w|^2 + 2l_w) - |\nabla l_w|} \quad (3.40)$$

3.3.5. MODELOS DE TRANSPORTE DAS TENSÕES DE REYNOLDS

Estes modelos são baseados nas equações de transporte de todos componentes do tensor de tensões de Reynolds e da taxa de dissipação. Estes modelos não usam a hipótese de viscosidade turbulenta, mas resolvem uma equação adicional para o transporte das tensões de Reynolds no escoamento. As equações de transporte de tensões de Reynolds são resolvidas para as tensões componentes do tensor individualmente. O termo de produção exato e a modelagem das anisotropias nas tensões fazem dos modelos de transporte de tensões de Reynolds mais aconselhados para escoamentos complexos. No entanto por vezes eles não superam os modelos de duas equações, se forem levados em conta os respectivos tempos de processamento.

O fluxo de momento devido às flutuações é conhecido como o tensor de Reynolds. Ele é também reconhecido como a tensão exercida no fluido pelas flutuações turbulentas. Ele é simétrico e possui seis componentes independentes entre si

$$\tau_{i,j}^T = -\overline{\rho u_i' u_j'} = - \begin{bmatrix} \overline{\rho u' u'} & \overline{\rho v' u'} & \overline{\rho w' u'} \\ \overline{\rho u' v'} & \overline{\rho v' v'} & \overline{\rho w' v'} \\ \overline{\rho u' w'} & \overline{\rho v' w'} & \overline{\rho w' w'} \end{bmatrix} \quad (3.41)$$

A soma dos elementos da diagonal principal é a energia cinética turbulenta específica, freqüentemente denominada por energia cinética somente

$$k = \frac{1}{2} \overline{u_i' u_i'} = \frac{1}{2} \left[\overline{u'^2} + \overline{v'^2} + \overline{w'^2} \right] \quad (3.42)$$

Por conveniência, a correlação de velocidades pode ser expressa por

$$\sigma_{i,j}^T = -\overline{u_i' u_j'} = \frac{\tau_{i,j}^T}{\rho} \quad (3.43)$$

O tensor das tensões no fluido é decomposto na sua componente média, $-P\delta_{i,j} + 2\mu S_{i,j}$, e outra devido à turbulência (flutuações das velocidades), $\overline{\rho u_i' u_j'}$

$$\tau_{i,j} = -P\delta_{i,j} + 2\mu S_{i,j} - \overline{\rho u_i' u_j'} \quad (3.44)$$

A forma mais conhecida da equação de transporte do momento obtém-se transportando o termo de fluxo de momento das flutuações para o lado direito da equação e reconhecendo-o como a contribuição do movimento turbulento ao campo das tensões

$$\frac{\partial(\rho u_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j u_i)}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[2\mu S_{i,j} - \overline{\rho u_j' u_i'} \right] \quad (3.45)$$

O tensor de Reynolds introduz mais seis variáveis além de u, v, w e P . Portanto existem mais incógnitas que equações para o problema. Ao tentar obter equação para as tensões turbulentas aparecerão incógnitas do tipo $\overline{u_i' u_j' u_k'}$, por exemplo, que serão geradas pelos termos não lineares da inércia. Isso torna o processo de fechamento recursivamente não solucionável.

A Equação de Transporte do Tensor de Reynolds pode ser obtida a partir da equação do momento da flutuação, que é obtida subtraindo-se a equação de Navier-Stokes da velocidade instantânea da equação de Navier-Stokes, em termos da média temporal. A operação é detalhada termo a termo a seguir [PROMEC, 2006].

O termo advectivo:

$$-\frac{\partial(\rho u_j \sigma_{i,k})}{\partial x_j} - \rho \sigma_{j,k} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \rho \sigma_{i,j} \frac{\partial u_k}{\partial x_j} + \rho \frac{\partial \overline{u_i' u_k' u_j'}}{\partial x_j} \quad (3.46)$$

O termo de pressão:

$$\overline{u_i \frac{\partial(p')}{\partial x_k}} + \overline{u_k \frac{\partial(p')}{\partial x_i}} = \frac{\partial(\overline{u_i p'})}{\partial x_k} + \frac{\partial(\overline{u_k p'})}{\partial x_i} - \overline{p' \frac{\partial u_i'}{\partial x_k}} - \overline{p' \frac{\partial u_k'}{\partial x_i}} = \frac{\partial(\overline{u_i p'})}{\partial x_k} + \frac{\partial(\overline{u_k p'})}{\partial x_i} - \overline{p' S'_{i,k}} \quad (3.47)$$

O termo viscoso:

$$\overline{\mu u'_i \frac{\partial^2 u'_k}{\partial x_j \partial x_j}} + \overline{\mu u'_k \frac{\partial^2 u'_i}{\partial x_j \partial x_j}} \therefore \mu \left[\frac{\partial^2 \overline{u'_i u'_k}}{\partial x_j \partial x_j} \right] - 2\mu \overline{\frac{\partial u'_i}{\partial x_j} \frac{\partial u'_k}{\partial x_j}} \therefore -\mu \left[\frac{\partial^2 \sigma_{i,k}}{\partial x_j \partial x_j} \right] - 2\mu \overline{\frac{\partial u'_i}{\partial x_j} \frac{\partial u'_k}{\partial x_j}} \quad (3.48)$$

Lembrando que $\tau_{i,j}^T$ representa o tensor turbulento. Para expandir e simplificar os termos convectivos é utilizada a equação da continuidade

$$\frac{\partial u'_i}{\partial x_i} = \frac{\partial u'}{\partial x_i} = 0 \quad (3.49)$$

Montando o novo balanço com os termos convectivo, pressão e difusivo obtidos, e considerando ρ conste em regime permanente, chega-se a

$$\underbrace{\frac{\partial u'_j \sigma_{i,k}}{\partial x_j}}_{\text{Transporte do tensor pelo campo médio}} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\underbrace{\nu \frac{\partial \sigma_{i,k}}{\partial x_j}}_{\text{Difusão molecular}} \right] + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\underbrace{C_{i,k,j}}_{\text{Difusão turbulenta}} \right] - \underbrace{\sigma_{k,j} \frac{\partial u'_i}{\partial x_j} - \sigma_{k,i} \frac{\partial u'_k}{\partial x_j}}_{\text{Produção tensor pelo campo médio}} + \underbrace{\varepsilon_{i,k}}_{\text{Dissipação dotensor}} - \underbrace{\Pi_{i,k}}_{\text{Correlação pressão-deformação}} \quad (3.50)$$

onde as definições dos termos são

$$\sigma_{i,k} = -\overline{u'_i u'_k} \quad (3.51)$$

$$C_{i,k,j} = \left[\overline{(u'_i u'_k u'_j)} + \frac{\overline{p'}}{\rho} (u'_k \delta_{j,k} + u'_i \delta_{j,i}) \right] \quad (3.52)$$

$$\varepsilon_{i,k} = 2\nu \overline{\frac{\partial u'_i}{\partial x_j} \frac{\partial u'_k}{\partial x_j}} \quad (3.53)$$

$$\Pi_{i,k} = \frac{\overline{p'}}{\rho} \cdot \left(\frac{\partial u'_i}{\partial x_k} + \frac{\partial u'_k}{\partial x_i} \right) = 2\overline{p' S'_{i,k}} \quad (3.54)$$

A equação do tensor de Reynolds possui seis componentes, uma para cada tensor. Apesar de se ter criado 6 novas equações, foram também geradas 22 novas incógnitas, $\overline{u'_i u'_k u'_j}$,

$$2\nu \overline{\frac{\partial u'_i}{\partial x_j} \frac{\partial u'_k}{\partial x_{jj}}}, \quad \overline{u'_i \frac{\partial(p')}{\partial x_k} + u'_k \frac{\partial(p')}{\partial x_i}}.$$

Devido a não-linearidade da Equação de Navier-Stokes nota-se que a tentativa de se obter equações de ordem estatística superiores (correlação $u'_i u'_k$) geram novas incógnitas. Se fossem produzidas novas equações para os termos incógnitos, novas variáveis desconhecidas seriam geradas. Isto ocorre porque o processo de média é matemático e não físico. A geração de incógnitas revela que o processo de média de Reynolds é uma simplificação da equação de

Navier Stokes. Se os termos incógnitos não são modelados adequadamente, significa que a equação de Navier Stokes modelada está perdendo informação.

3.3.6. MODELO SSG

Neste trabalho estuda-se uma solução do problema utilizando o modelo SSG. [Speziale, 1991]. O modelo utiliza constantes diferentes dos demais e correlação da deformação causada pela pressão com as perturbações, que é quadrática

$$\frac{\partial}{\partial t}(\overline{\rho u_i u_j}) + \frac{\partial}{\partial x_k}(U_k \overline{\rho u_i u_j}) = P_{ij} + \phi_{ij} + \frac{\partial}{\partial x_k} \left[\left(\mu + \frac{2}{3} c_s \rho \frac{k^2}{\varepsilon} \right) \frac{\partial \overline{\rho u_i u_j}}{\partial x_k} \right] - \frac{2}{3} \delta_{ij} \varepsilon \rho \quad (3.55)$$

$$\frac{\partial \rho \varepsilon}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho U \varepsilon) = \frac{\varepsilon}{k} (c_{\varepsilon 1} P - c_{\varepsilon 2} \rho \varepsilon) + \nabla \cdot \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \nabla \cdot \varepsilon \right] \quad (3.56)$$

$$\phi_{ij} = \phi_{ij1} + \phi_{ij2} \quad (3.57)$$

$$\phi_{ij1} = -\rho \varepsilon \left(C_{s1} a + C_{s2} \left(a a - \frac{1}{3} a \cdot a \delta \right) \right) \quad (3.58)$$

$$\begin{aligned} \phi_{ij2} = & -C_{r1} P a + C_{r2} \rho k S - C_{r3} \rho k S \sqrt{a \cdot a} + \dots \\ & \dots + C_{r4} \rho k \left(a S^T + S a^T - \frac{2}{3} a \cdot S \delta \right) + C_{r5} \rho k (a W^T + W a^T) \end{aligned} \quad (3.59)$$

Nesta formulação a é o tensor anisotropia, S é a taxa de deformação e W a vorticidade. As constantes apresentadas na Tab. 3.4 servem na maioria para correlação do termo de pressão com as flutuações.

Tabela 3.4 – Constantes utilizadas no modelo SSG.

$C_{\mu RS}$	S_{eRS}	c_s	$c_{\varepsilon 1}$	$c_{\varepsilon 2}$	C_{s1}	C_{s2}	C_{r1}	C_{r2}	C_{r3}	C_{r4}	C_{r5}
0.1	1.36	0.22	1.45	1.83	1.7	-1.05	0.9	0.8	0.65	0.625	0.2

3.3.7. MODELAGEM DO ESCOAMENTO PRÓXIMO À PAREDE

Próximo a uma parede com condição de não-deslizamento, existem fortes gradientes das variáveis de transporte. Além disto, efeitos viscosos destes processos em simulações numéricas trazem os seguintes problemas:

- como contabilizar os efeitos viscosos na parede

- como resolver a variação rápida das variáveis no escoamento que ocorre na região da camada limite.

Análises experimentais e matemáticas mostram que a região próxima à parede pode ser dividida em duas camadas. Na região mais interna, a subcamada viscosa, onde o escoamento é quase todo laminar e a viscosidade (molecular) tem papel dominante na transferência de momento e calor. Mais distante da parede, na camada logarítmica, a turbulência domina o processo de mistura, Fig. 3.2. Finalmente, existe uma região entre a subcamada viscosa e a camada logarítmica, onde os efeitos de viscosidade molecular e turbulência são de igual importância.

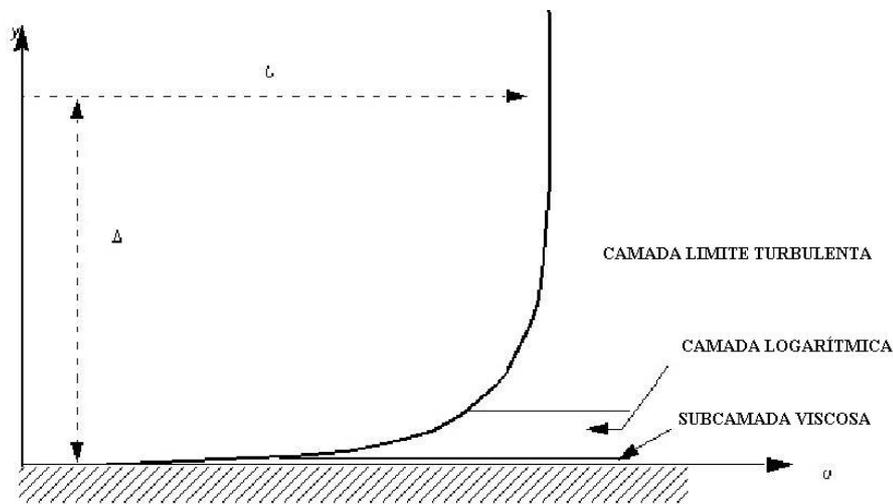


Figura 3.2 – Divisão do escoamento próximo a parede.

Assumindo que o perfil logarítmico aproxima razoavelmente a distribuição de velocidade próxima à parede, este fornece meios de calcular numericamente a tensão de cisalhamento como uma função da velocidade a uma dada distância da parede. Isto é conhecido como uma função de parede. Este trabalho utiliza uma aproximação comum para modelar o escoamento na região próxima à parede: o método de função de parede utiliza fórmulas empíricas que impõem condições favoráveis próximo à parede sem resolver a camada limite, assim economizando recurso computacional, [Grotjans, H. and Menter, F.R, 1998]. No programa computacional utilizado (ANSYS-CFX 10) todos os modelos de turbulência têm este recurso. O parâmetro utilizado na distância adimensional à parede é o de $y^+ < 300$, entretanto em todas as malhas utilizadas no trabalho verificou-se $y^+ < 80$.

Sendo que y^+ é a dimensão característica adimensional, $u^* y^+ / \nu$ e u^* é a velocidade de referência, $\sqrt{\tau_w / \rho}$ e τ_w é a tensão na parede.

A maior vantagem da aproximação por função de parede é que em altos gradientes de cisalhamento próximos a parede pode-se modelar o domínio com malhas não muito refinadas, levando a economia de tempo de CPU e armazenamento.

3.4. EQUAÇÃO DE CONSERVAÇÃO DAS ESPÉCIES QUÍMICAS

Para a modelagem opta-se pelo conceito conhecido como Euleriano-Euleriano, onde mesmo que exista uma fase diferente da outra, por exemplo, partículas dispersas em um gás, considera-se uma única fase fluida contínua no espaço e tempo. Um conjunto similar de equações de discretização é resolvido para cada fase. Este trabalho não apresenta casos de escoamentos multifásicos, e sim combustível e oxidante no estado de gás, onde se considera um fluido multicomponente.

Para um fluido multicomponente as equações de transporte são resolvidas para velocidade, pressão, temperatura e outras quantidades de interesse no fluido. Estas quantidades são descritas todas neste capítulo. Entretanto equações adicionais devem ser resolvidas para determinar como os componentes são transportados pelo fluido.

O movimento médio do fluido é modelado usando um único campo de velocidade, pressão e temperatura. A influência dos múltiplos componentes é observada somente através da variação das propriedades. A variação de densidade tem grande importância, pois afeta diretamente a conservação de massa. Cada componente tem sua própria equação de conservação de massa, que pode ser expressa pela notação tensorial

$$\frac{\partial \tilde{\rho}_i}{\partial t} + \frac{\partial (\tilde{\rho}_i \tilde{U}_j)}{\partial x_j} = - \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho_i (\tilde{U}_{ij} - \tilde{U}_j) - \overline{\rho_i U_j''} \right) + S_i^m \quad (3.60)$$

onde $\tilde{\rho}_i$ é a densidade ponderada do componente i do fluido na mistura, ou a massa do componente por volume. O campo de velocidade ponderado é definido por

$$\tilde{U}_j = \sum \left(\frac{\tilde{\rho}_i \tilde{U}_{ij}}{\rho} \right) \quad (3.61)$$

\tilde{U}_{ij} é a velocidade ponderada do componente fluido i , e o fluxo relativo de massa define-se por

$$\rho (\tilde{U}_{ij} - \tilde{U}_j) \quad (3.62)$$

S_i^m é o termo fonte para o componente i , incluindo o efeito de reações químicas. Ao somar as equações de todos os componentes do fluido chega-se na equação da continuidade

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{U}_j)}{\partial x_j} = 0 \quad (3.63)$$

Visto que o termo fonte S_i^m é nulo como resultado da soma. Reagentes viram produtos. O termo de fluxo mássico relativo leva em conta o movimento diferencial dos componentes individuais. Este termo deve ser modelado de forma a incluir os efeitos de gradientes de concentração, gradiente de pressão, forças externas ou um gradiente de temperatura. Destas fontes possíveis de movimento relativo entre os componentes da mistura, o primeiro efeito é o do gradiente de concentração. Para modelar este efeito surge o termo difusivo.

$$\rho (\tilde{U}_{ij} - \tilde{U}_j) = - \frac{\Gamma_i}{\rho} \frac{\partial \tilde{\rho}_i}{\partial x_j} \quad (3.64)$$

O coeficiente de difusão molecular, Γ_i , é considerado igual a ρD_i , onde D_i é a difusividade cinemática.

A fração mássica é definida então por

$$\tilde{Y}_i = \frac{\tilde{\rho}_i}{\rho} \quad (3.65)$$

Por definição a soma de todas as frações mássicas é 1. Substituindo a Eq. 3.63 e 3.64 na Eq. 3.60 resulta

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Y}_i}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{U}_j \tilde{Y}_i)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\Gamma_i \frac{\partial \tilde{Y}_i}{\partial x_j} \right) - \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{\rho Y_i'' U_j''}) + S_i^m \quad (3.66)$$

Os termos de fluxo escalar são modelados usando a hipótese de viscosidade turbulenta.

$$\overline{\rho Y_i'' U_j''} = \frac{\mu_t}{Sc_t} \frac{\partial \tilde{Y}_i}{\partial x_j} \quad (3.67)$$

onde Sc_t é o número de Schmidt turbulento. Substituindo a Eq. 3.67 na Eq. 3.66, e assumindo que se tenham as médias ponderadas por massa de Y_i

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Y}_i}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{U}_j \tilde{Y}_i)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\Gamma_{i,eff} \frac{\partial \tilde{Y}_i}{\partial x_j} \right) + S_i^m \quad (3.68)$$

onde

$$\Gamma_{i,eff} = \Gamma_i + \frac{\mu_t}{Sc_t} \quad (3.69)$$

A Eq. 3.68 é simplesmente uma forma da equação genérica de advecção-difusão, como as demais equações resolvidas para um problema de movimento fluido. Além disso, é conveniente resolver Y_i para estabelecer a composição da mistura fluida.

O programa computacional utilizado para solução das equações do escoamento resolve o número de componentes (N_c) menos uma ($N_c - 1$) equações para todos menos um componente da mistura. O componente que não tem equação resolvida é chamado de componente de restrição e sua fração mássica vem da equação de restrição para balanço

$$\sum_{i=A,B,C}^{N_c} Y_i = 1 \quad (3.70)$$

Considerando que a mistura dos componentes forme uma mistura ideal, ou seja, que as propriedades da mistura possam ser determinadas pelas propriedades ponderadas dos componentes ponderadas. Considerando um dado volume V da mistura de fluido, e sendo M_i a massa do componente i presente neste volume, $\rho_i = \frac{M_i}{V}$. O volume parcial ocupado pelo componente i é definido como V_i , que é ocupado pela dada massa do componente numa mesma temperatura e pressão local da mistura. A densidade termodinâmica do componente, que resulta da solução de sua equação de estado na pressão e temperatura da mistura, deve ser expressa por $\langle \rho_i \rangle = \frac{M_i}{V_i}$. A diferença na definição das densidades é que ρ_i é uma quantidade relacionada à composição da mistura, enquanto que $\langle \rho_i \rangle$ é uma propriedade do material do componente. Dado que a soma dos volumes ocupados pelos componentes deve resultar o volume V

$$1 = \sum_{i=A,B,C\dots}^{N_c} \frac{V_i}{V} = \sum_{i=A,B,C\dots}^{N_c} \frac{M_i / \langle \rho_i \rangle}{M_i / \rho_i} = \sum_{i=A,B,C\dots}^{N_c} \frac{\rho_i}{\langle \rho_i \rangle} = \sum_{i=A,B,C\dots}^{N_c} \frac{\rho Y_i}{\langle \rho_i \rangle} \quad (3.71)$$

ou

$$\frac{1}{\rho} = \sum_{i=A,B,C\dots}^{N_c} \frac{Y_i}{\langle \rho_i \rangle} \quad (3.72)$$

Então a densidade da mistura pode ser calculada a partir das frações mássicas Y_i e a densidade termodinâmica de todos os componentes, que requer conhecimento da temperatura e pressão da mistura, além da equação de estado própria de cada componente.

As demais propriedades constitutivas do fluido α pode ser calculada por

$$\alpha = \sum_{i=A,B,C\dots}^{N_c} Y_i \alpha_i \quad (3.73)$$

onde α_i é o valor da propriedade do componente i .

Como há uma forte dependência das propriedades dos componentes com a temperatura e pressão, tem-se uma tabela de valores de ρ e c_p gerados por funções, considerando os limites superiores e inferiores dos valores de temperatura e pressão para o cálculo da entalpia. O modelo utilizado para determinar os valores inferior e superior do calor específico, c_p , é o da equação apresentado por McBride e Gordon, 1994, com considerações de Burcat e Ruscic, 2005, Eq. 3.74, onde os coeficientes são específicos para cada componente da mistura

$$c_p = R(a_1 + a_2T^1 + a_3T^2 + a_4T^3 + a_5T^4 + a_6T^{-1} + a_7) \quad (3.74)$$

O programa computacional utilizado para solução do problema utiliza interpolações para construir a tabela de propriedades do fluido. A relação entre as propriedades dos componentes da mistura e a temperatura é dada pela solução da entalpia da mistura. A cada modificação de T e p é calculada uma variação de entalpia, dh , primeiro a pressão constante, e depois a temperatura constante, como ilustra a Fig 3.3

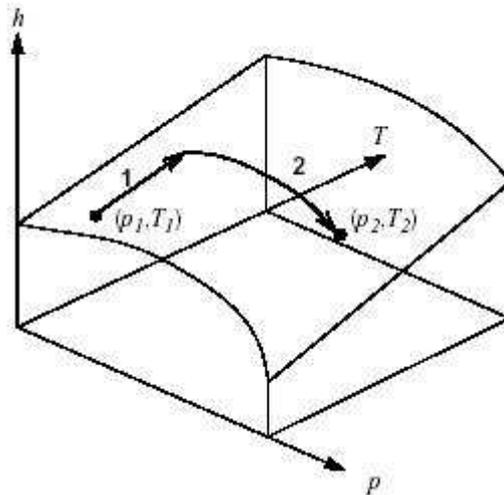


Figura 3.3 – Mudança de estado de uma substância através de suas propriedades [CFX, 2002].

Por exemplo, a mudança total de entalpia do estado 1 para o estado 2 do componente é dada por

$$h_2 - h_1 = \int_{T_1}^{T_2} c_p dT + \int_{p_1}^{p_2} \frac{1}{\rho} \left[1 + \frac{T}{\rho} \left(\frac{\partial \rho}{\partial T} \right)_p \right] dp \quad (3.75)$$

Caso a densidade seja proporcional a $1/T$, como no modelo de gás ideal, o segundo termo torna-se nulo.

3.4.1. TERMO FONTE DO TRANSPORTE DE ESPÉCIES QUÍMICAS

O termo fonte, S_m^i , da equação representa as reações químicas que ocorrem através do surgimento de determinado componente ou seu consumo. Este termo está diretamente relacionado à taxa de reação de determinado componente em determinada reação

$$S_i^m = \overline{MM}_i \sum_{k=1}^n (\eta_{ki}'' - \eta_{ki}') RR_k \quad (3.76)$$

onde \overline{MM}_i é massa molecular do composto i , η' é o coeficiente estequiométrico do composto i na reação de ida, η'' é o coeficiente estequiométrico na de volta e RR_k é a taxa da reação k . A maneira como modelar esta taxa de formação ou consumo é o que se resume por vezes ao modelo de combustão ou modelo de taxa de combustão. O presente trabalho comenta alguns destes modelos e abordagens no primeiro capítulo e utiliza um modo misto de cálculo da fonte ou sumidouro de espécies químicas.

Praticamente todas as reações químicas obedecem à lei química básica de Arrhenius, onde o avanço da reação é diretamente proporcional à relação dependente da temperatura, como apresentado no capítulo anterior

$$A_K T^\beta \exp\left(-\frac{E_A}{RT}\right) \quad (3.77)$$

A modelagem da taxa de reação por taxas finitas, ou modelo de taxas químicas finitas é baseada principalmente neste princípio descontando a criação e o consumo de determinado componente em determinada reação. Por exemplo, para a reação K tem-se

$$RR_K = \left(F_K \prod_{l=A,B,\dots}^{N_c} [I]^{r_{kl}'} - B_K \prod_{l=A,B,\dots}^{N_c} [I]^{r_{kl}''} \right) \quad (3.78)$$

onde $[I]$ representa a concentração molar do componente I e F_k e B_k são as constantes de taxa de avanço e retorno, respectivamente, r representa a ordem do componente I na reação elementar K . Esta ordem da reação é igual ao coeficiente estequiométrico para reações elementares, mas pode ser diferente em reações globais. As constantes de avanço ou retrocesso da reação são respectivamente

$$F_k = A_K T^\beta \exp\left(-\frac{E_A}{RT}\right) \text{ e } B_k = A_K T^\beta \exp\left(-\frac{E_A}{RT}\right) \quad (3.79)$$

onde A é o coeficiente pré-exponencial, β é o expoente de temperatura (adimensional), E_A é a energia de ativação e T é a temperatura absoluta. Diferentes valores de A_k , β e E_A são usados para as reações de avanço e retrocesso, dependendo da reação.

Outros modelos, que buscam a solução do termo de criação ou consumo de espécies químicas, relacionam a física do problema principalmente com a mistura entre componentes. Utilizam como parâmetro regulador da taxa de reação, a relação entre tempo de mistura dos componentes e tempo característico da reação química. Um modelo bastante utilizado para a modelagem de taxas de reação, seguindo a relação entre tempo de mistura e tempo característico da reação, é o Modelo de Dissipação de Vórtices (EDM). É baseado no conceito de que a reação química é rápida quando comparada ao processo de transporte do escoamento. Quando componentes reativos se misturam a níveis moleculares, eles instantaneamente formam produtos. O modelo assume que a taxa de reação deve estar relacionada diretamente ao tempo requerido para misturar os reagentes ao nível molecular. Em escoamentos turbulentos, este tempo de mistura é dominado por propriedades de vórtices e, portanto, a taxa é proporcional ao tempo de mistura definido pela energia cinética turbulenta e pela dissipação de energia cinética turbulenta

$$\text{taxa} \propto \frac{\varepsilon}{k} \quad (3.80)$$

Este conceito de controle de reação é aplicável em muitos problemas de combustão onde as taxas de reação são rápidas se comparadas com o tempo de mistura dos componentes. No modelo de quebra de vórtices (Eddy Breakup) a taxa de progresso da reação, K , é determinada pelo menor valor obtido das duas equações, uma relativa ao limitante dos reagentes

$$RR_k = A \frac{\varepsilon}{k} \min \left(\frac{[I]}{\eta_{kl}'} \right) \quad (3.81)$$

onde $[I]$ é a concentração molar do componente I e η_{kl}' contempla somente os reagentes. A outra equação, relativa ao limitante dos produtos, é dada por

$$RR_k = AB \frac{\varepsilon}{k} \left(\frac{\sum_P [I] W_I}{\sum_P \eta_{kl}'' W_I} \right) \quad (3.82)$$

Para reações com mais de um passo (mais de uma reação na cadeia), sugere-se não utilizar o limitante de produtos. Quando utilizando modelos que relacionam tempo de mistura com tempo de reação para determinar a taxa de reação, é necessário haver um limitante físico, para que mesmo que haja muita mistura (tempo muito baixo de mistura) o tempo de reação constitua-se como um limitante. Para escoamentos altamente turbulentos a extinção da reação é sugerida para encerrar ao encontrar a condição a seguir

$$\tau_t < \tau_c \quad (3.83)$$

onde τ_c é um dado específico da mistura de componentes, e a escala de tempo do escoamento turbulento é calculada da solução dos campos de velocidades. Uma possibilidade para o valor desta escala de tempo é a escala de Kolmogorov

$$\tau_{KOLMOGOROV} = \sqrt{\frac{\nu}{\varepsilon}} \quad (3.84)$$

ou alternativamente utilizar a escala de tempo de mistura

$$\tau_{MISTURA} = \frac{k}{\varepsilon} \quad (3.85)$$

No presente trabalho utiliza-se um modelo misto de solução da taxa de reação e o modelo de dissipação de vórtices, modelando de forma adequada as diferentes áreas da câmara de combustão onde se verificam diferentes números de Damkohler. É assumida como a taxa de reação o menor valor calculado entre os dois modelos.

3.5 EQUAÇÃO DA ENERGIA

A equação de energia, em termos de entalpia, pode ser escrita na forma

$$\frac{\partial \rho h_{tot}}{\partial t} - \frac{\partial P}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{V} h_{tot}) = \nabla \cdot (\lambda \nabla T) + S^E \quad (3.86)$$

onde h_{tot} é definida como a entalpia total específica,

$$h_{tot} = h + \frac{1}{2} U^2 + gz \quad (3.87)$$

sendo $h = h(P, T)$. Neste trabalho desconsidera-se o trabalho gerado pelo atrito viscoso, que é de ordem inferior para caso das velocidades consideradas.

3.6. TRANSPORTE DE ENERGIA POR RADIAÇÃO

O objetivo da modelagem do transporte radiativo é obter o termo fonte da equação da energia referente a este modo, seja na fase gasosa ou entre as paredes da câmara de combustão.

A equação do transporte por radiação pode ser escrita da seguinte forma

$$\begin{aligned} \frac{dI_v(\vec{r}, \vec{s})}{ds} = & -(K_{av} + K_{sv})I_v(\vec{r}, \vec{s}) + K_a I_b(\nu, T) + \dots \\ & \dots + \frac{K_{sv}}{4\pi} \int dI_v(\vec{r}, \vec{s}') \Phi(\vec{s} \cdot \vec{s}') d\Omega' + S^{rad} \end{aligned} \quad (3.88)$$

onde ν é a frequência; \vec{r} vetor posição; \vec{s} vetor direção; S comprimento de caminho percorrido; K_a coeficiente de absorção; K_s coeficiente de espalhamento; I_b intensidade de emissão de corpo negro; I_ν intensidade de radiação espectral que depende da posição (r) e direção (\vec{s}); T temperatura local absoluta; Ω ângulo sólido; Φ função de fase e S^{rad} o termo fonte de intensidade de radiação. O primeiro termo da Eq. 2.88 representa a atenuação pela absorção, o segundo representa o aumento devido a emissão e o terceiro representa o aumento pelo espalhamento na direção do ângulo sólido.

A equação de transporte da radiação é uma equação diferencial de primeira ordem para I_ν , em uma direção fixa \vec{s} . Para resolver esta equação num domínio, uma condição de contorno para I_ν é necessária.

Devido à dependência de três coordenadas espaciais, duas coordenadas locais, S e a frequência, a solução formal da equação da transferência radiativa consome muito tempo. Por isso usualmente utilizam-se modelos para aproximar as dependências direcionais e espectrais. Este trabalho comenta, para as aproximações direcionais, os modelos Rosseland, P-1 e DTRM, enquanto que para a aproximação espectral utiliza-se o modelo de gás cinza.

3.6.1 MODELO PARA APROXIMAÇÃO DIRECIONAL DE ROSSELAND

O modelo da aproximação de Rosseland é uma simplificação da Equação de Transporte Radiativa para o caso de meios óticos espessos. Introduce um novo termo de difusão na equação de energia original, com um coeficiente de difusão fortemente dependente da temperatura.

Uma boa fonte para a simplificação da equação de transporte radiativo para o limite espesso ótico é apresentado em Siegel R. e Howel J.R., 2002 e CFX, 2002. O fluxo radiativo total em um meio opticamente espesso, e linearmente espalhante, pode ser escrito

$$q_r = -\int \frac{4}{3\beta - CK_s} \nabla E_{bv} dv \quad (3.89)$$

onde β é o coeficiente de extinção (absorção mais espalhamento). Quando a aproximação de Rosseland é introduzida na equação de transporte da energia, a condução e o fluxo radiativo podem ainda ser combinados da seguinte forma

$$q = q_c + q_r \therefore -(\lambda + \lambda_r) \nabla T \quad (3.90)$$

onde

$$\lambda_r = -\frac{16\sigma n^2 T^3}{3\beta} \quad (3.91)$$

onde λ é a condutividade térmica e λ_r é a condutividade radiativa total.

3.6.2 MODELO PARA APROXIMAÇÃO DIRECIONAL P-1

Este modelo é uma particularidade das aproximações P-N, que consistem na expansão da intensidade de radiação em harmônicos esféricos, com aproximação até N termos. Através desse procedimento é possível reduzir os termos íntegro-diferenciais resultantes do balanço de energia radiante em termos diferenciais. Quanto maior o valor de N, maior a precisão dos resultados provenientes desse método. Quando N é igual a 1 o fluxo de energia radiante é expresso por meio de diferenciais de primeira ordem da intensidade de radiação, e o método é denominado aproximação diferencial. A utilização da aproximação P-1 no problema de transferência de calor em dutos circulares (forma usual em combustores), considerando apenas os traços radiais de energia radiante, fornece resultados satisfatórios do ponto de vista de tempo de cálculo. Esse método permite a introdução da dependência do coeficiente de absorção em relação ao espectro de radiação e do fenômeno de espalhamento.

O fluxo de calor radiativo espectral no limite difusivo para um meio emissor, absorvente, e linearmente espalhante pode ser calculado como [CFX, 2002, Siegel R. e Howel J.R., 2002]

$$q_{rv} = -\frac{1}{3(K_{av} - K_{sv}) - AK_{sv}} \nabla G_v \quad (3.92)$$

onde G_v é a radiação espectral incidente, dada por

$$G_v = \int I_v d\Omega_s \quad (3.93)$$

A equação para a intensidade de radiação espectral incidente que resulta ao substituir os termos anteriores na equação de transporte da radiação é a seguinte

$$-\nabla \cdot \left(\frac{1}{3(K_{av} - K_{sv}) - AK_{sv}} \nabla G_v \right) = K_{av} (E_{bv} - G_v) \quad (3.94)$$

onde A é o coeficiente linear de anisotropia.

3.6.3 MODELO PARA APROXIMAÇÃO DIRECIONAL DTRM

O Discrete Transfer Radiation Method baseia-se no princípio de que um fluxo de calor por radiação que atravessa um meio participante é atenuado ou aumentado devido à absorção e emissão deste meio, [Özisik, 1985]. Este método pode ser usado de forma acoplada a um método numérico, tal como o método dos Volumes Finitos. A principal consideração do DTRM é que a

radiação que parte de uma superfície discreta numa certa faixa de ângulos sólidos pode ser aproximada por uma única direção. A técnica de traçado destas direções usada no DTRM é capaz de prever com suficiente precisão a transferência de calor entre superfícies, sem utilizar o cálculo do fator de forma. O DTRM também assume que todas as superfícies são difusas. Isto significa que a reflexão da radiação incidente sobre uma superfície é isotrópica com relação ao ângulo sólido. Encarando o fenômeno como volumétrico, ao assumir um fluxo de calor com intensidade de radiação hemisférica total difusa i , passando por um volume de fluido semitransparente, absorvedor e emissor, de espessura S e temperatura uniforme T , pode-se obter, como resultado de um balanço, a variação na intensidade de radiação por unidade de comprimento ao longo da direção de propagação. Sendo assim, a variação na intensidade de radiação pode ser escrita como a diferença entre o ganho devido à emissão e a atenuação devido à absorção do meio, [Siegel R. e Howel J.R., 2002]. Deste modo a variação da entalpia no fluido devido à radiação pode ser calculada através da soma das alterações na intensidade de radiação de cada segmento S , e de cada direção que é determinada através do volume de controle. Esta variação é então introduzida no termo fonte da equação da conservação de energia, tal como S^{rad} .

A implementação do modelo de transferência discreta DTRM no software utilizado [CFX, 2002] assume que o espalhamento é isotrópico, simplificando a Eq. (3.88) para

$$\frac{dI_v(\vec{r}, \vec{s})}{ds} = -(K_{av} + K_{sv})I_v(\vec{r}, \vec{s}) + K_a I_b(\nu, T) + \frac{K_{sv}}{4\pi} \int I_v(\vec{r}, \vec{s}') d\Omega' + S^{rad} \quad (3.95)$$

e assumindo que o sistema é homogêneo, tal que

$$I_v(\vec{r}, \vec{s}) = I_{v0} \exp(-(K_{av} + K_{sv})S) + I_{bv} (1 - \exp(-K_a S)) + K_{sv} \bar{I}_v \quad (3.96)$$

onde I_{v0} é a intensidade de radiação saindo da fronteira e I_v é a intensidade de radiação média. Integra-se então I ao longo do ângulo sólido em pontos discretos para encontrar a radiação espectral incidente G , e o fluxo radiativo q_r , na hipótese de homogeneidade, para estender a solução a todo o domínio. As não linearidades no sistema são resolvidas iterativamente.

O objetivo da modelagem da radiação é obter a absorção e emissão volumétrica. Cálculos adicionais são ainda necessários. Para o modelo espectral de gás cinza, o cálculo é feito uma vez para um único campo de intensidades de radiação. Já nos modelos de soma ponderada os termos têm coeficientes dependentes do comprimento de onda.

3.6.4 MODELO PARA APROXIMAÇÃO ESPECTRAL DE GÁS CINZA

Nesse modelo o coeficiente de extinção do gás (ou coeficiente de absorção, quando não ocorre espalhamento) é considerado independente do comprimento de onda. De acordo com as características das propriedades espectrais dos gases, é evidente que eles estão distantes desse modelo. Entretanto há algumas situações em que podem ser considerados cinzas sobre trechos do espectro. Neste trabalho se considera o valor 1mm^{-1} para o índice de refração e 1m^{-1} para a absorção do gás, o espalhamento é considerado nulo.

Em outros casos, quando há presença de partículas de fuligem ou outro material no meio, para melhorar sua emissão e absorção, o comportamento da mistura pode aproximar-se daquele de gás cinza. Além disso, gases cinzas são considerados por permitirem o entendimento de muitas das características do processo de radiação térmica, sem as complicações que os efeitos espectrais podem trazer.

3.7. EQUAÇÃO DE TRANSPORTE DE UMA VARIÁVEL GENÉRICA Φ

Observa-se em todas as equações apresentadas anteriormente uma forma comum que pode ser aplicada para sua representação

$$\frac{\partial(\rho\Phi)}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho\vec{U}\Phi) = \vec{\nabla} \cdot (\Gamma^\Phi \vec{\nabla}\Phi) + S^\Phi \quad (3.97)$$

onde \vec{U} é o vetor velocidade, ρ a densidade, Γ^Φ o coeficiente de difusão de Φ , S^Φ o termo fonte de Φ , variável a ser conservada no domínio de cálculo. Imaginando o domínio num sistema de coordenadas bidimensional, a equação geral fica

$$\frac{\partial(\rho\Phi)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u\Phi) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v\Phi) = \frac{\partial}{\partial x}\left(\Gamma^\Phi \frac{\partial\Phi}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(\Gamma^\Phi \frac{\partial\Phi}{\partial y}\right) + S^\Phi \quad (3.98)$$

onde o primeiro termo representa a variação temporal, os dois próximos termos são o transporte advectivo da variável, o primeiro termo após a igualdade representa a transporte difusivo da variável e o último termo representa o termo fonte da variável.

Para representar as equações discutidas nas seções anteriores pode-se imaginar nesta forma geral uma série de variáveis, coeficientes de difusão e termos fonte sendo aplicados. Por exemplo, para um caso bidimensional, laminar e incompressível, a Tab. 3.5 apresenta as equações que se deseja resolver.

Tabela 3.5 – Equações de conservação a serem resolvidas para o problema.

	Φ	Γ^Φ	S^Φ
Massa	1	0	0
Quantidade de movimento em X	U	μ	$-\frac{\partial P}{\partial x} + \frac{1}{3}\mu\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y}\right)$
Quantidade de movimento em Y	v	μ	$-\frac{\partial P}{\partial y} + \frac{1}{3}\mu\frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y}\right)$
Energia	T	$\frac{k}{c_p}$	S^T
Espécies Químicas	Y_i	ρD	S_i^m

Com esta generalização é possível através de um mesmo programa de cálculo resolver vários problemas de transferência, adaptando as equações com suas particularidades. As Eqs. 3.15, 3.17, 3.68, 3.86 mostram a conservação das variáveis de interesse no problema de combustão, com seus coeficientes de difusão e termos fonte.

Ainda que generalizada, a equação de conservação está na forma diferencial, e é necessário um método numérico para resolvê-la através de um computador. Segundo Maliska, 2003, via método numérico, se resolve uma ou mais equações diferenciais substituindo as derivadas existentes na equação por expressões algébricas. Um método analítico que tivesse a habilidade de resolver tais equações daria a solução em uma forma fechada, e seria possível calcular os valores das variáveis dependentes em nível infinitesimal, isto é, para um número infinito de pontos. Por outro lado, quando se decide fazer uma aproximação numérica da equação diferencial, se aceita ter a solução para um número discreto de pontos, e se o método for conservativo, quanto maior for este número de pontos, mais próxima da solução exata será a solução aproximada (ou numérica). Ao tornar mais preciso o cálculo, o sistema linear a ser resolvido irá aumentar proporcionalmente em número de equações. O esforço computacional também cresce, e de forma não-linear.

3.8. MÉTODO NUMÉRICO DE SOLUÇÃO

A seção anterior mostrou a forma genérica da equação de transporte de uma variável que se apresenta nos fenômenos que descrevem a transferência das quantidades de interesse no fenômeno de combustão. Para resolver este conjunto de equações é utilizado neste trabalho o Método dos Volumes Finitos, ou de Controle [Patankar, 1980; Versteeg e Malaskaera, 1995;

Maliska, 2003]. No CFX este método é implementado sobre uma malha não estruturada, com técnicas de conectividade originalmente criadas no âmbito do Método dos Elementos Finitos. Este método é utilizado para integrar as equações de conservação de massa, de quantidade de movimento, de energia cinética turbulenta e de sua dissipação, além da conservação de espécies químicas e de energia, resolvendo-as em pontos discretos do domínio.

O método consiste em discretizar o domínio espacial em elementos (podendo estes ser triangulares, quadrados, tetraédricos, hexaédricos) representados por uma malha, conforme exemplo na Fig. 3.4.

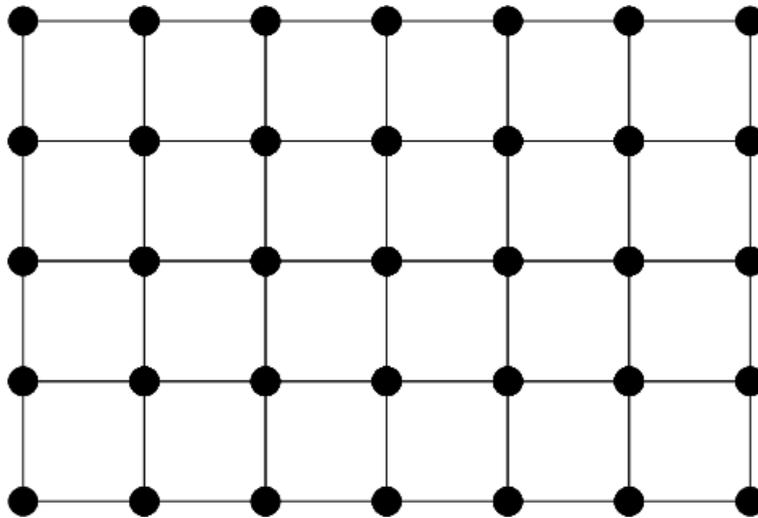


Figura 3.4 – Malha sobre uma geometria retangular.

Com os nós da malha tendo posição definida, então se pode visualizar como o método baseia os volumes finitos em torno dos nós. No caso deste trabalho onde elementos hexaédricos são utilizados, uma vista 2D de malha, Fig. (3.5), mostra que o volume de controle é formado ao adicionar os quadrantes adjacentes a cada nó,

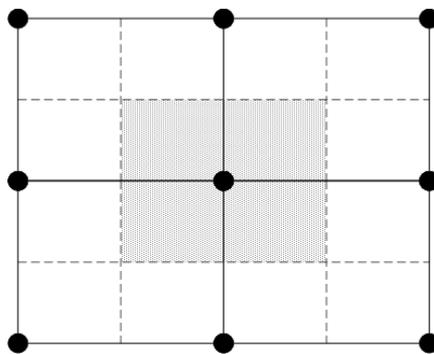


Figura 3.5 – Volume finito centrado num ponto da malha.

As equações governantes são integradas em torno de cada volume, não do elemento. Estas equações contém termos divergentes tais como convecção e difusão, então para trazer a solução das equações para variáveis conhecidas, é utilizado o teorema da divergência de Gauss para converter as integrais volumétricas em integrais de superfície, apenas destes termos (que são os mais importantes neste caso)

$$\int \frac{\partial}{\partial x_j} (-)_j dV = \int_s (-)_j d\vec{n}_j \quad (3.99)$$

Como o método numérico resolve de forma discreta o contínuo, diferindo da forma analítica, então se calcula a integral de superfície em locais discretos, ou pontos de integração, Fig. 3.6

$$\int_s (-)_j d\vec{n}_j \Rightarrow \sum_{ip} [(-)_j \Delta \vec{n}_j]_{ip} \quad (3.100)$$

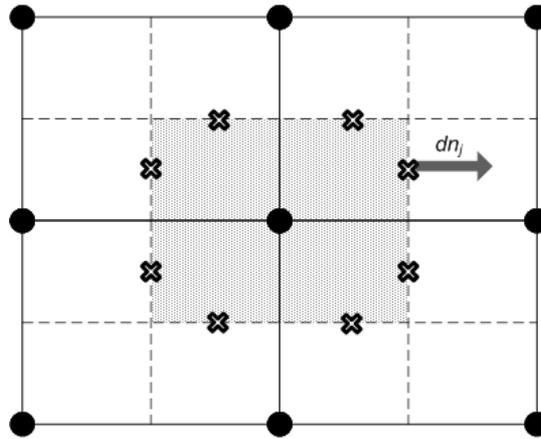


Figura 3.6 – Volume finito e seus pontos de integração.

Considerando as equações de conservação de massa, momento e energia, para o escoamento médio, em coordenadas cartesianas

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho U_j) = 0 \quad (3.101)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho U_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho U_j U_i) = -\frac{\partial P}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mu_{eff} \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) \right) \quad (3.102)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \Phi) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho U_j \Phi) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\Gamma_{eff} \left(\frac{\partial \Phi}{\partial x_j} \right) \right) + S^\Phi \quad (3.103)$$

estas equações podem ser integradas em torno de um volume de controle, usando o teorema do divergente de Gauss para converter integrais volumétricas em integrais de superfície, como a seguir

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho dV + \int_S \rho U_j d\vec{n}_j = 0 \quad (3.104)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho U_i dV + \int_S \rho U_j U_i d\vec{n}_j = - \int_S P d\vec{n}_j + \int \mu_{eff} \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) d\vec{n}_j + \int_V S_{U_i} dV \quad (3.105)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho \Phi dV + \int_S \rho U_j \Phi d\vec{n}_j = \int_S \Gamma_{eff} \left(\frac{\partial \Phi}{\partial x_j} \right) d\vec{n}_j + \int_V S^\Phi dV \quad (3.106)$$

onde V e S representam as integrais volumétricas e de superfície respectivamente e dn_j são os componentes cartesianos diferenciais do vetor normal à superfície. As integrais de superfície representam as integrações dos fluxos, assim como as integrais volumétricas representam termos fonte ou de acumulação.

Os fluxos de superfície devem ser representados discretamente nos pontos de integração para completar a conversão da equação contínua na sua forma discreta. Os pontos de integração, ip_n , estão localizados no centro de cada segmento de superfície que compõe o volume de integração. A forma discreta das equações integrais pode ser escrita como

$$\rho V \left(\frac{\rho - \rho^0}{\Delta t} \right) + \sum (\rho U_j \Delta \vec{n}_j)_{ip} = 0 \quad (3.107)$$

$$\rho V \left(\frac{U_i - U_i^0}{\Delta t} \right) + \sum \dot{m}_{ip} (U_i)_{ip} = \sum (P \Delta \vec{n}_j)_{ip} + \sum \left(\mu_{eff} \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) \Delta \vec{n}_j \right)_{ip} + \overline{S_{U_i}} V \quad (3.108)$$

$$\rho V \left(\frac{\Phi - \Phi^0}{\Delta t} \right) + \sum \dot{m}_{ip} K_{ip} = \sum \left(\Gamma_{eff} \frac{\partial \Phi}{\partial x_j} \Delta \vec{n}_j \right)_{ip} + \overline{S^\Phi} V \quad (3.109)$$

onde V é o volume de controle, o subíndice ip significa o ponto de integração, o somatório é feito em todos os pontos de integração do volume finito, Δn_j é o vetor normal à superfície externa do volume e Δt é o passo de tempo. O sobreíndice “0” representa o passo de tempo antigo. O fluxo de massa discreto através de uma superfície do volume de controle é representado por \dot{m}_{ip} e é dado por

$$\dot{m}_{ip} = (\rho U_j \Delta \vec{n}_j)_{ip}^0 \quad (3.110)$$

Todas as variáveis resolvidas do problema são armazenadas nos nós centrais deste volume. Para o cálculo dos fluxos na fronteira de cada volume são necessárias funções de interpolação a partir dos valores das variáveis nos pontos nodais. A interpolação no CFX é feita através do conceito *Blend Factor*, β , como a expressão abaixo mostra

$$\Phi_{ip} = \Phi_{up} + \beta r \cdot \nabla \Phi \quad (3.111)$$

onde Φ_{up} é o valor da variável no nó a montante (*upwind*), r é o vetor que une o nó a montante, up , ao ponto de integração ip , e $\nabla\Phi$ é a aproximação numérica do gradiente a montante. Quando β é zero, este método resulta no esquema *Upwind* de primeira ordem. Quando β é 1, obtêm-se o esquema *High Resolution* (HR) de segunda ordem. O termo $\beta r \cdot \nabla\Phi$, também chamado de correção numérica da advecção (Numerical Advection Correction, NAC), pode ser interpretado como uma correção anti-difusiva aplicada ao esquema *Upwind* [ANSYS-CFX, 2006].

No esquema advectivo HR, o software escolhe automaticamente, baseado nos gradientes locais, um valor para β em cada nó da malha. Com o objetivo de evitar oscilações da solução em regiões com fortes gradientes. Nas demais regiões o HR mantém β o mais próximo de 1 para assegurar a precisão de segunda ordem. Assim este esquema advectivo gera soluções de segunda ordem e evita a oscilação numérica [ANSYS-CFX, 2006]. Existe ainda a opção de funções de interpolação do tipo diferenças centrais, entretanto podem onerar mais ainda o cálculo.

As funções de interpolação utilizadas neste trabalho foram duas: *Upwind Differencing Scheme* (UDS), que se mostra um esquema de interpolação a convergência em casos parabólicos e com fortes gradientes, ou *High Resolution Scheme*, que se mostra um esquema adequado a problemas elípticos e parabólicos, entretanto onerando em tempo computacional a solução [CFX, 2002]. Será comentada nos casos apresentados posteriormente a escolha do esquema de interpolação.

O presente trabalho utiliza malha hexaédrica bem próximo do conceito de malha estruturada, entretanto a forma cilíndrica das câmaras estudadas acaba por criar alguns poucos elementos com ângulos internos não perpendiculares. Estas distorções nos elementos são consideradas pelo algoritmo de solução através do uso de funções de forma.

3.9 IMPLEMENTAÇÃO DO ANSYS CFX

O ANSYS CFX 10 é um algoritmo genérico que abrange muitas possibilidades. Entretanto, ao modelar cada problema elimina-se passos do algoritmo, ou pode-se também modificá-lo a partir da agregação de rotinas construídas pelo usuário. A Fig. 2.7 apresenta o algoritmo de solução do software, que basicamente para cada passo de tempo realiza as duas principais operações a seguir:

- 1 – Linearização das equações não-lineares (geração dos coeficientes) e estruturação da matriz de coeficientes
- 2 - Solução das equações lineares (processo iterativo) usando um método algébrico multibloco.

O avanço no tempo é controlado pelo passo de tempo físico, ou fator de passo de tempo local, determinando o avanço da solução para uma simulação em regime permanente (ou transiente distorcido). Neste caso há somente uma iteração de linearização (cálculo de coeficientes) por passo de tempo, Fig. 3.7.

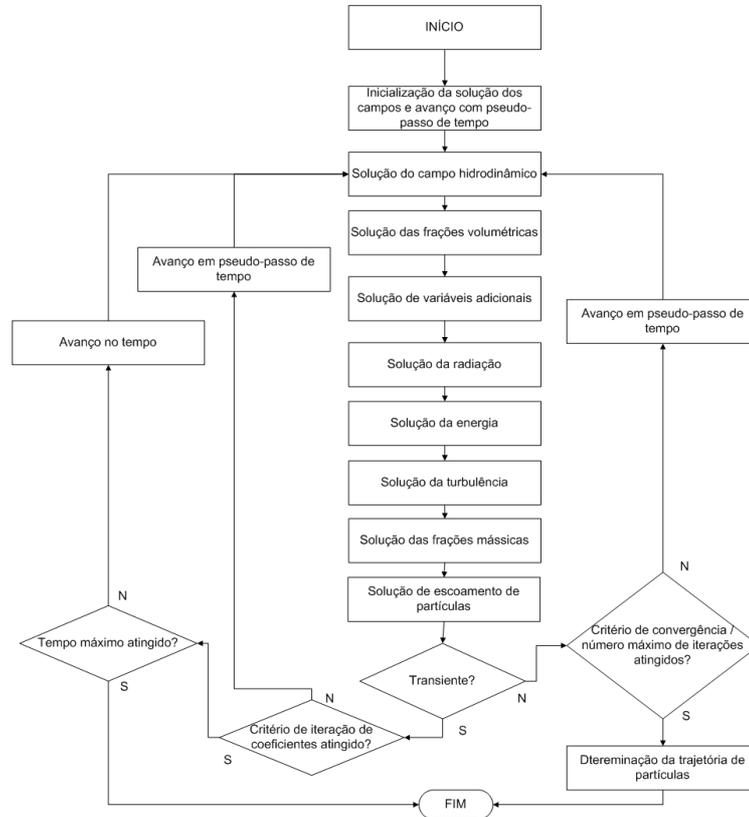


Figura 3.7 – Algoritmo geral do Ansys CFX 10.

No presente trabalho alguns passos do algoritmo são simplificados em todos os casos. A Fig. 3.8 mostra o algoritmo empregado nos casos estudados.

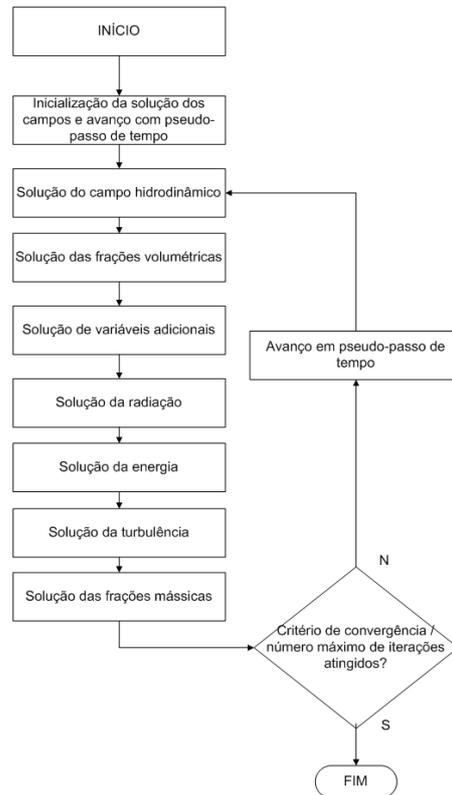


Figura 3.8 – Algoritmo empregado nos casos estudados no trabalho.

Em cada passo as equações conforme apresentadas nas seções anteriores são linearizadas e calculadas. O critério de convergência é o resíduo normalizado da solução, independente da escolha do passo de tempo e independente dos valores inicialmente adotados na solução. Para cada variável de interesse o resíduo normalizado é dado por

$$[\tilde{r}_p] = \frac{[r_\Phi]}{a_p \Delta\Phi} \quad (3.112)$$

onde r_Φ é o resíduo bruto do balanço do volume, a_p é o coeficiente do volume de controle e $\Delta\Phi$ é na variação da variável no domínio.

4. COMPARAÇÃO DA MODELAGEM MATEMÁTICA COM DADOS EXPERIMENTAIS

O objetivo de modelar uma câmara de combustão cilíndrica com baixo custo computacional e boa acuracidade nos resultados será atingido ao demonstrar o comportamento das soluções obtidas através da modelagem apresentada no Capítulo 3, comparando-as com dados experimentais de câmaras de combustão. Este trabalho avaliará duas situações práticas de câmaras cilíndricas: a primeira é a câmara experimentada por, Garréton e Simonin, 1994, e a segunda a câmara de, Meier, 2000. Os resultados discutidos serão a base para a avaliação da resolução de problemas similares.

4.1. PRIMEIRO CASO DE ESTUDO

O primeiro caso estudado é a câmara cilíndrica apresentada por Garreton e Simonin, 1994, Fig. 4.1. Trata-se de uma câmara vertical com duas entradas concêntricas de reagentes (gás metano e ar atmosférico).

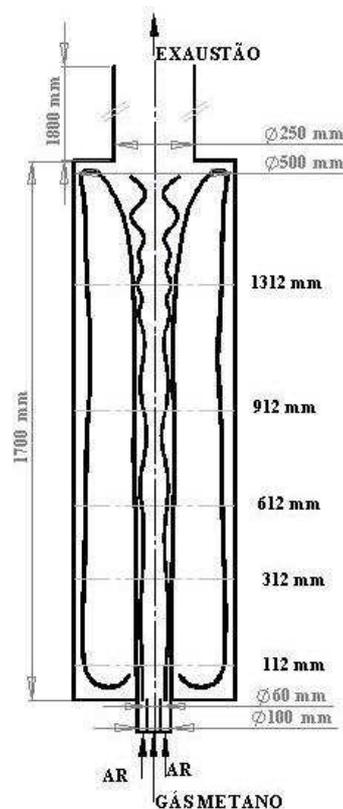


Figura 4.1 – A câmara de combustão experimentada por Garreton e Simonin, 1994.

As condições de entrada do ar são 36,29 m/s, e 323,15 K. A entrada de combustível é caracterizada pela velocidade de 7,71 m/s e 313,15 K. Com estas condições para ar atmosférico com densidade 1,02 kg/m³ e metano 0,649 kg/m³, a câmara desenvolve 400 kW de potência. A vazão mássica de metano é de 0,0125 kg/s de CH₄ (numa mistura de 90% metano e 10% nitrogênio) e 0,186 kg/s de ar, de acordo com Garreton e Simonin, 1994. A condição de contorno na parede é prescrita em 393 K de acordo com as especificações do experimento. A condição de entrada considera energia cinética turbulenta de entrada e sua dissipação, com valores de intensidade de 6 e 10%, respectivamente para ar e gás. O comprimento característico que determina a dissipação da energia cinética turbulenta é determinado em 0,04 e 0,03 m para ar e combustível respectivamente. As paredes da fornalha têm emissividade como a indicada pelo trabalho experimental, 0,6 e 1 na saída. A temperatura de saída tem seu valor definido pelo último volume do domínio, uma condição local da temperatura.

O segundo capítulo mostra um detalhamento da reação de oxidação do metano, entretanto para o presente trabalho o processo de oxidação é simplificado em duas etapas. Trabalhos da literatura mostram que os melhores resultados são alcançados com reação em dois passos. Um oxidando o metano gerando monóxido de carbono e outro oxidando o CO gerando dióxido de carbono, conforme Eq.4.1 e 4.2. Assim,



O modelo utilizado para o cálculo da taxa de reação é um modelo misto que avalia a menor taxa calculada pelo modelo de quebra de vórtices ou pelo modelo de Arrhenius.

O estudo de caso é um bom exemplo, pois tem geometria similar em várias aplicações de queimadores industriais e é interessante para obter informação para sistemas maiores como fornos de secagem, secadores rotativos, incineradores e geradores de vapor. A câmara, Fig. 4.2, também representa bem os casos de operação com chamas de formato alongado, por exemplo, quando a temperatura de saída dos gases da câmara é uma variável de interesse do processo. A configuração de queimador a partir de jatos livres é comum quando operando queimadores na forma de chama longa, por exemplo, em caldeiras fumo-tubulares ou fornos rotativos no benefício de minério. Esta câmara é caracterizada pela mistura da camada cisalhante entre jatos de diferentes componentes e velocidades na entrada, assim como pelo intenso turbilhonamento no fim da câmara.

Os valores experimentais utilizados são os de Garreton e Simonin, 1994. Para validação dos valores calculados utilizam-se as cotas 312, 912 e 1312 mm e o perfil axial, que contém maior número de dados.

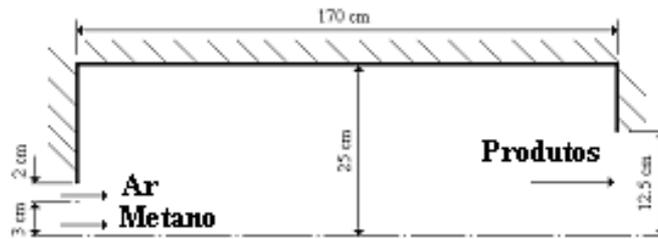


Figura 4.2 - A câmara experimental de Garreton e Simonin, 1994

Diferentes autores apresentaram soluções para o caso de Garréton e Simonin, 1994, como Silva C.V., 2005, Magel et al., 1996a, e Nieckele et al., 2001. Nenhuma simulação tridimensional desta câmara foi resolvida, sendo um bom caso para a determinação de modelos de combustão que caracterizem o fenômeno em geometrias similares e mais complexas em equipamentos industriais de grande porte, onde o consumo computacional e discretização também são parâmetros de interesse.

As propriedades termofísicas dos componentes da mistura, são apresentadas na Tab. 4.1.

Tabela 4.1 – Propriedades termo físicas utilizadas no cálculo.

Componente	μ [Ns/m^2]	λ [Wm/K]	\overline{MM}_{CH_4} [$kg/kmol$]
CH ₄	11,1e-6	343e-4	16,04
CO	16,6e-6	251e-4	28,01
CO ₂	14,9e-6	145e-4	44,01
H ₂ O	9,4e-6	193e-4	18,02
N ₂	17,7e-6	259e-4	28,01
O ₂	19,2e-6	266e-4	31,99

O calor específico como mostrado no Cap. 3 tem sua variação com a temperatura, calculada. A Tab. 4.2 apresenta os coeficientes das equações de interpolação.

$$c_p = R(a_1 + a_2T^1 + a_3T^2 + a_4T^3 + a_5T^4 + a_6T^{-1} + a_7) \quad (3.74)$$

Tabela 4.2 – Tabela dos coeficientes de interpolação para c_p em diferentes intervalos de T.

Coeficientes de interpolação para o intervalo, 300 K <T<1000 K						
	CH ₄	CO	CO ₂	H ₂ O	N ₂	O ₂
a_1	0.07787415e+01	0.03262452e+02	0.02275725e+02	0.03386842e+02	0.03298677e+02	0.03212936e+02
a_2	0.01747668e+00	0.01511941e-01	0.09922072e-01	0.03474982e-01	0.01408240e-01	0.01127486e-01
a_3	-0.02783409e-3	-0.03881755e-4	-0.01040911e-3	-0.06354696e-4	-0.03963222e-4	-0.05756150e-5
a_4	0.03049708e-6	0.05581944e-07	0.06866687e-07	0.06968581e-07	0.05641515e-07	0.01313877e-07
a_5	-0.01223931e-9	-0.0247495e-10	-0.0211728e-10	-0.0250658e-10	-0.0244485e-10	-0.0876855e-11
a_6	-0.09825229e+5	-0.01431054e+6	-0.04837314e+6	-0.03020811e+6	-0.01020900e+5	-0.01005249e+5
a_7	0.01372219e+3	0.04848897e+02	0.01018849e+03	0.02590233e+02	0.03950372e+02	0.06034738e+02
Coeficientes de interpolação para o intervalo 1000 K <T<5000 K						
	CH ₄	CO	CO ₂	H ₂ O	N ₂	O ₂
a_1	0.01683479e+02	0.03025078e+02	0.04453623e+02	0.02672146e+02	0.02926640e+02	0.03697578e+02
a_2	0.01023724e+00	0.01442689e-01	0.03140169e-01	0.03056293e-01	0.01487977e-01	0.06135197e-02
a_3	-0.03875129e-4	-0.05630828e-5	-0.01278411e-4	-0.08730260e-5	-0.05684761e-5	-0.01258842e-5
a_4	0.06785585e-08	0.01018581e-08	0.02393997e-08	0.01200996e-08	0.01009704e-08	0.01775281e-09
a_5	-0.0450342e-12	-0.0691095e-13	-0.0166903e-12	-0.0639161e-13	-0.0675335e-13	-0.0113643e-13
a_6	-0.01008079e+6	-0.01426835e+6	-0.04896696e+6	-0.02989921e+6	-0.09227977e+4	-0.01233930e+5
a_7	0.09623395e+02	0.06108218e+02	-0.09553959e+1	0.06862817e+02	0.05980528e+02	0.03189166e+02

O domínio é discretizado em hexaedros, que são elementos que apresentam boa capacidade de economizar esforço computacional e melhor acuracidade nos resultados, pois as faces dos elementos são perpendiculares ao fluxo do fluido diminuindo erros. Três malhas são utilizadas para analisar os efeitos do escoamento e também no campo térmico. A primeira formada somente pela câmara (Fig. 4.3) contendo 715200 volumes, e duas outras onde a região de exaustão de gases foi modelada.

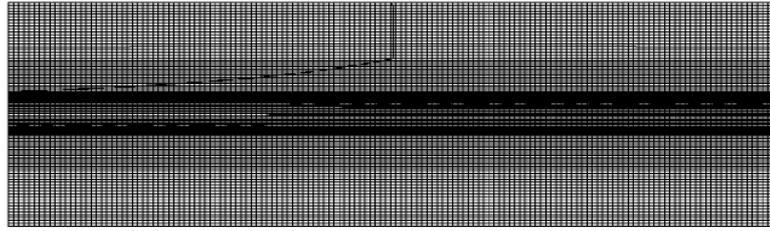


Figura 4.3 - Malha discretizando somente a câmara de combustão.

A Fig. 4.4 apresenta a câmara com extensão de 600 [mm] na região de exaustão, contendo um modelo geométrico onde testou-se malha de 771744 e 253428 volumes; E a Fig. 4.5 uma extensão de 1200 mm, totalizando 264264 volumes. No trabalho de Magel, 1996a, a câmara também é modelada com uma extensão, entretanto somente com 300 [mm] de comprimento. Observa-se o efeito da condição de contorno de temperatura local no cálculo do campo de temperaturas, provavelmente devido ao cálculo da radiação, além do efeito causado pelo empuxo, que é calculado também. Todas as soluções deste caso foram desenvolvidas com esquema de interpolação do termo advectivo de segunda ordem High Resolution.

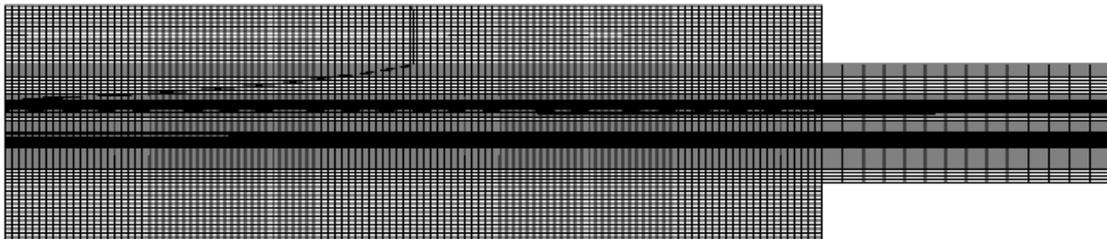


Figura 4.4 - Malha discretizando a câmara de combustão e 600 mm da câmara de exaustão.

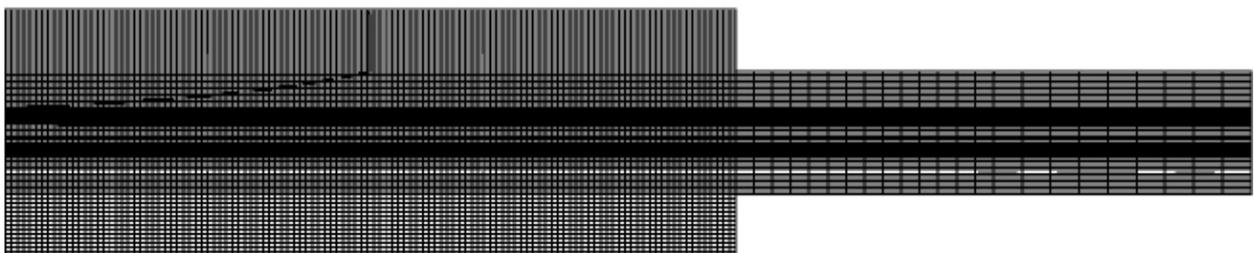


Figura 4.5 - Malha discretizando a câmara de combustão e 1200 mm da câmara de exaustão.

A Seção 4.2.7 apresenta a análise de independência da malha realizada, através da Fig. 4.33. Entretanto nesta primeira seção a malha de 715200 volumes, Fig. 4.3, é utilizada para inicialmente mostrar a realidade do consumo de tempo computacional de sistemas similares em aplicações industriais.

O acoplamento pressão-velocidade implementado em todos os casos do trabalho é o método SIMPLE com esquema de interpolação Rie-Chow [Raw, 1994; ANSYS-CFX, 2006] para localização da solução dos campos de pressão e velocidade nos mesmos nós da malha.

4.2. RESULTADOS

4.2.1. ANÁLISE DE PONTO DE RECOLAMENTO

O ponto de recolamento deve ser observado, neste tipo de câmara, pois como apresentado pela Fig. 4.1, espera-se uma recirculação dentro da câmara, Fig. 4.6. É verificado que a escolha do modelo de turbulência influencia a solução.

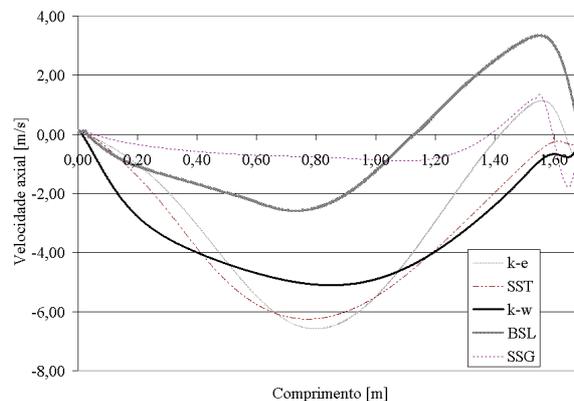


Figura 4.6 - Gráfico de velocidades próximo a parede da câmara.

Analisar as diferenças do ponto entre os diferentes modelos auxilia a visualizar diferenças na mistura da corrente fluida que é relacionada com a reação. Os modelos SST e $k - \omega$ apresentaram comportamento semelhante, e improvável de ocorrer no fenômeno real, não apresentando ponto de recolamento. O parâmetro utilizado na distância adimensional à parede é o de $y^+ < 300$, entretanto em todas as malhas utilizadas no trabalho verificou-se $y^+ < 80$. Portanto considera-se a malha próxima a parede de boa qualidade para a análise do recolamento.

Os modelos $k - \varepsilon$ e SSG mostram um recolamento bem definido e próximo do fim da câmara como apresentado por Silva C.V., 2005, e comentado por Garreton e Simonin, 1995. As soluções da literatura definem o $k - \varepsilon$ e o SSG como bons modelos para solução do escoamento nesta câmara. A solução do modelo BSL é interessante também, pois mostra um ponto bem definido da mesma grandeza das soluções por $k - \varepsilon$ e SSG, mas com variação inversa na velocidade ao longo do comprimento da câmara ao contrário, do que o modelo $k - \varepsilon$ apresenta.

4.2.2. PERFIL DE DAMKOHLER

Para uma análise característica do modelo de turbulência a ser utilizado é também apresentado o perfil do número de Damkohler calculado para cada modelo. Isto mostra como mudam as magnitudes dos tempos de mistura nas diferentes regiões da câmara para cada modelo.

Observando o fenômeno espera-se que na região de expansão dos jatos ocorra a maior mistura entre os componentes, pois ocorrerá um turbilhonamento intenso, reduzindo o tempo de mistura. A Fig. 4.7 mostra este fenômeno representado pelo aumento do Da ao longo da câmara, com seu pico próximo a saída da câmara.

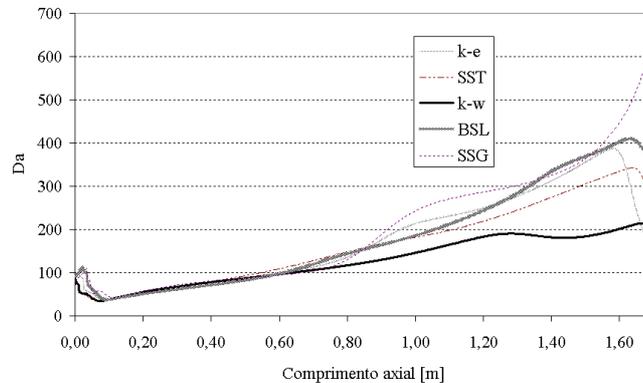


Figura 4.7 – Perfil axial do número de Damkohler.

Após a região de cisalhamento na saída dos bocais observa-se uma diminuição do Da devido à expansão ainda sem mistura nas duas correntes de fluido, dada a velocidade ainda elevada do jato externo do bocal anular. Este decréscimo no perfil de Damkohler na região próxima ao queimador é fisicamente consistente, visto que próximo ao bocal a cinética química é mais influente no cálculo da taxa de reação que a mistura mecânica dos reagentes. Observa-se um comportamento similar entre os modelos $k-\varepsilon$, SST e BSL, com valores próximos, entretanto mostrando diferentes comportamentos na zona final onde ocorre forte turbilhonamento, próximo a cota 1300 mm. O baixo valor qualitativo relativo aos demais modelos do resultado obtido pelo $k-\omega$, mostra que se podem prever menores taxas de reação ao longo da câmara ao implementá-lo. O resultado obtido pelo modelo SSG é razoável se comparado com os três primeiros modelos analisados, mas a magnitude do Damkohler é questionável, acredita-se que o efeito de pressão da condição de contorno de saída da câmara possa ter interferido na solução, mas esta é uma característica deste modelo, na solução deste caso.

4.2.3. TEMPO COMPUTACIONAL

Uma comparação é realizada para verificar o consumo de tempo computacional de cada modelo de turbulência na solução, Fig. 4.8, já envolvendo reação química, mas sem o cálculo dos termos referentes a radiação e empuxo. Isto é um quesito a ser ponderado no momento da escolha da modelagem a ser implementada numa câmara similar. O computador utilizado na solução do problema é um processador Intel® P4HT 2.4GHz, com memória RAM de 2Gb. O modelo SSG apresentou maior consumo computacional, isto se deve ao cálculo das equações adicionais de transporte das tensões de Reynolds, característica do modelo. Dado o tempo consumido, o perfil de recolamento e Damkohler observado, os modelos SST e $k - \varepsilon$ mostram comportamentos similares.

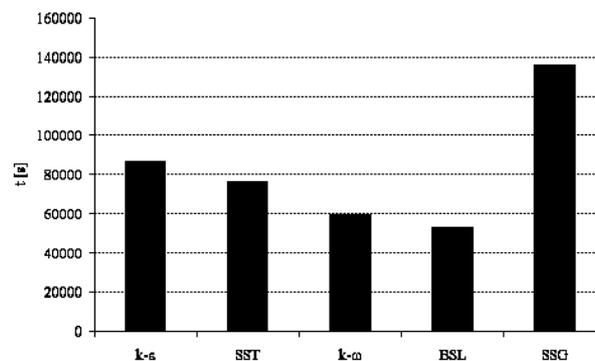


Figura 4.8 - Tempo consumido por modelo na solução da malha de 715200 volumes.

O modelo BSL apresentou o menor consumo de tempo. Acredita-se que seja devido ao artifício em que programa ora um modelo $k - \omega$ ora um modelo $k - \varepsilon$, conforme a avaliação da zona de cisalhamento ou camada limite.

A bibliografia sobre o caso apresenta bons resultados com os modelos $k - \varepsilon$ e modelos baseados no modelo básico $k - \omega$, entretanto o trabalho desenvolve ao longo da análise dos resultados uma opinião específica para o caso desta câmara cilíndrica. Observando apenas os gráficos de Damkohler, ponto de recolamento e consumo de tempo, pode-se definir que o SSG não é um modelo robusto para o caso.

4.2.4. RESULTADOS SEM CONSIDERAR RADIAÇÃO

Os resultados obtidos para a câmara sem a aplicação dos modelos de radiação e sem a força de corpo gerada pelo cálculo do empuxo são pontos de partida para a avaliação de uma boa estratégia de modelagem, pois os resultados apresentados pelos diferentes modelos de turbulência irão aproximar o comportamento do Damkohler dentro da câmara no cálculo da taxa de reação. São avaliadas as principais variáveis de interesse na análise de uma câmara de combustão, fração mássica de O_2 , CO , CO_2 , CH_4 e as temperaturas. Perfis radiais e axiais são apresentados e discutidos.

A câmara simulada implementando o modelo de turbulência $k - \varepsilon$ apresenta resultado razoável comparando com os valores experimentais no eixo axial, Fig.4.9. Nota-se um atraso na reação, ocorrendo somente ao fim da câmara. Provavelmente num processo simulado por este modelo, e depois acompanhado em campo experimentalmente observando somente a temperatura de saída dos gases, obter-se-ia boa concordância. Entretanto numa caldeira, por exemplo, espera-se um campo bem definido para avaliar as possíveis trocas internas.

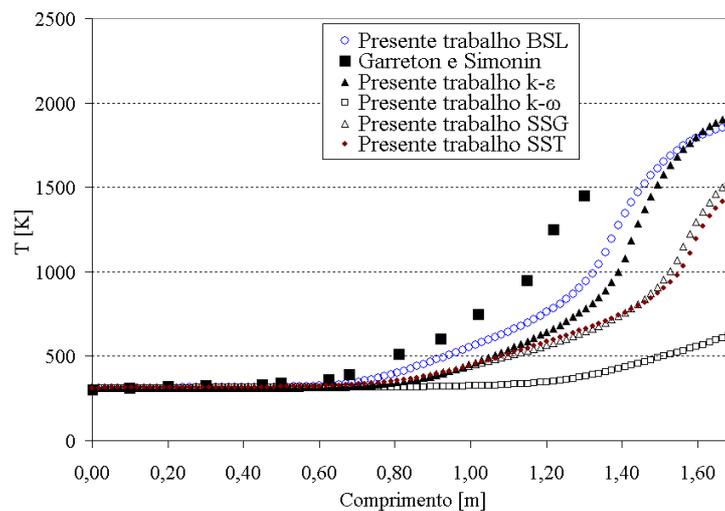


Figura 4.9 - Perfil axial de temperatura.

Ao longo do comprimento da câmara nas cotas 312, 912 e 1312 mm os perfis concordam com os dados experimentais mostrando diferenças de até 100 K. Os modelos normalmente utilizados em literatura são $k - \varepsilon$ e o $k - \omega$, entretanto o $k - \omega$ apresentou fraca aproximação dos resultados, mesmo ocorrendo a reação, o que se previa ao observar o perfil de Damkohler calculado, Fig. 4.10. De qualquer forma observa-se que a tendência de todos os modelos é a

mesma, conforme a evolução do escoamento ao longo do comprimento da câmara se visualiza diferenças maiores entre os modelos.

Mesmo com uma estimativa elevada do Damkohler pelo SSG em relação aos demais modelos, o perfil de temperaturas não reflete isso, mostrando que se pode ter chego num limite de tempo de mistura que acaba por extinguir a reação pontualmente.

A Fig. 4.10 mostra que o modelo SSG apresenta um bom comportamento na previsão do campo de temperaturas logo após a saída do bocal ($z=312$ [mm]), mas somente a análise os componentes da reação que também pode aferir isto.

Próximo a saída da câmara observa-se que ocorre uma diferença considerável entre os perfis, Fig. 4.10 (a) e Fig. 4.10 (b), refletindo já as diferenças entre tempo de mistura e comportamento da reação a montante do escoamento que determinam quais componentes reagentes (CH_4 , CO , O_2) da mistura chegam até esta zona da câmara. Isto é mais um indício de como a escolha do modelo deve comprometer-se com a física do problema, podendo fazer uma boa estimativa do resultado de forma geral pela temperatura de saída da câmara ou pelos perfis iniciais. O modelo BSL apresenta na Fig.4.10 (c) uma solução que chega mais próximo da temperatura na linha de centro da câmara.

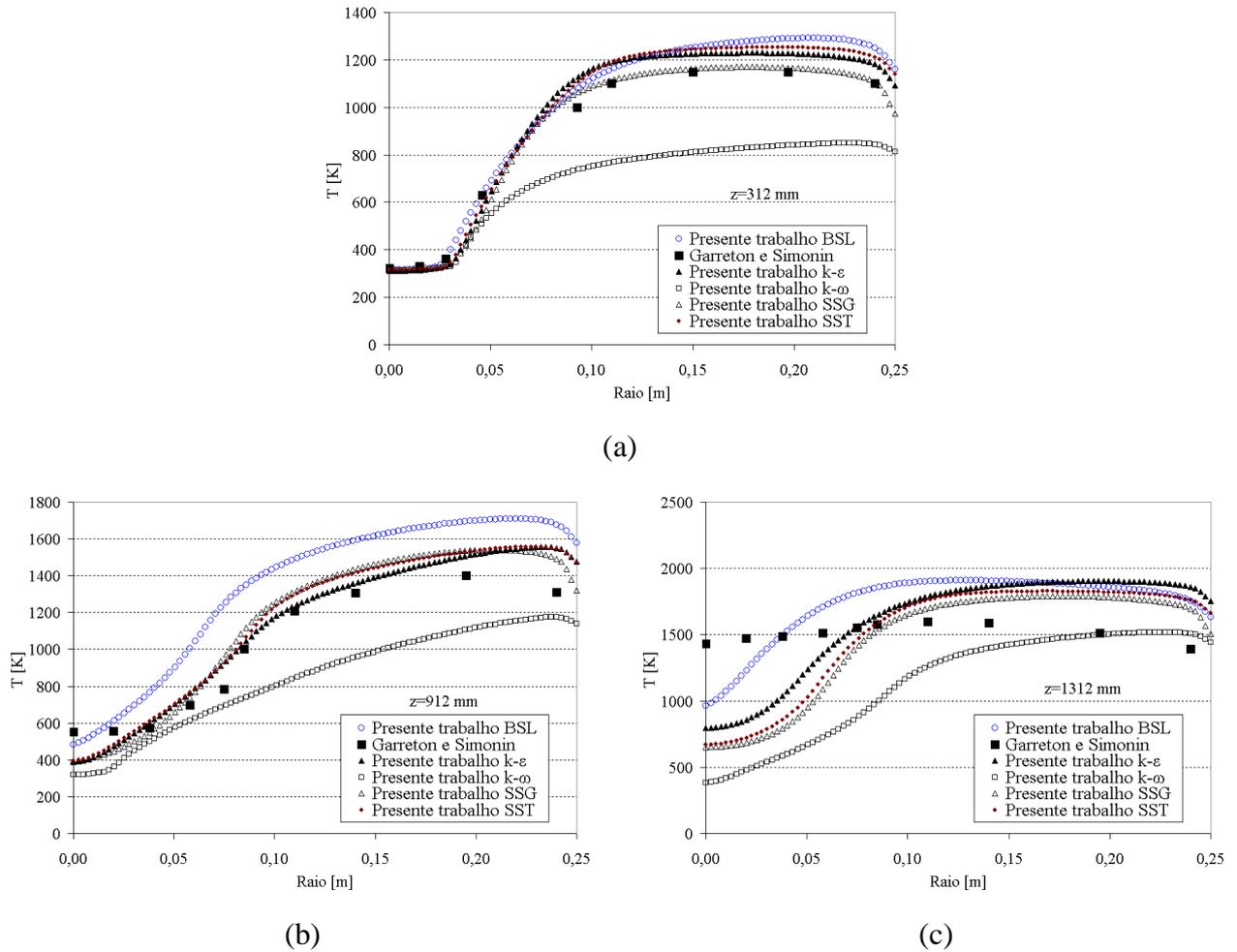


Figura 4.10 - Perfil radial na cota (a)312 mm, (b) 912 mm e (c) 1312 mm.

O monóxido de carbono é um componente que pode representar razoavelmente o comportamento da reação, pois é um produto intermediário de reação e um indicador prático experimental de combustão completa ou incompleta. Como esperado, o modelo $k-\omega$ mostra baixo desempenho, com valores inferiores ao experimental, Fig. 4.11.

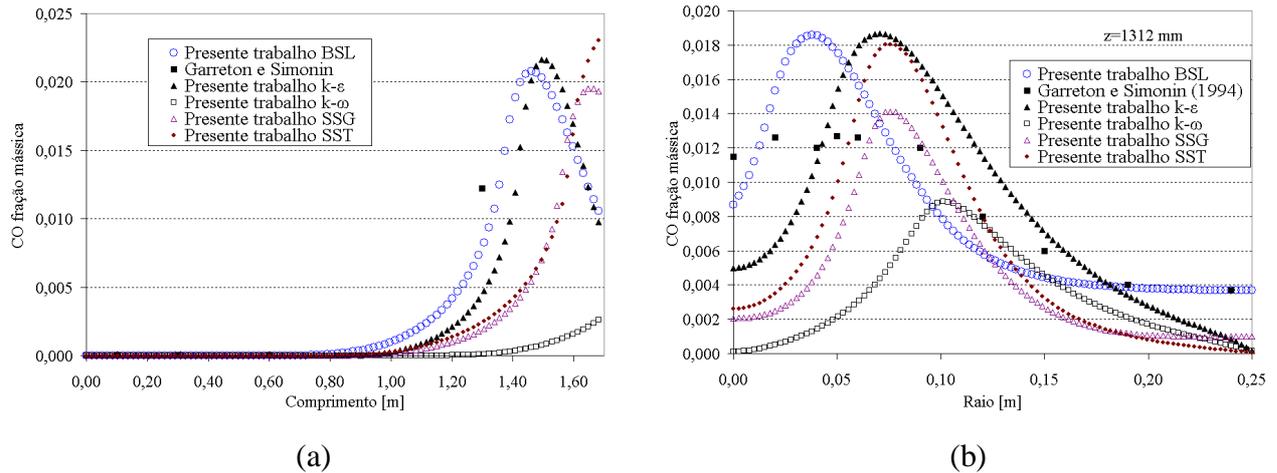


Figura 4.11 - Perfil da concentração de monóxido de carbono (a) axial ; (b) na cota 1312 mm.

A bibliografia não apresenta tantos pontos de análise dos modelos, mas observa-se um bom resultado dos modelos $k - \varepsilon$, SST e BSL. O pico da solução destes três modelos, Fig. 4.11 (b), é devido a uma estimativa de valor acima do real da tensão cisalhante devido aos jatos concêntricos, gerando um valor maior do tempo de mistura.

O perfil de fração mássica do gás metano ao longo da câmara, Fig. 4.12, mostra seu consumo e é um indicador do comportamento das reações dentro da câmara.

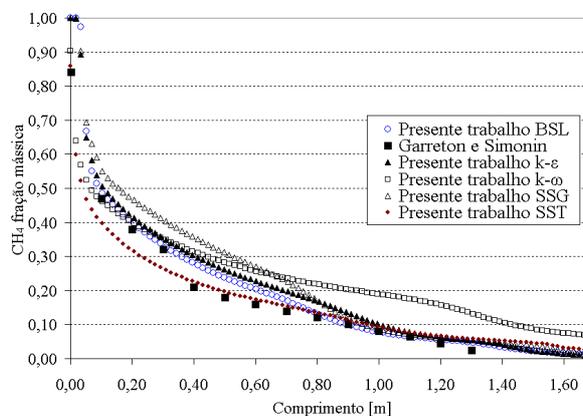


Figura 4.12 - Perfil da concentração de gás metano axial da câmara.

Conforme observado na Fig. 4.12 o modelo SST foi o que mostrou o melhor desempenho na previsão do consumo do metano com as menores diferenças do perfil experimental mesmo antes da metade do comprimento da câmara, onde seriam pontos de análise práticos para verificação da combustão.

O dióxido de carbono representa a combustão bem realizada e mostra o comportamento dos modelos na solução das reações ao longo da câmara, Os perfis apresentados na Fig. 4.13

mostram que mesmo com a boa previsão do campo de temperatura inicial, os modelos ainda deixam mais combustível e monóxido chegar ao fim da câmara do que o caso real.

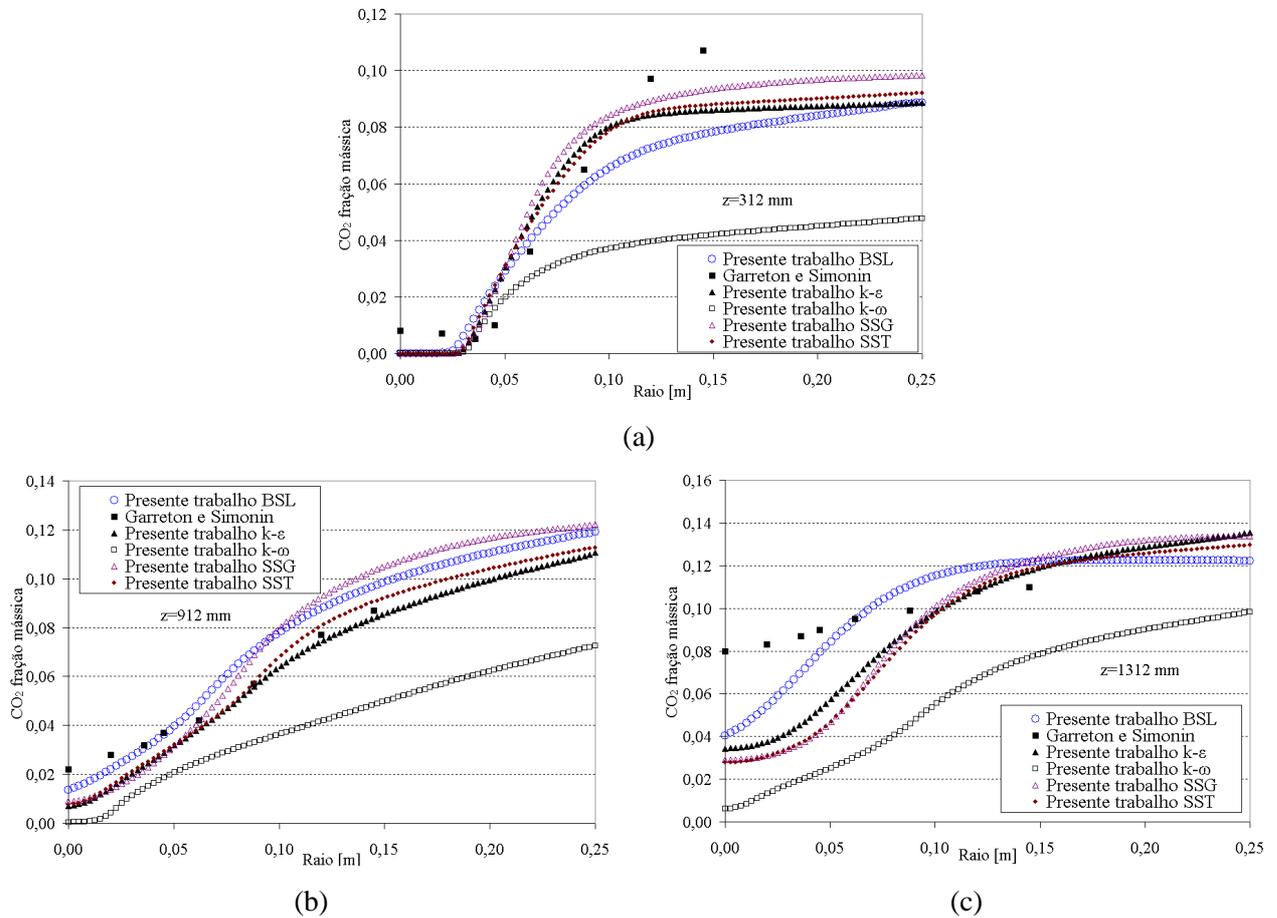


Figura 4.13 - Perfil da concentração de CO₂ na cota (a) 312 mm, (b) 912 mm e (c) 1312 mm.

Como visto na análise do perfil de monóxido de carbono onde havia um pico nos perfis, o perfil de dióxido de carbono, próximo a saída da câmara, evidencia um valor inferior calculado pelos diferentes modelos em relação ao experimental. Pode-se concluir a partir destas análises que nenhum dos modelos conseguiu resolver bem a mistura entre os jatos, especialmente na camada de contato entre eles, como mostram as diferenças do perfil axial, Fig. 4.14.

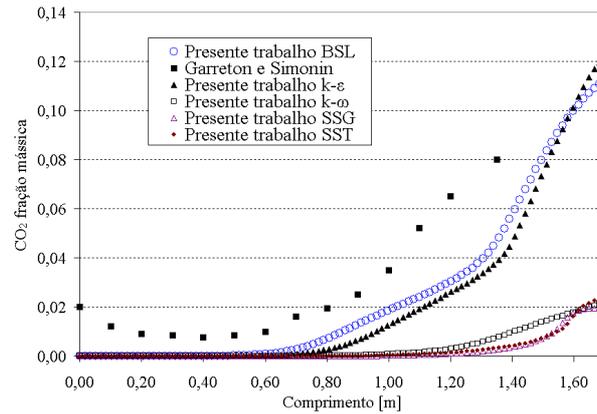


Figura 4.14 - Perfil da concentração de CO_2 , axial da câmara.

O oxigênio tem mesmo papel de indicador como o metano, pois é o oxidante, por sua fração mássica podem-se obter informações do comportamento das reações na câmara. A Fig. 4.15 mostra que o modelo $k-\varepsilon$ e BSL obtiveram uma boa solução do campo, entretanto o modelo SST apresentou baixo desempenho, desde o início da câmara, em desacordo com as análises anteriores.

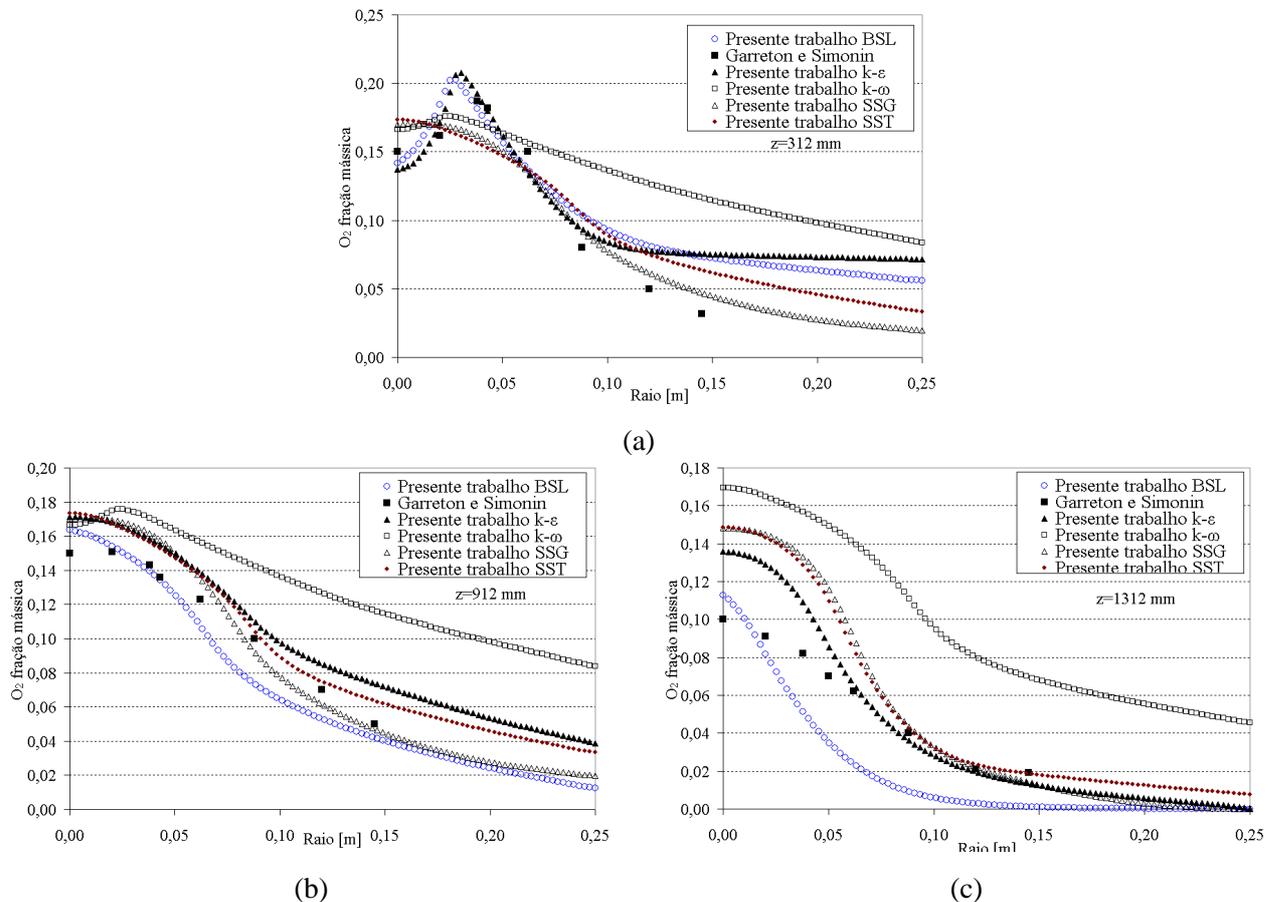


Figura 4.15 - Perfil da concentração de O_2 na cota (a) 312 mm, (b) 912 mm e (c) 1312 mm.

A Fig. 4.15 mostra a falhas dos modelos SST, SSG e $k-\omega$ transportando mais O_2 para o final da câmara.

A interpretação do perfil de concentração de oxigênio ao longo do comprimento da câmara, Fig. 4.16, pode ser perigosa numa análise de câmara de combustão. Por exemplo, se sugerissem modificações na câmara baseadas num conteúdo de oxigênio como o calculado pelos modelos SSG, SST e $k-\omega$. O teor de oxigênio é medido na saída de câmaras e é conhecido no meio prático como parâmetro para regulagem de queimadores e certificação de fornalhas.

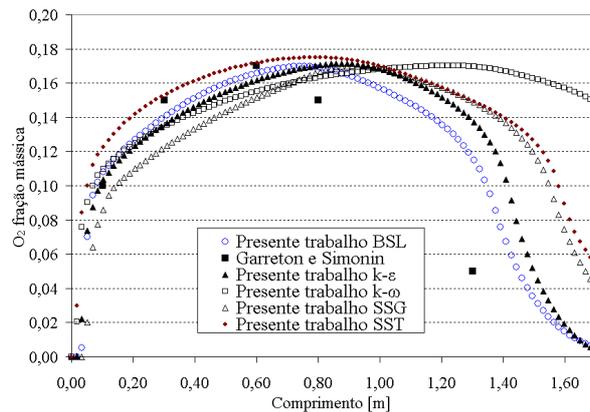


Figura 4.16 - Perfil de fração mássica axial de O_2 ao longo da câmara.

4.2.5. RESULTADOS CONSIDERANDO RADIAÇÃO

Observe-se que o efeito do empuxo pode ser significativo, e que mesmo com todo o cuidado no aparato experimental, a zona de exaustão não mais considerada câmara pode exercer influência no fenômeno por ser um volume onde se encontram gases com temperaturas mais baixas. Este volume enxerga a câmara e ocorre uma troca radiativa considerável.

Para avaliação dos modelos de radiação já citados no Capítulo 3, se utiliza da mesma câmara e malha anteriormente utilizada adicionando o termo radiativo alternadamente pelos 3 modelos, os modelos de turbulência utilizados são o SST e o $k-\varepsilon$. Esta escolha foi devida a análise dos resultados anteriores e as análises de literatura.

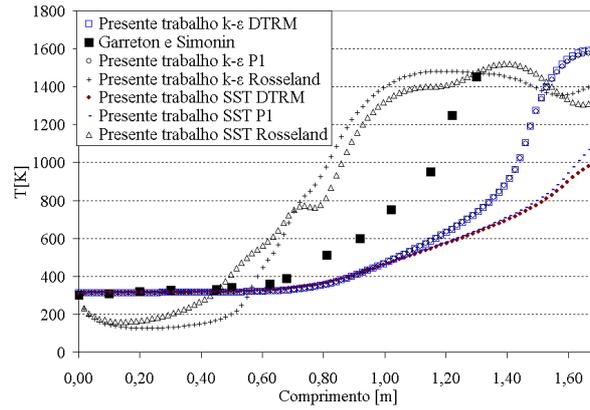
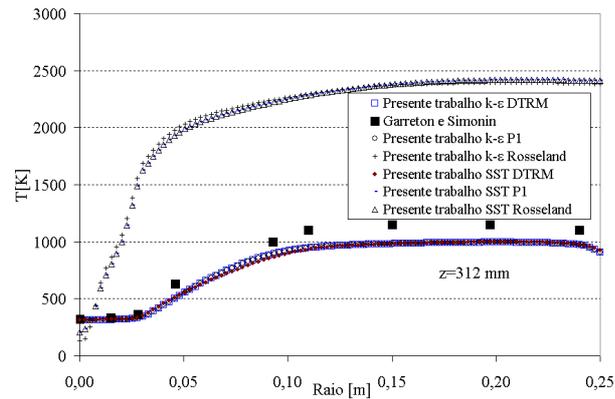
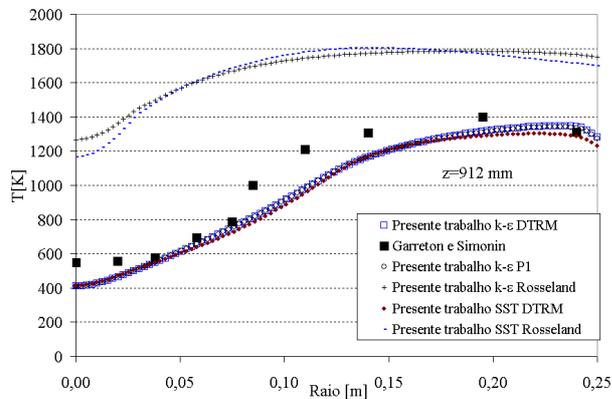


Figura 4.17 - Perfil axial da câmara resultado dos diferentes modelos.

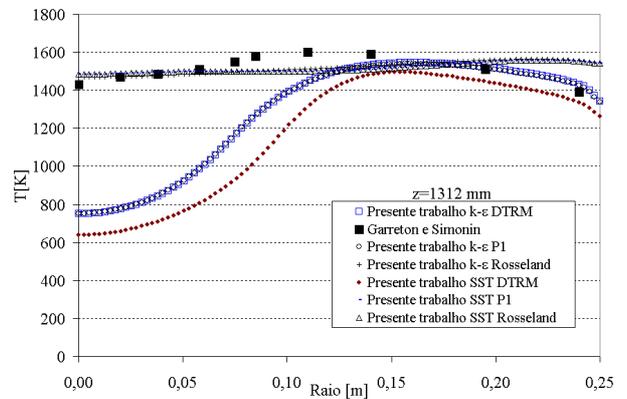
As Figs. 4.17 a 4.18 mostram claramente que o modelo de Rosseland não resolve bem o problema, mesmo tendo sido resolvido com mesmo critério de convergência dos demais, $1e-6$. Graficamente não se notam grandes diferenças entre as soluções P1 e DTRM, mas são valores diferentes, principalmente ao final da câmara.



(a)



(b)



(c)

Figura 4.18 - Perfil radial de temperatura na cota (a) 312 mm, (b) 912 mm e (c) 1312 mm.

A grande diferença dos perfis calculados em relação ao experimental na saída da câmara provavelmente advém da condição de contorno na saída da câmara que neste caso é exatamente em 1700 mm a partir da entrada.

Sendo o monóxido de carbono também um reagente na reação total de oxidação do metano adotada, se verifica uma variação em relação aos perfis que não contabilizavam o termo radiativo na solução da transferência de energia.

A Fig. 4.19 mostra o erro do modelo Rosseland, devido às altas temperaturas iniciais calculadas por este modelo, como visto nos perfis de temperatura. O que aumentou a taxa de reação inicial e acabou oxidando prematuramente o CO.

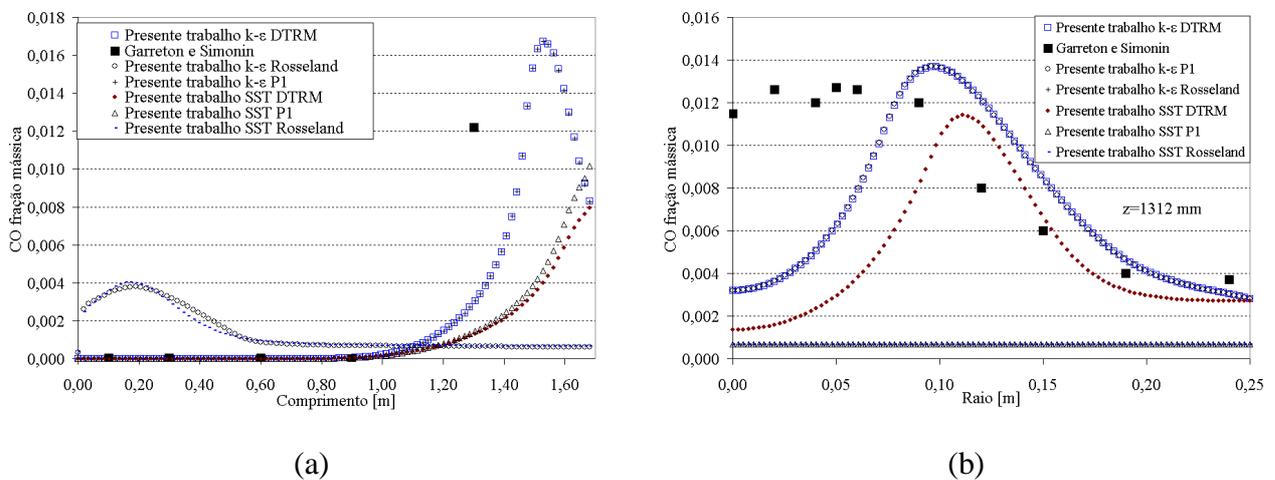


Figura 4.19 - Perfil (a) axial; (b) na cota 1312 mm, da concentração de monóxido de carbono.

Como observada a diferença dos perfis de temperatura na saída da câmara, o monóxido de carbono desloca seu pico na direção da parede da câmara estando relacionada a temperatura mais baixa calculada na posição de saída da câmara, Fig. 4.19 (b), que é indício da interferência da condição de contorno no cálculo.

O perfil da concentração de gás metano no eixo da câmara, Fig. 4.20, não se altera praticamente, principalmente porque é um reagente do primeiro passo ainda não afetado por temperaturas elevadas, como as grandezas observadas ao fim da câmara.

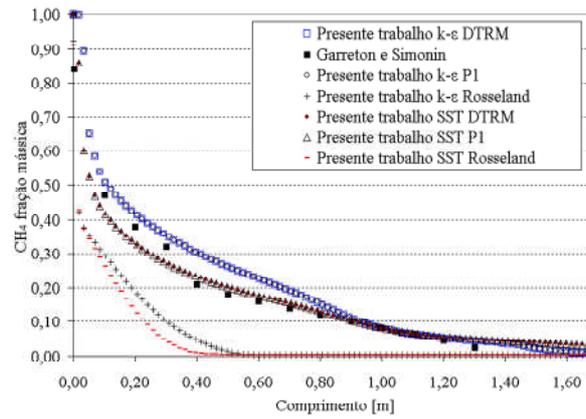
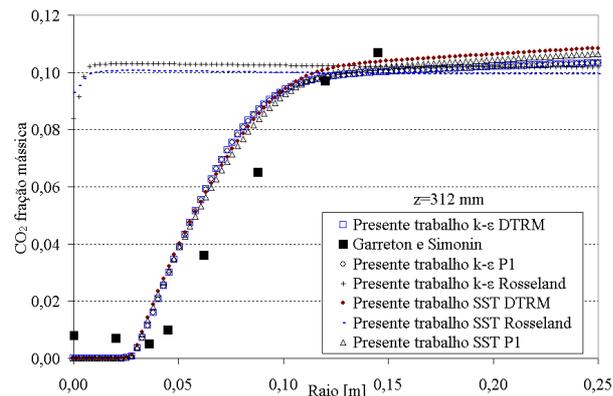
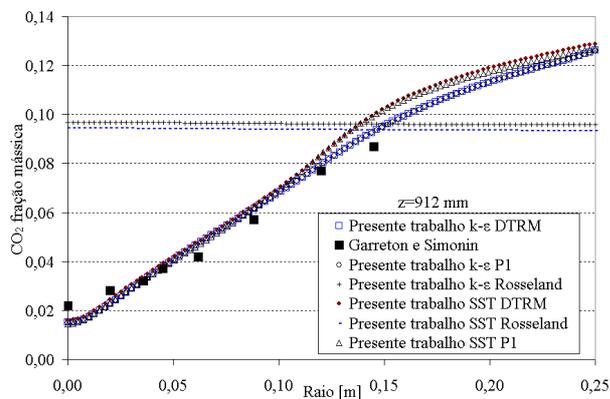


Figura 4.20 - Perfil da concentração de gás metano axial.

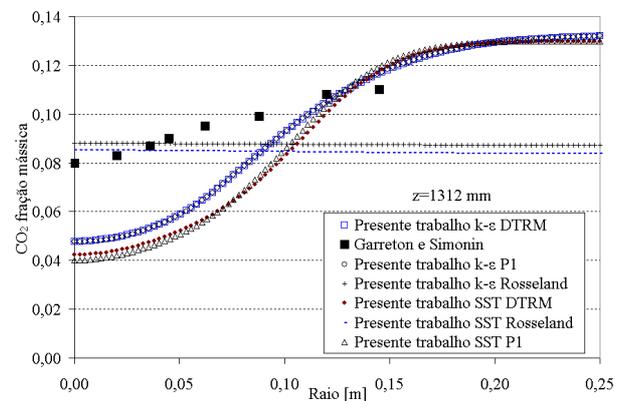
Os perfis de dióxido de carbono melhoraram a concordância com os valores experimentais, principalmente na entrada da câmara, próximo ao bocal do queimador, Fig. 4.21 e próximo ao centro da câmara.



(a)



(b)



(c)

Figura 4.21 - Perfil da concentração de CO_2 na cota (a) 312 mm, (b) 912 mm e (c) 1312mm.

A Fig. 4.21 mostra que existe uma diferença do valor calculado em relação ao valor real experimental. Comparando-se os valores calculados sem transferência radiativa verifica-se melhora na previsão do campo.

Mesmo com as melhoras apresentadas pelo cálculo do termo radiativo o perfil axial ainda mostra-se diferente do experimental, com diferenças da ordem de 5% no início da câmara até 50% ao final da câmara de acordo com o modelo, Fig. 4.22.

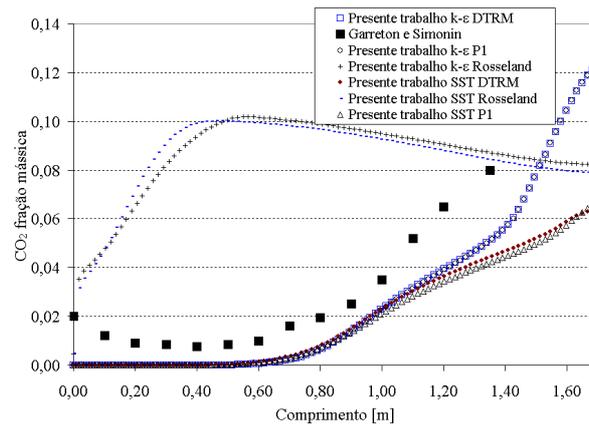


Figura 4.22 – Perfil de concentração de CO_2 axial da câmara.

Os perfis de fração mássica do oxigênio mostram-se melhor desenvolvidos no caso calculando a radiação. Deve-se a isso o fato de o campo, de temperaturas, estar mais bem definido em relação ao caso calculado sem o termo radiativo. Assim como no caso sem radiação o modelo calculado utilizando o SST como modelo de turbulência mostrou melhores resultados nas cotas próximas ao bocal, Fig. 4.23, isto se deve ao fato do modelo estimar mais detalhadamente o cálculo do transporte do tensor turbulento, sem adicionar equações ao sistema, melhorando a aproximação dos campos de energia cinética e dissipação turbulenta.

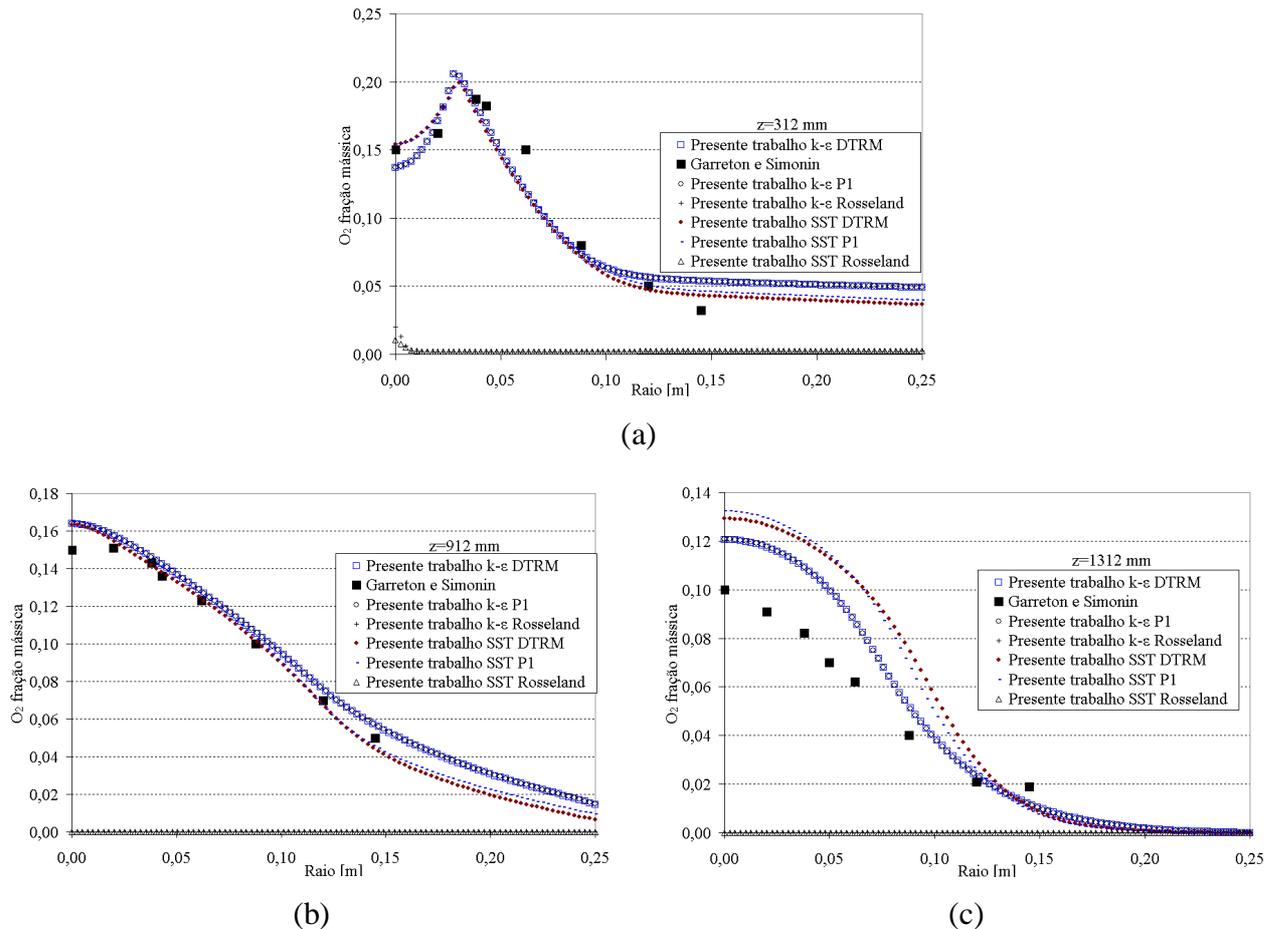


Figura 4.23 - Perfil de concentração de O_2 na cota (a) 312 mm, (b) 912 mm e (c) 1312 mm.

Como já visto na seção anterior, nos resultados calculados sem radiação, a cota 1312 mm, é a que mostra os piores resultados, apresentando forte interação com a condição de contorno de saída. O modelo $k - \varepsilon$ mostrou um resultado mais aproximado que o SST, isto devido ao fato de no fim da câmara as estruturas serem maiores e uma tensão cisalhante entre os jatos menor do que nas cotas próximas ao bocal de entrada.

A Fig. 4.24 mostra que o modelo $k - \varepsilon$ foi o que melhor aproximou os resultados no final da câmara e o modelo SST apresentou melhores resultados na região de entrada da câmara.

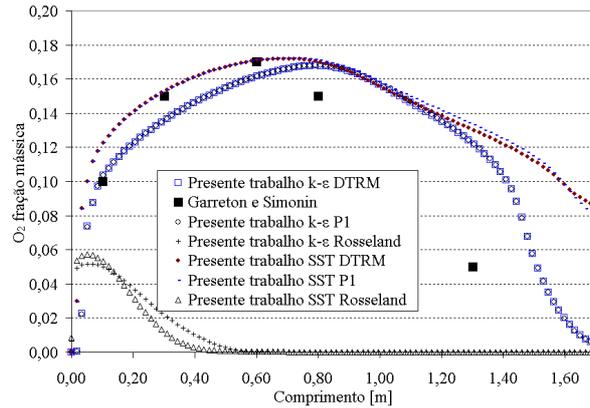


Figura 4.24 - Perfil de concentração de O₂ axial da câmara.

Um modelo misto de turbulência pode ser uma boa solução, visto que a implementação do cálculo da troca radiativa não foi suficiente para melhorar os campos de temperatura e fração mássica. Observando a teoria dos modelos de turbulência apresentados no Capítulo 3 o modelo BSL acoplado ao cálculo da troca radiativa é uma solução possível e que trará melhores resultados.

A avaliação dos modelos de radiação mostra que os modelos P1 e DTRM chegam a resultados muito próximos, entretanto o modelo P1 tem um consumo em média 2% maior no tempo e mostrou a maior diferença em relação ao experimental nos perfis analisados. Soma-se a avaliação favorável do modelo DTRM o fato de poder-se determinar um maior ou menor número de direções de raios a serem calculadas, melhorando o resultado com refino direcional ou economizando em casos mais simples.

4.2.6. RESULTADOS CONSIDERANDO RADIAÇÃO E EMPUXO

Como discutido na seção anterior deve-se analisar a solução de um modelo turbulento misto na tentativa de melhor aproximar os pontos experimentais. A escolha de modelo misto é o BSL, já apresentado no Capítulo 3, entretanto não é bem clara a capacidade deste modelo na solução das tensões turbulentas geradas pelo cisalhamento entre os dois jatos, visto que a função de combinação do modelo baseia-se numa distância à parede. É utilizado o modelo DTRM para o cálculo da troca radiativa, nesta seção de resultados adiciona-se também a força de corpo gerada pelo empuxo.

Os perfis de temperatura mostram uma melhora na aproximação, mas ainda nota-se um atraso para a totalização da reação, visto que o modelo alcança a mesma ordem de grandeza das temperaturas experimentais, entretanto somente na saída da câmara, Fig. 4.25. Analisando

globalmente a câmara, pode-se gerar uma opinião positiva do modelo, pois o balanço térmico fecha com as temperaturas de entrada e saída, e também experimentalmente se teria um resultado válido, pois a temperatura da exaustão da câmara experimental seria a mesma da câmara simulada.

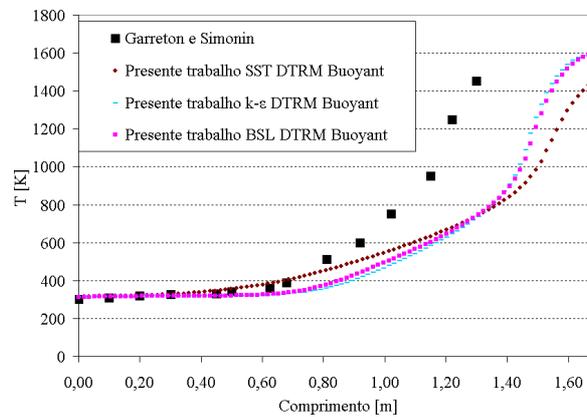


Figura 4.25 - Perfil axial de temperatura resultado do modelo.

A Fig. 4.26 mostra claramente que o modelo de turbulência BSL não trouxe uma melhora considerável nos resultados. Ainda deixando ao modelo SST a melhor semelhança com os resultados experimentais. O bom desempenho do SST próximo a medida 0,125 mm do raio nas cotas 312 mm e 912 mm é devido ao bom desempenho do modelo no cálculo de uma estimativa do transporte das tensões de Reynolds, mesmo sendo um modelo de 2 equações.

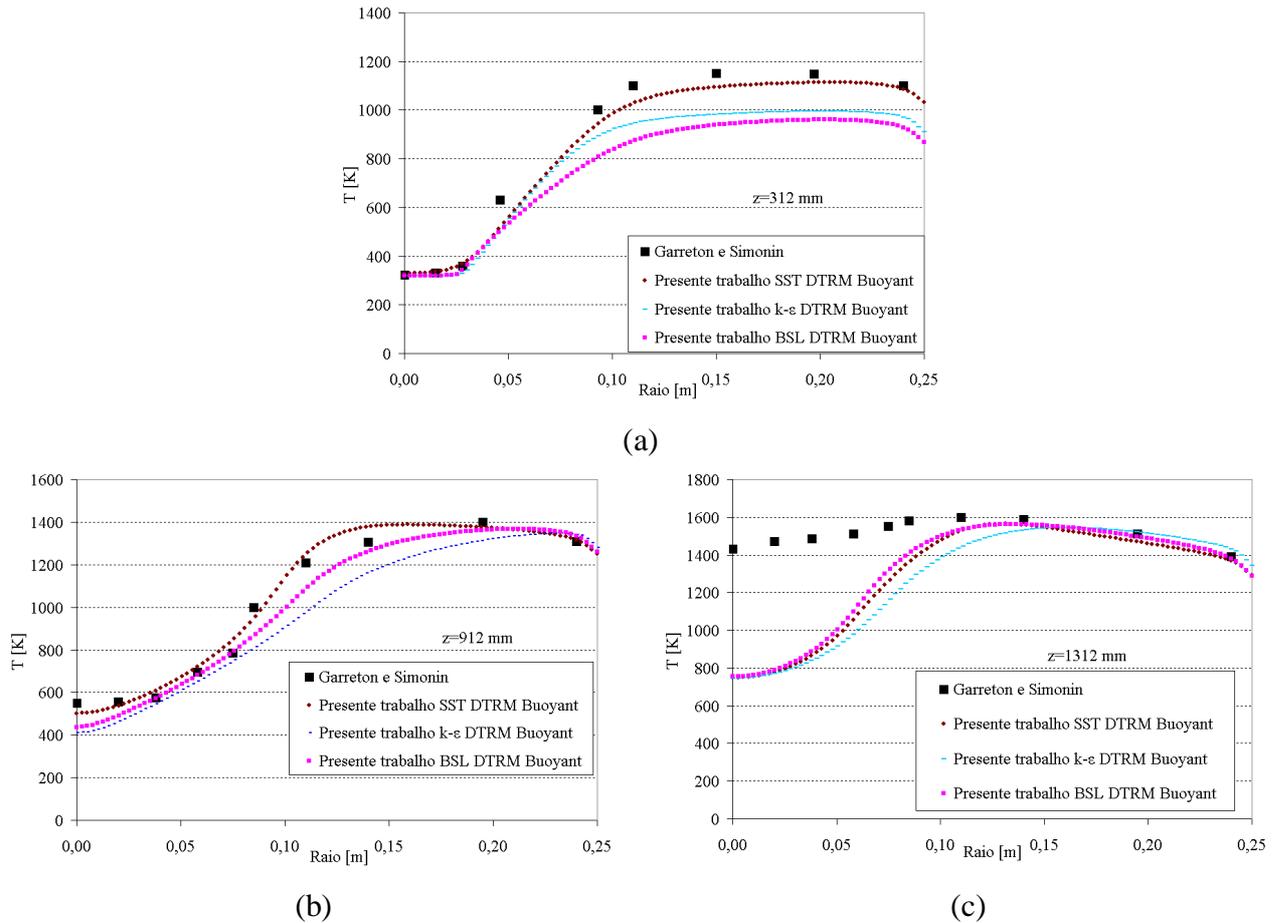


Figura 4.26 - Perfil radial de temperatura na cota (a) 312 mm (b) 912 mm e (c) 1312 mm.

A Fig. 4.26 (c) mostra que o modelo SST aproximou melhor os resultados experimentais na dimensão 0.125 m no raio que é uma projeção da pluma gerada pela camada cisalhante entre as correntes de gases advindas dos bocais anulares.

Novamente próximo a saída da câmara se observa uma maior diferença no perfil de temperaturas. Com os bons resultados apresentados na seção anterior, onde não se calculou o termo de empuxo, e pelos perfis de temperatura agora calculados, verifica-se que a causa da diferença é a condição de contorno térmica na saída da câmara.

De modo geral, observando os perfis de temperatura e fração mássica de monóxido de carbono, nota-se uma pequena diferença da modelagem utilizando o modelo de turbulência BSL e o modelo $k-\epsilon$, Fig. 4.27. Esta semelhança provavelmente venha do fato da função de combinação, que modifica o modelo, não ser bem empregada no caso, principalmente por tratar-se de camadas cisalhantes.

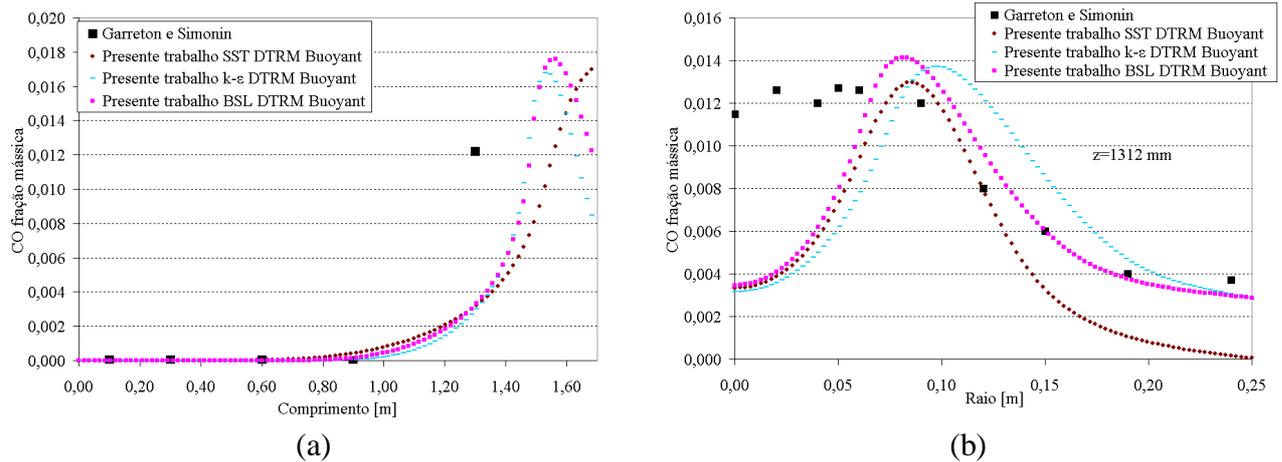


Figura 4.27 - Perfil (a) axial e (b) cota 1312 mm da concentração de monóxido de carbono.

O modelo BSL apresentou boa aproximação, próximo a parede e antes da zona que é afetada pela saída da câmara onde, assim como no caso do perfil de temperaturas espera-se efeito similar no monóxido de carbono que tem sua reação ligada ao campo de temperaturas por ser um composto intermediário da combustão.

A modelagem utilizando o modelo BSL mostrou praticamente os mesmos valores que o modelo $k - \varepsilon$ analisando as frações mássicas de metano, mas ainda melhoram um pouco os resultados próximos a entrada, Fig. 4.28.

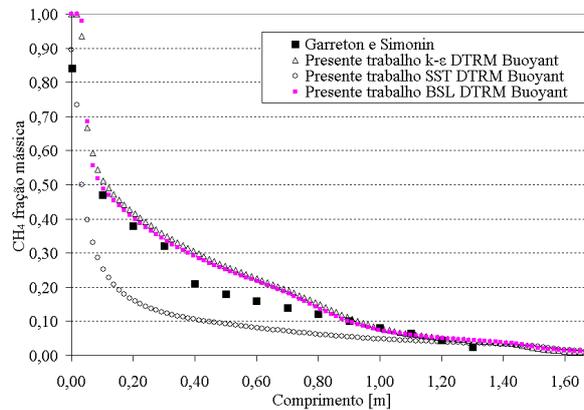


Figura 4.28 - Perfil de concentração de gás metano axial da câmara.

Em contrapartida ao aumento do monóxido de carbono, o modelo utilizando o BSL mostra menores valores de fração mássica de CO₂ próximo ao bocal do queimador, Fig. 4.29. Este fato pode explicar porque nas cotas superiores (912 mm, Fig. 3.47, e 1312 mm, o modelo BSL apresentou valores maiores que o esperado, Fig. 4.29.

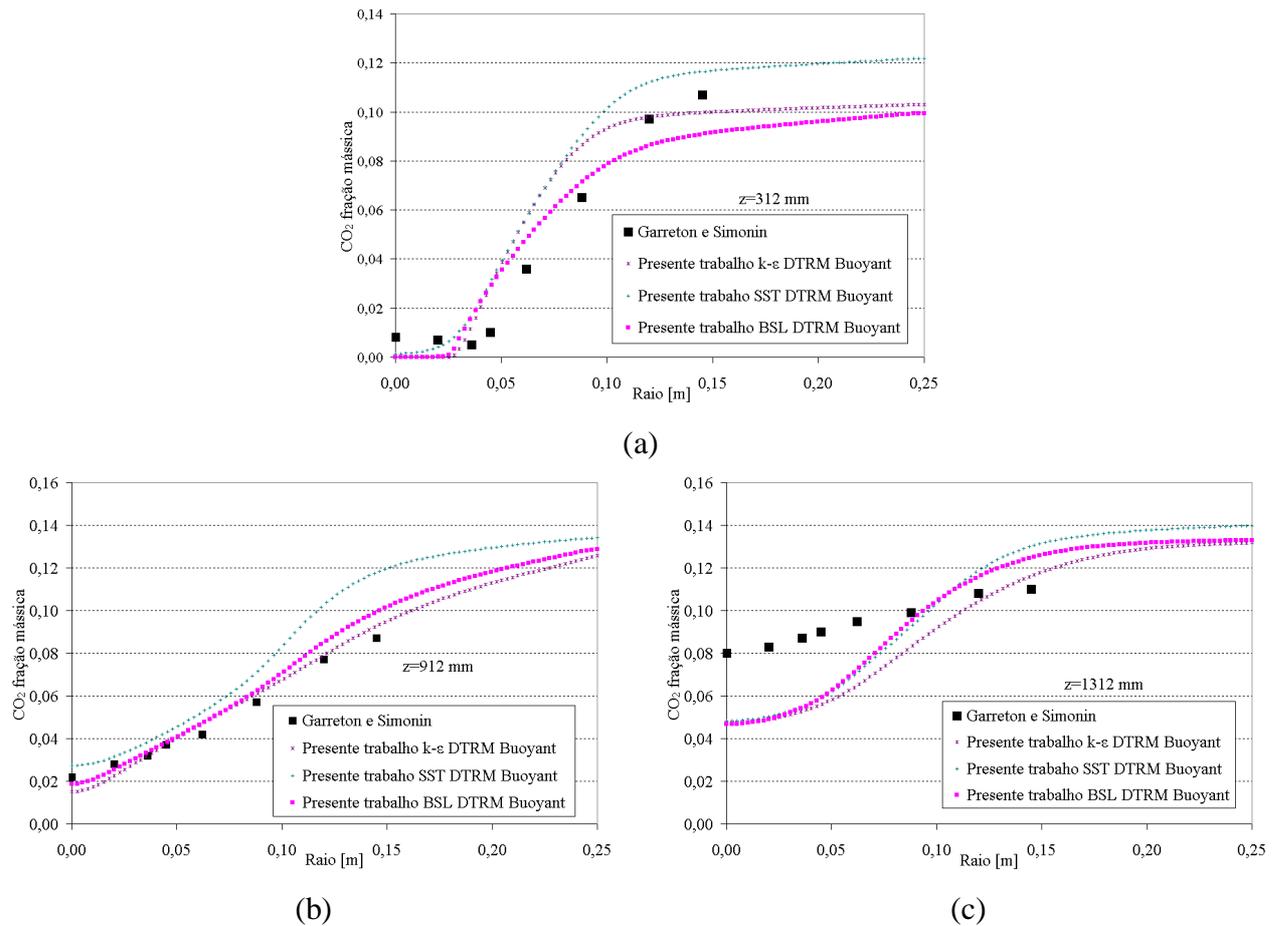


Figura 4.29 - Perfil de concentração de CO₂ nas cotas (a) 312 mm; (b) 912 mm e (c) 1312 mm.

Próximo a saída observou-se valores de CO₂ muito próximos entre o BSL e os modelos SST e $k - \varepsilon$, mostrando apenas uma forma diferenciada. Esta forma com certeza vem do fato de o modelo não ter completado, não quanto o esperado, as reações na região inicial da câmara.

A modelagem do caso utilizando BSL ou $k - \varepsilon$ apresenta poucas diferenças quantitativas globais nos perfis dentro da câmara e mostram que o modelo SST ainda apresenta certa deficiência na previsão dos resultados experimentais, talvez evidenciando então a base do modelo que é o modelo clássico $k - \omega$ que em seção anterior mostrou fraco desempenho no cálculo deste tipo de câmara, Fig. 4.30.

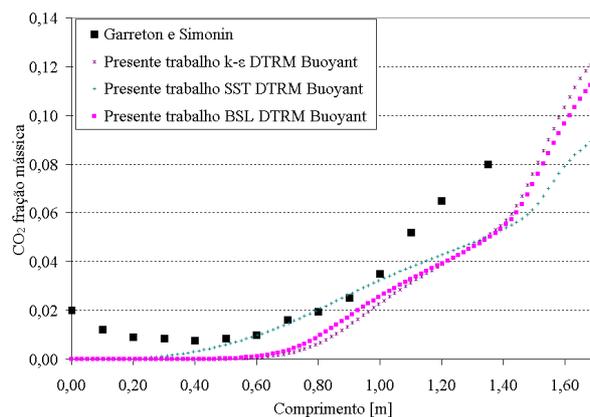


Figura 4.30 - Perfil de concentração de CO_2 axial da câmara.

Seguindo a mesma tendência os perfis de monóxido e dióxido de carbono, o perfil de oxigênio calculado pelo modelo BSL apresenta valores acima do experimental e dos calculados pelos modelos SST e $k - \epsilon$, evidenciando a falha do modelo no cálculo das reações químicas próximo ao bocal do queimador, Fig. 4.31.

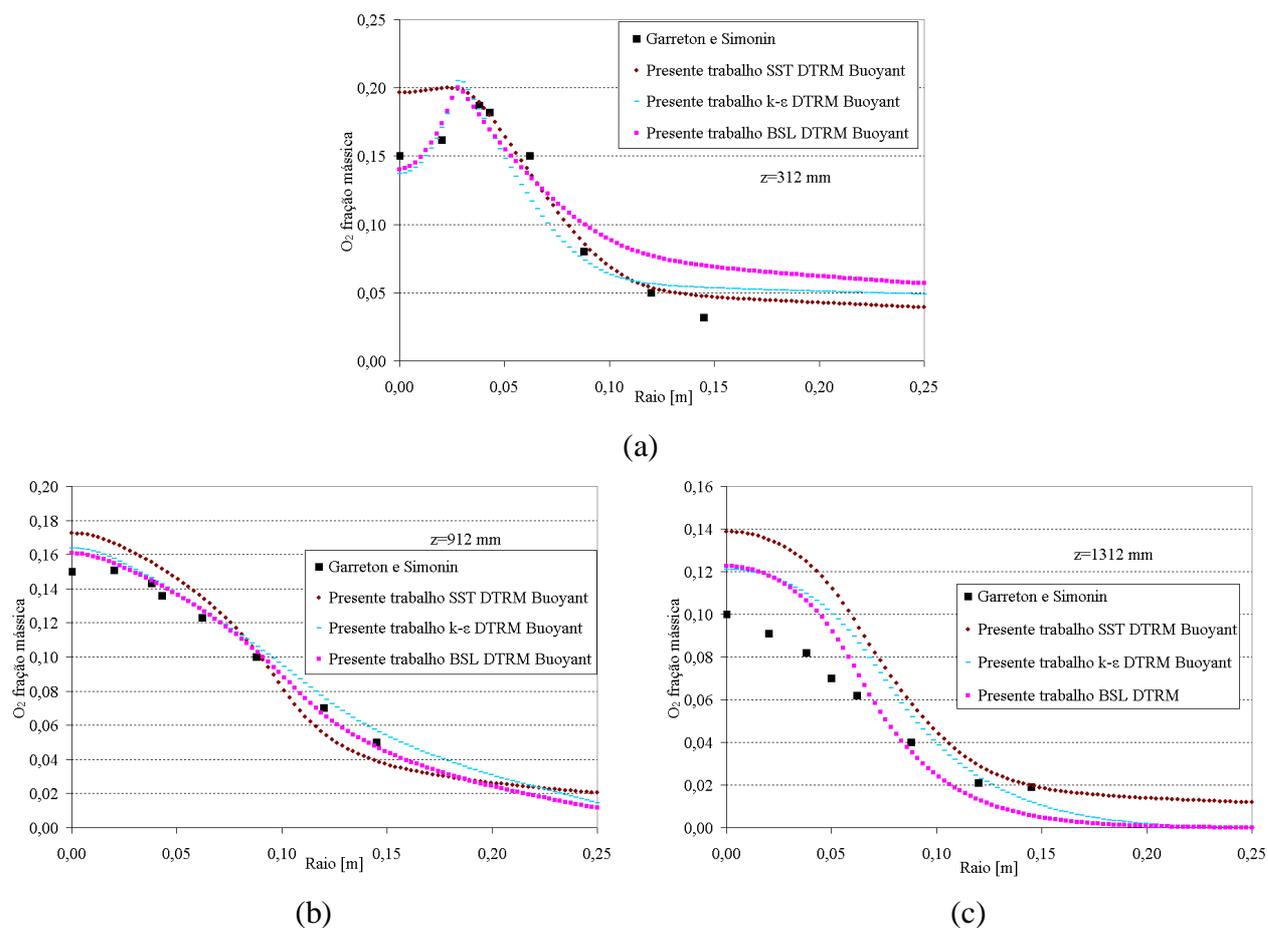


Figura 4.31 - Perfil de concentração de O_2 na cota (a) 312 mm, (b) 912 mm e (c) 1312 mm.

Próximo a saída da câmara o modelo BSL já mostra melhor desempenho no consumo do oxigênio, apresentando valores próximos do experimental. O modelo SST mostra maiores valores de fração mássica no fim da câmara, dado o baixo desempenho da modelagem básica do modelo $k - \omega$, como comentado anteriormente. Um ponto muito interessante a ser observado é que próximo ao fim da câmara, Fig. 3.52, o modelo BSL mostra um comportamento muito próximo ao do $k - \varepsilon$, entretanto, nesta zona, superestimando a taxa das reações.

Mesmo com a melhora dos resultados apresentados pelos modelos calculando o termo de força de corpo gerado pelo empuxo, não se obteve sucesso na previsão dos valores experimentais. O modelo BSL, mostrou em grande parte dos casos uma solução similar a do modelo $k - \varepsilon$, por exemplo, no campo da fração mássica do oxigênio, Fig. 4.32.

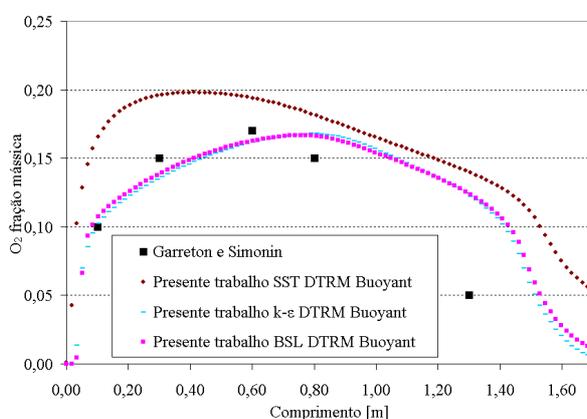


Figura 4.32 - Perfil da concentração de O₂ axial na câmara.

4.2.7. RESULTADOS CONSIDERANDO A EXAUSTÃO DE 600 mm

Como apresentado na descrição do caso estudam-se quatro malhas, Duas dessas malhas contam com uma extensão da saída. Conforme o experimento de Garreton e Simonin, 1994, a extensão alcança 1800 mm. Neste trabalho são simuladas saídas de 600 e 1200 mm, resultando num comprimento total da câmara em análise de 2300 mm e 2900 mm, respectivamente. Nesta seção são apresentados resultados da câmara com extensão da exaustão de 600 mm. Um refino de malha é testado para averiguar a possibilidade de poder diminuir o tempo de cálculo que com o termo radiativo e de empuxo chega a ordem de 48 horas com 771744 volumes e também verificar independência da malha. Uma malha de 253428 volumes é utilizada com as mesmas condições do modelo anterior, entretanto modelando também a saída de 600 mm na exaustão. O perfil de saída que é parâmetro para esta avaliação por trabalhos da literatura, Fig. 4.33, mostra que a malha menor alcança praticamente os mesmos resultados que a malha mais refinada. Não é

feito um estudo de robustez de malha definindo outros refinos, pois este não é um dos objetivos específicos do trabalho.

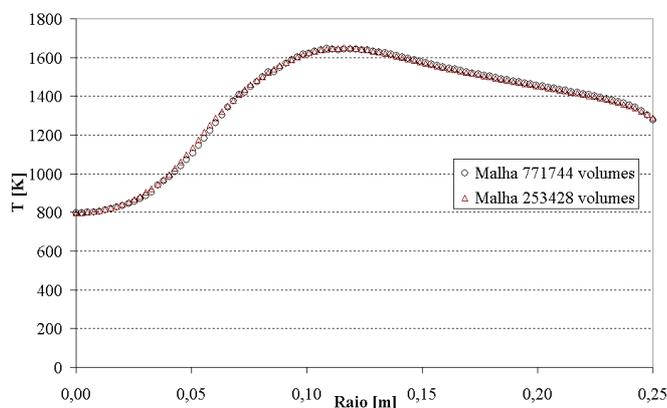


Figura 4.33 – Comparação entre malhas no perfil de temperaturas em 1312 mm.

A Fig. 4.34 mostra resultados da câmara com uma extensão de 600 mm na saída, apresentando melhora significativa na aproximação dos valores experimentais. A condição de contorno radiativa local na saída da câmara afetou o campo de temperaturas, mostrando uma capacidade de atrasar a chama, aumentando os valores de temperatura próximos a partir da metade da câmara.

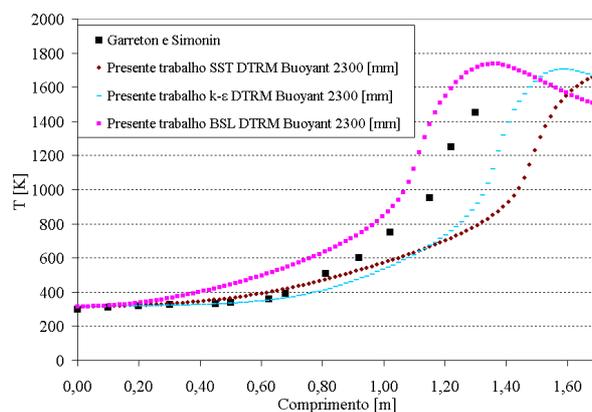


Figura 4.34 - Perfil axial de temperaturas resultado do modelo com exaustão.

A Fig. 4.35 mostra usando o modelo BSL, a tendência de temperaturas calculadas acima do experimental, o que no caso sem a extensão mostrava-se como um benefício do modelo. O modelo SST ainda mostra bom desempenho na região próxima ao bocal de saída do queimador, mesmo esta malha tendo menor número de pontos.

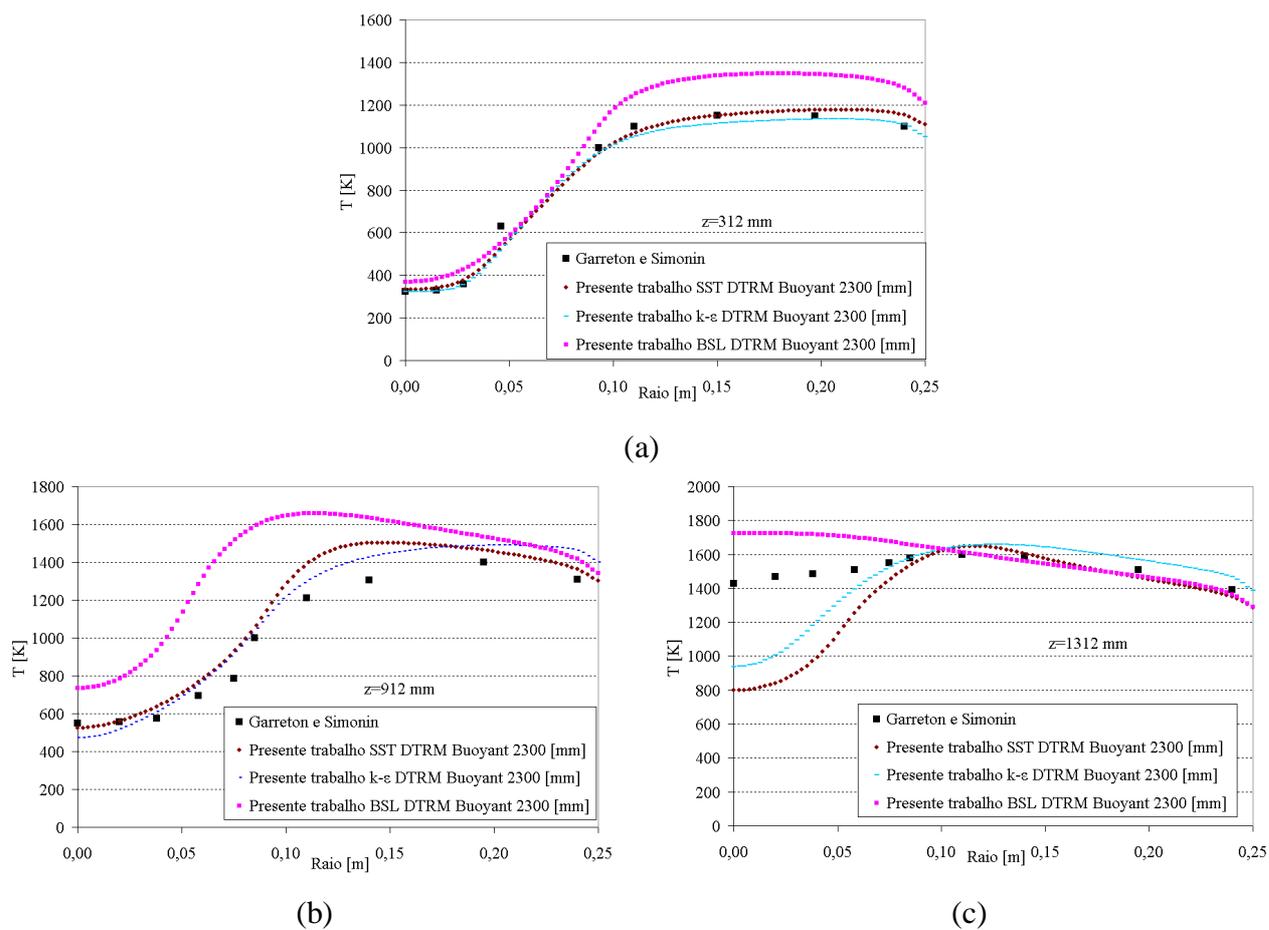


Figura 4.35 - Perfil radial de temperatura nas cotas (a) 312 mm, (b) 912 mm e (c) 1312 mm.

Os perfis mais próximos da saída da câmara mostram que a temperatura na condição de contorno da saída do domínio tem agora menor influência, com melhor aproximação dos pontos fora da projeção da saída da câmara (raio de 0,08 a 0,25 m), o que mostra uma independência da malha utilizada, mas não da condição de contorno. A modificação geométrica alterou a temperatura de saída de maneira similar nos modelos.

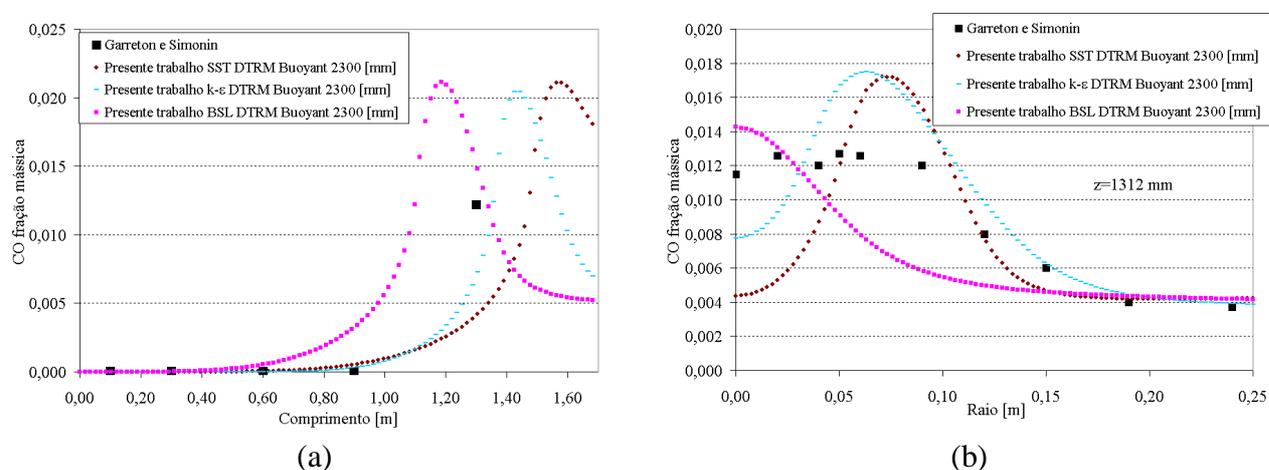


Figura 4.36 - Perfil (a) axial e na cota (b) 1312 mm da concentração de monóxido de carbono.

O modelo BSL apresentou aproximação ruim aos resultados do perfil de monóxido de carbono não mostrando o mesmo efeito na tendência mostrado por SST e $k - \varepsilon$, Fig. 4.36, que mesmo ainda com picos na camada cisalhante tem consistência física, dada a taxa de reação por mistura e temperatura.

Observe-se como a modelagem utilizando o modelo $k - \varepsilon$ apresentou boas aproximações do experimental no perfil de fração mássica do metano, Fig. 4.37, comprovando uma melhor aproximação do comportamento da reação, devido a alteração de contorno, mesmo com uma malha de menor número de nós.

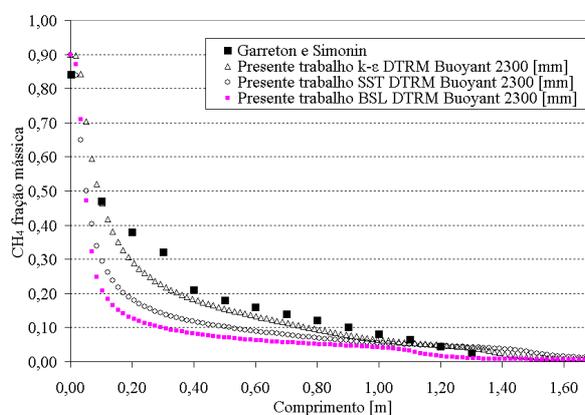


Figura 4.37 - Perfil axial da concentração de gás metano.

Próximos ao bocal ambos os modelos acabaram calculando valores acima do esperado. Entretanto, a diferença é muito pequena em relação ao experimental, da ordem de 10%, Fig. 4.38, o que é razoável dada a região da câmara que é de pouco interesse de Engenharia na análise da fornalha. A diferença maior aparece nos perfis na metade do comprimento da câmara novamente com valores superiores ao experimental, calculados por BSL.

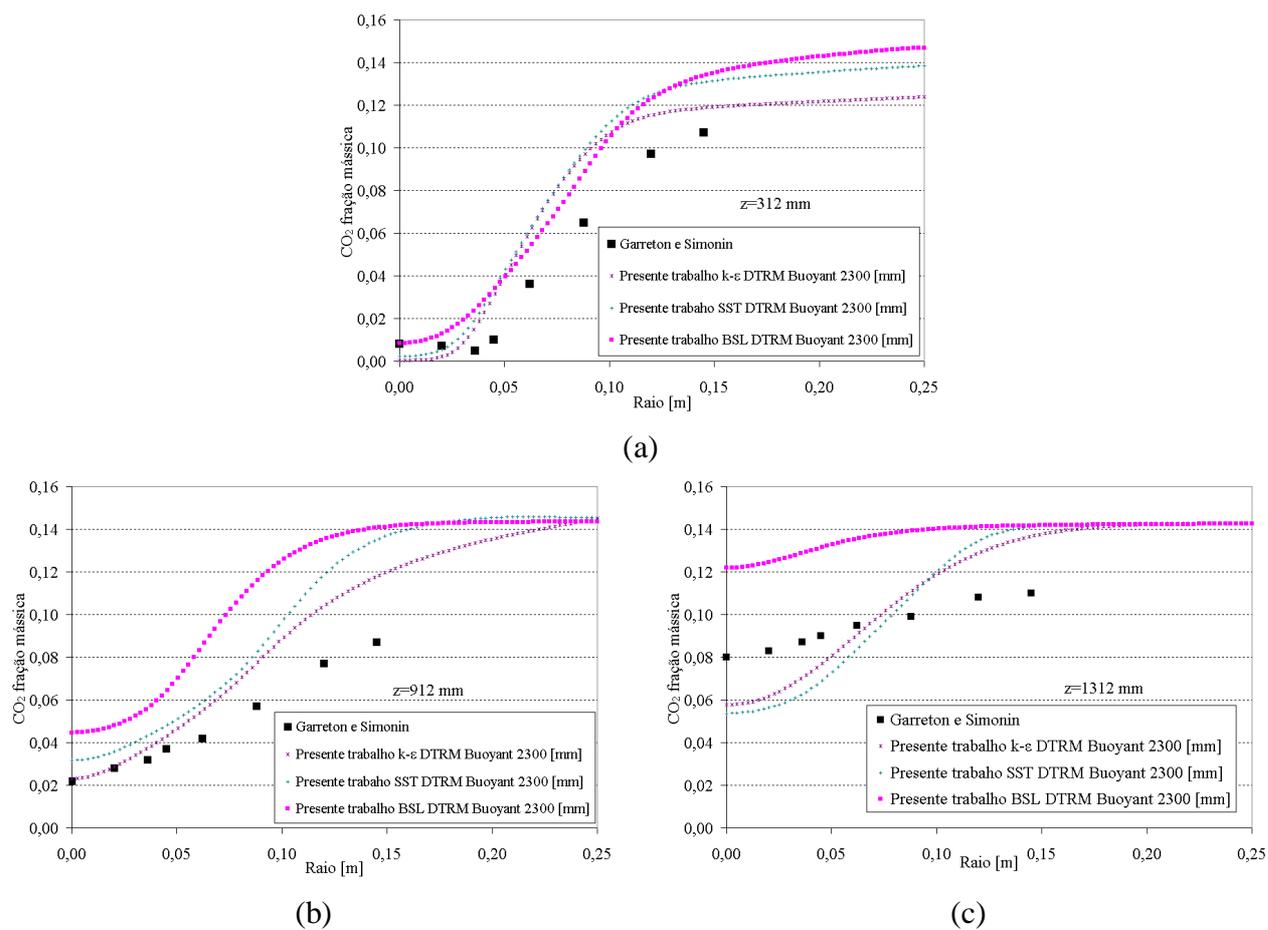


Figura 4.38 - Perfil da cocentração de CO₂ na cota (a) 312 mm, (b) 912 mm e (c) 1312 mm.

A última cota de medição antes da saída é onde se comprova a falha do modelo BSL na solução do problema, pois os demais modelos de turbulência apresentam os mesmos valores da malha anterior. Entretanto, o modelo BSL mostra valores com tendências diferentes e superiores aos do experimental, talvez aí apresentando uma taxa de reação acima do esperado que foi mascarada pelo efeito da condição de contorno na primeira malha.

Os perfis, de fração mássica de dióxido de carbono calculados utilizando o BSL apresentaram diferenças em relação ao dos modelos $k - \varepsilon$ e SST, Fig. 4.39. O modelo SST ainda apresenta certa deficiência na aproximação dos resultados experimentais, talvez evidenciando novamente sua base no modelo clássico $k - \omega$, que, como já comentado, mostra baixo desempenho no cálculo deste tipo de câmara.

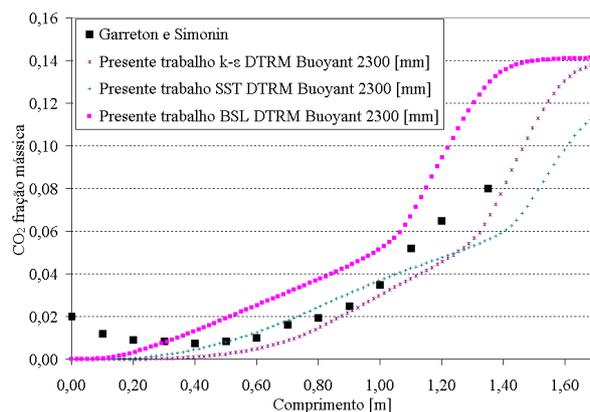


Figura 4.39 – Perfil axial da concentração de CO_2 da câmara.

Observando-se a fração mássica próxima a saída do queimador, Fig. 4.39, mais próxima do experimental. Verifica-se que o cálculo do consumo dos reagentes apresenta melhor comportamento. Este resultado concorda com as melhoras no meio da câmara.

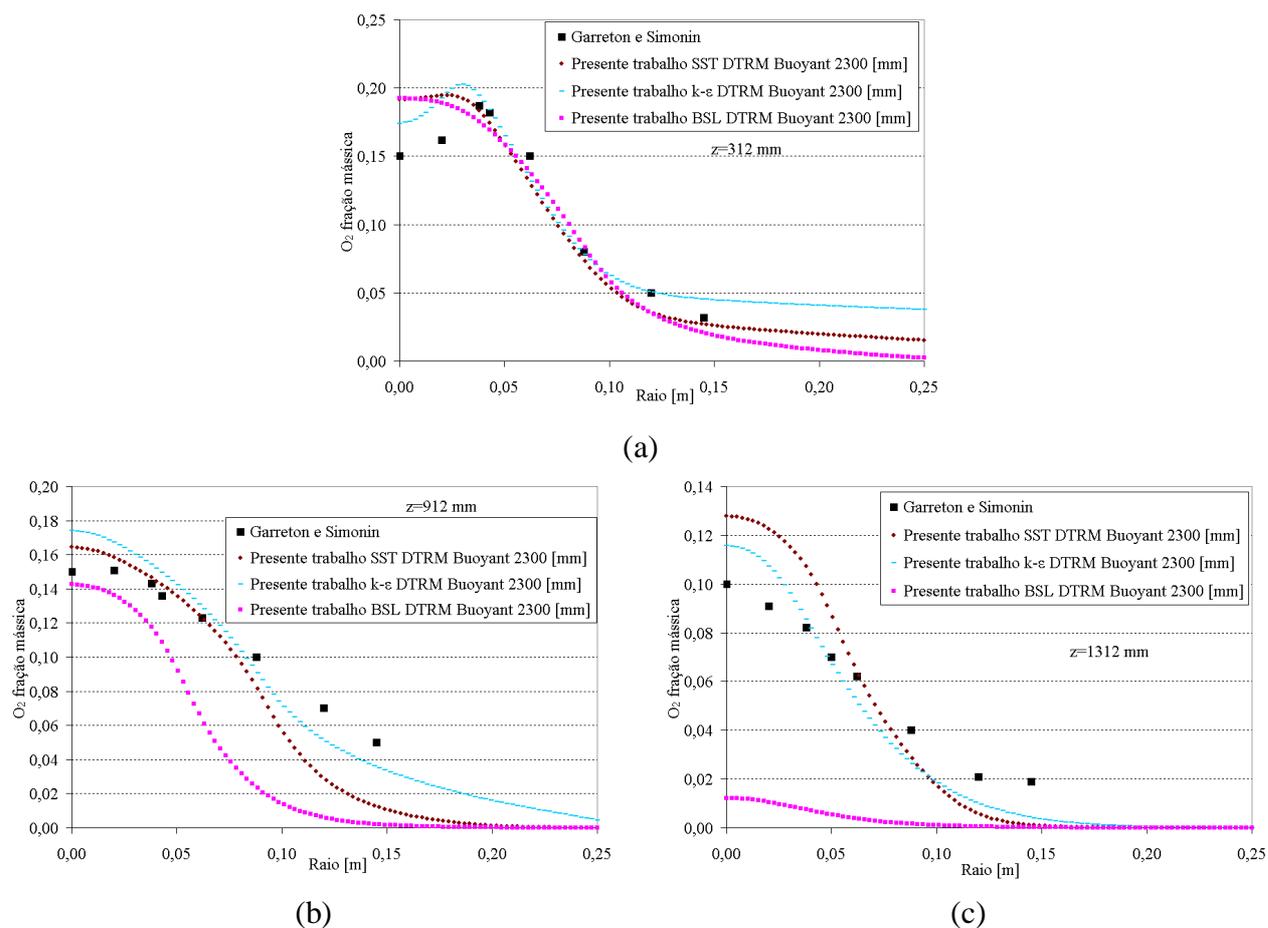


Figura 4.40 - Perfil da concentração de O_2 na cota (a) 312 mm, (b) 912 mm e (c) 1312 mm.

No perfil de medições da cota 912 mm já se verifica uma tendência de distanciamento das aproximações calculadas por $k-\varepsilon$ e SST, Fig. 4.40, um sinal claro que as taxas de reação começam a ser governadas pela mistura em vórtices de menor velocidade, sendo menos afetados pelo efeito das camadas cisalhantes entre jatos. Os perfis de oxigênio ao longo da câmara mostram o bom desempenho novamente do modelo $k-\varepsilon$ e evidenciam uma pequena deficiência na taxa de reação alcançada pelo modelo calculado com SST nas regiões de menor taxa de cisalhamento.

Interessante observar que o modelo BSL próximo ao fim da câmara, Fig. 4.40 (c), nesta malha mostra um comportamento muito diferente ao do $k-\varepsilon$, apresentando alta taxa de reação pelo baixo teor de oxigênio a ser medido no caso de uma câmara similar real, Fig. 4.41.

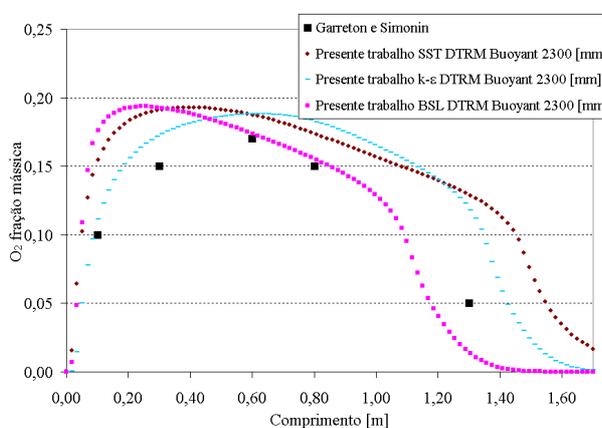


Figura 4.41 - Perfil da concentração de O_2 axial da câmara.

O cálculo da câmara, com uma geometria contando com o sistema de exaustão, mostra a sensibilidade da modelagem em relação à condição de contorno de saída, inclusive melhora a análise dos modelos de turbulência visto que o modelo BSL neste cálculo mostrou uma aproximação muito pior ao mostrado na malha com maior número de nós, entretanto sem saída modelada. Todos os modelos, entretanto, mostram que o algoritmo pode ter problemas ao decidir qual método calculará a taxa de reação média, ou EDM ou Arrhenius.

4.2.8. RESULTADOS DAS MALHAS CONSIDERANDO EXAUSTÃO DE 1200 mm

Esta seção apresenta os resultados calculados para o domínio com uma extensão da saída da câmara, num comprimento total em análise de 2900 mm utilizando uma malha de 264264 volumes. Os resultados são muito próximos dos atingidos com a extensão de 600 mm, o que mostra a partir daí uma independência da localização da condição de contorno. O modelo $k-\varepsilon$

mostra novamente bom desempenho em relação ao BSL e SST, Fig. 4.42, na previsão dos valores de temperatura ao longo do comprimento da câmara.

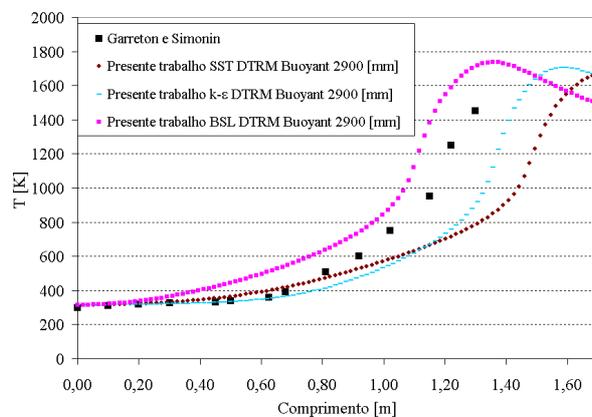


Figura 4.42 - Perfil axial de temperatura resultado do modelo.

Similar a câmara com comprimento total de 2300 mm, o domínio com 2900 mm, mostra bons resultados desde o início da câmara, Fig. 4.43.

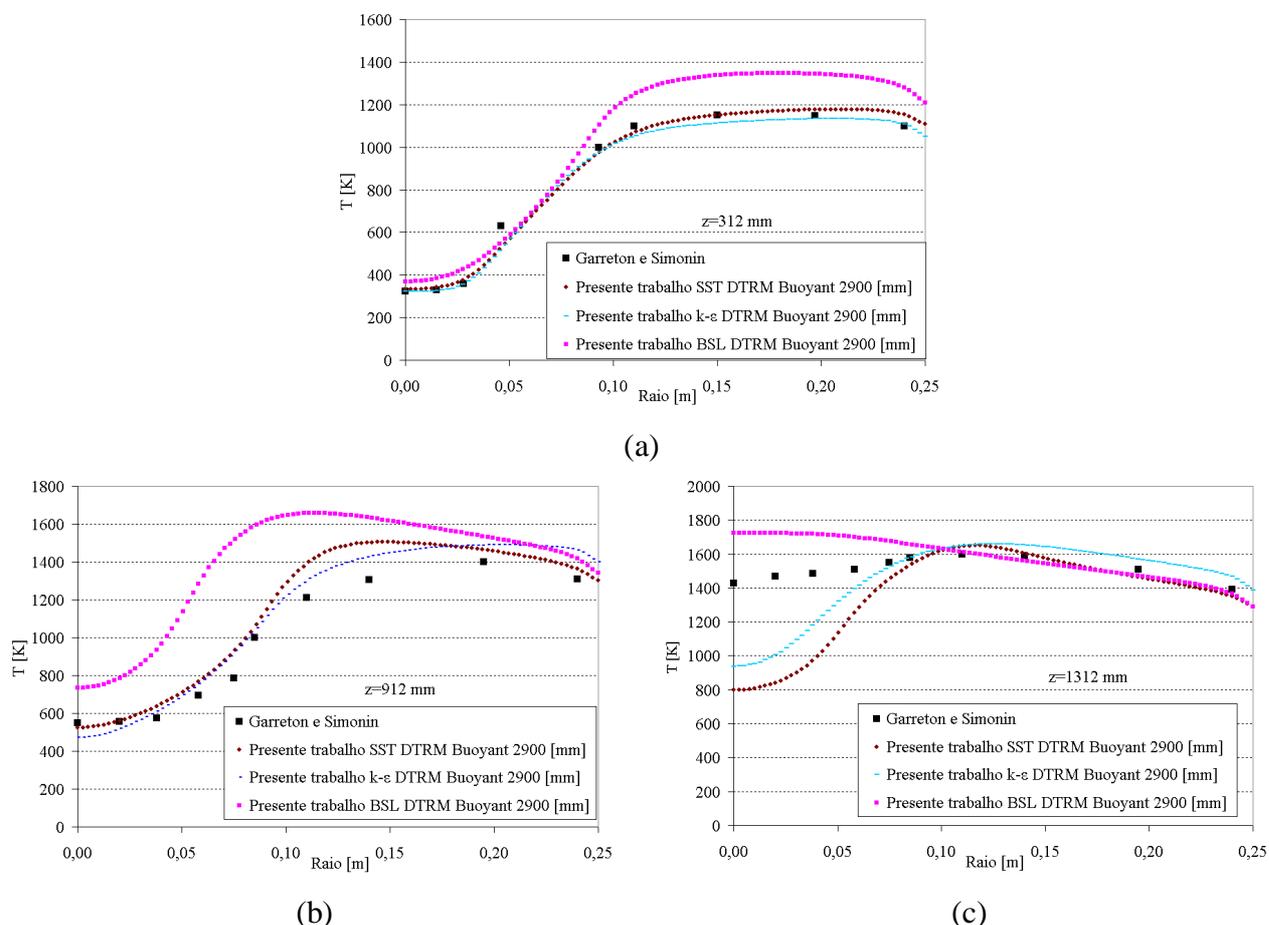


Figura 4.43 - Perfil radial de temperatura nas cotas (a) 312 mm; (b) 912 mm e (c) 1312 mm.

A interferência da condição de contorno de saída da câmara ainda é verificada mesmo com o comprimento de exaustão da câmara aumentando 600mm. A modificação geométrica não alterou significativamente a temperatura de saída da câmara em relação à malha com apenas 600 mm de extensão.

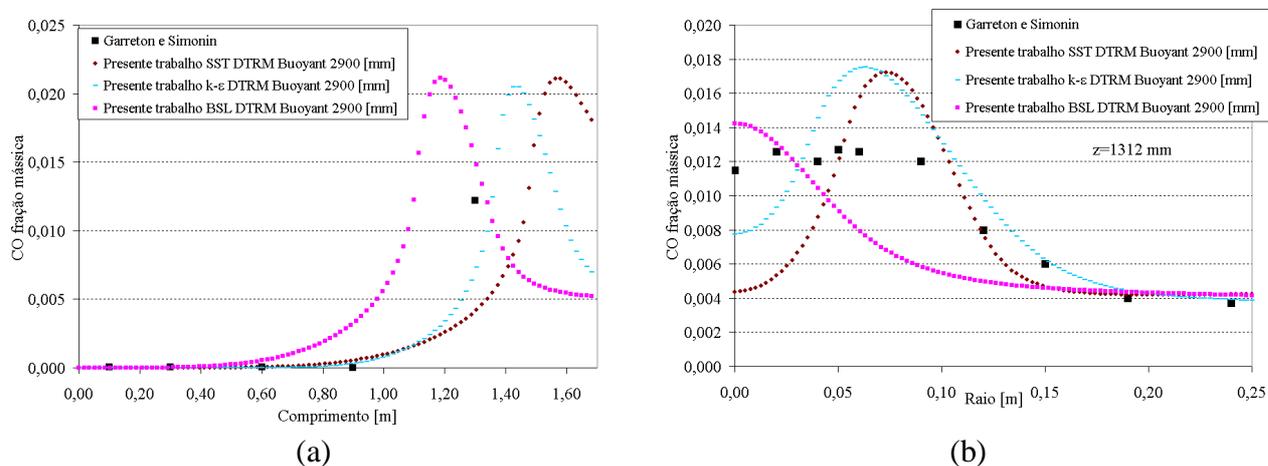


Figura 4.44 – Perfil (a) axial e na cota (b) 1312 mm da concentração de monóxido de carbono.

O efeito de cisalhamento entre os jatos é bem representado pelos picos nos perfis de monóxido de carbono tanto pelo modelo SST quanto $k-\varepsilon$, Fig. 4.44. Por isso o perfil de CO, no modelo calculado com o $k-\varepsilon$ tem uma base mais larga, entretanto com mesmo valor máximo do que o calculado no SST, que tem a taxa de reação altamente influenciada pelo efeito de cisalhamento entre as correntes de gases.

O modelo $k-\varepsilon$ mostra melhor desempenho no cálculo dos reagentes iniciais da mistura, Figs. 4.45, mostrando esta independência de malha e da condição de contorno ao fim da câmara, considerando o domínio agora com comprimento total de 2900 mm.

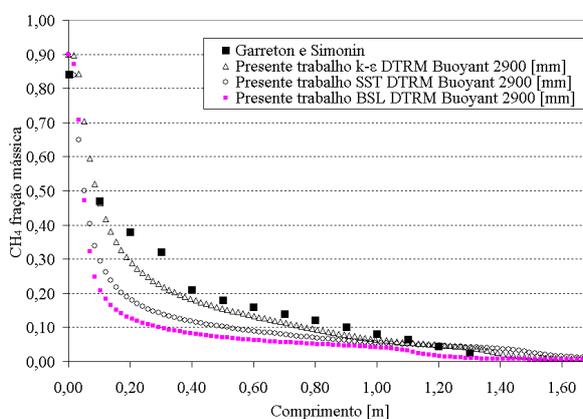


Figura 4.45 - Perfil axial da concentração de gás metano.

Quanto a produtos de combustão completa, ainda não se obtém um ótimo resultado próximo ao bocal, especificamente o dióxido de carbono, provavelmente por efeitos intrínsecos do processo experimental que dificilmente serão captados num cálculo de taxas de reação médias e modelos turbulentos com médias de Reynolds, Fig. 4.46. Dados os resultados anteriores e sua evolução com as melhorias e análises de cada modelo e estratégias de modelagem.

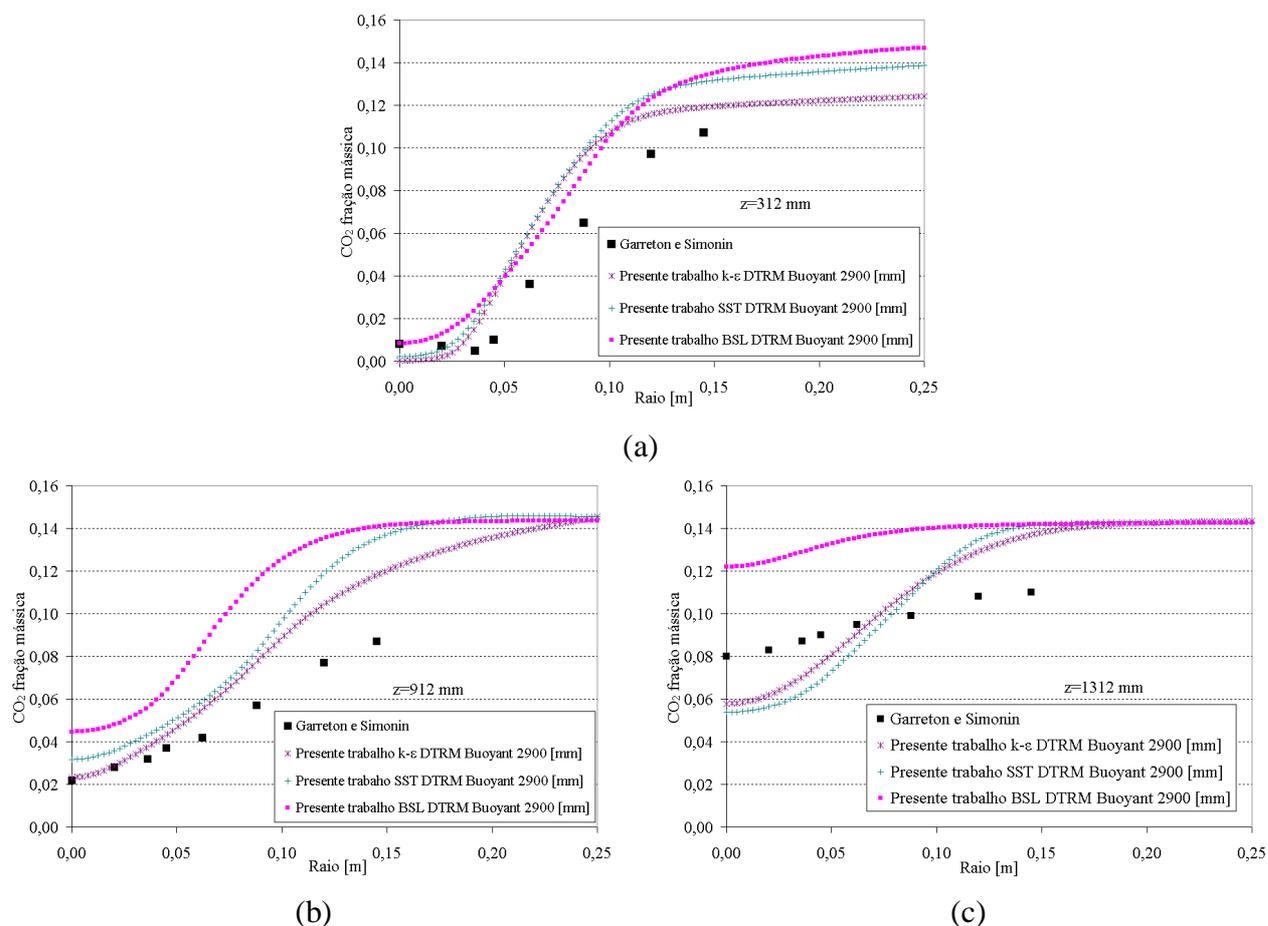


Figura 4.46 - Perfil da concentração de CO₂ na cota (a) 312 mm, (b) 912 mm e (c) 1312 mm.

O modelo BSL definitivamente gera valores acima do esperado para os tempos de mistura, responsáveis pela taxa de reação. Ele calcula a partir do meio da câmara perfis superiores de produtos de combustão completa, por exemplo, dióxido de carbono.

Os perfis de saída que deveriam ser os mais alterados com a modificação da distância da condição de contorno, não mostraram praticamente nenhuma variação em relação ao cálculo da câmara com comprimento total de 2300 mm, Fig. 4.47.

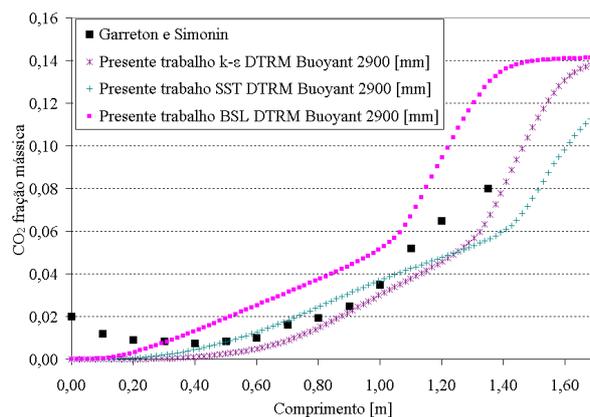


Figura 4.47 - Perfil da concentração de CO_2 axial na câmara.

Mesmo no perfil mais próximo ao bocal do queimador, Fig. 4.48, o modelo $k - \varepsilon$ aproxima de uma forma bem similar os resultados experimentais, região onde se esperaria que o modelo SST fosse desempenhar melhor pelo fato de usar o modelo de aproximação do transporte do tensor de Reynolds. Somente o modelo $k - \varepsilon$ capta a reação adentrando a camada de cisalhamento entre os jatos, onde a camada limite entre os jatos cisalhantes se torna mais espessa devido à expansão. O modelo SST tem bom desempenho na reação interna ao jato de gás metano.

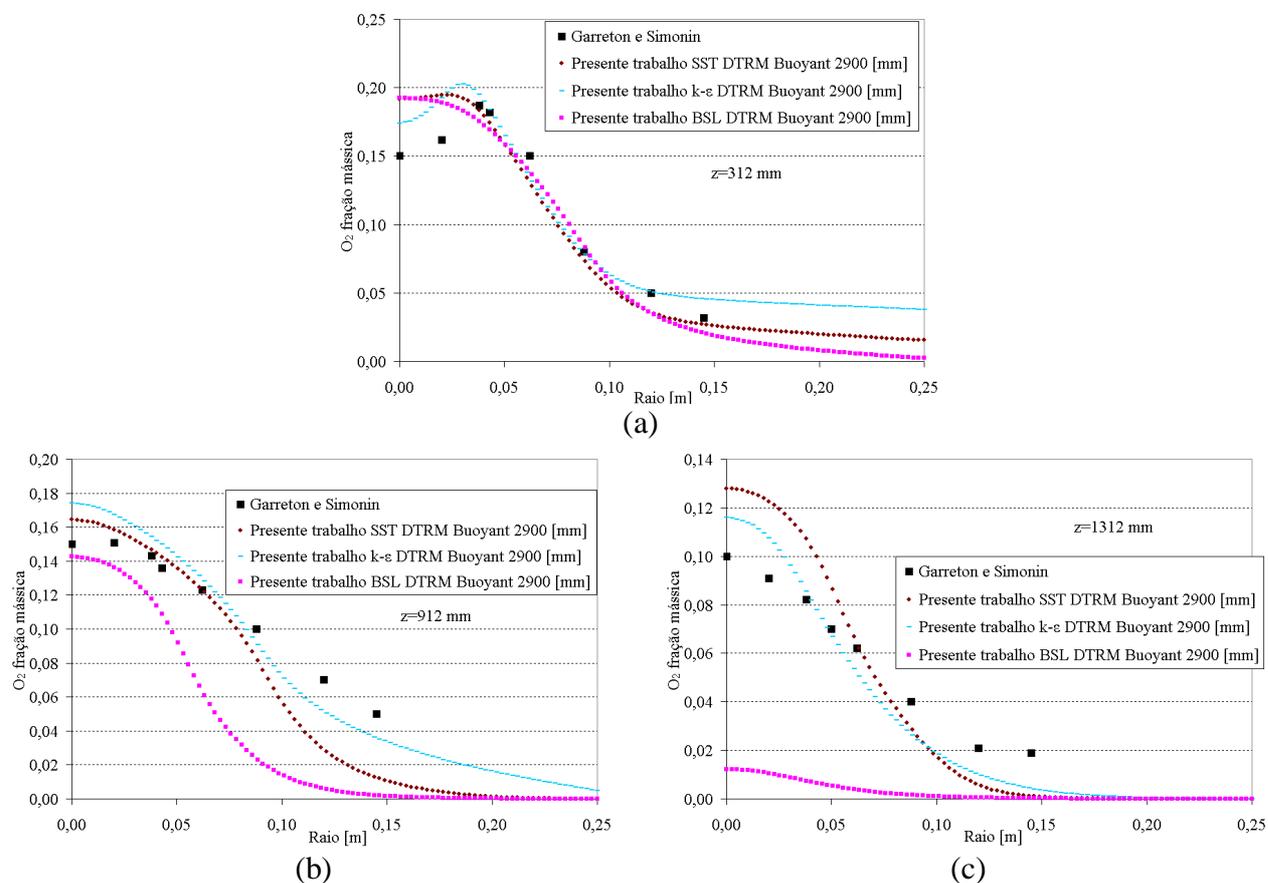


Figura 4.48 - Perfil da concentração de O_2 na cota (a) 312 mm, (b) 912 mm e (c) 1312 mm.

Os perfis de oxigênio ao longo da câmara e especialmente mais próximo ao final mostram o bom desempenho do modelo $k - \varepsilon$, Fig. 4.49. Entretanto o SST apresenta baixos tempos de mistura resultando em baixas taxas de reação.

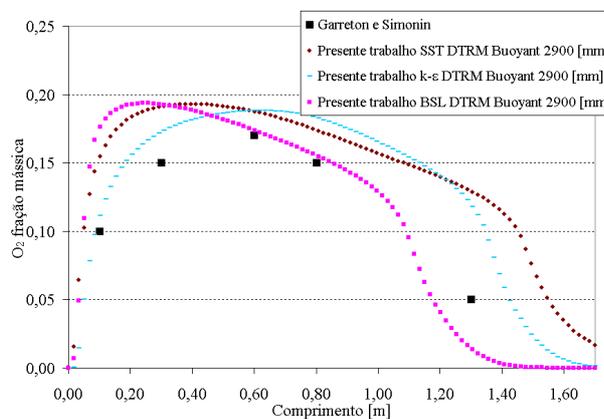


Figura 4.49 - Perfil da concentração de O₂ axial da câmara.

O cálculo da câmara com uma geometria contando com o sistema de exaustão mais longo que o anterior, mostra que há sensibilidade da modelagem em relação à condição de contorno de saída existe, mas é limitado até certo ponto.

4.2.9. DISCUSSÃO DOS RESULTADOS PARA O PRIMEIRO ESTUDO DE CASO

O estudo de caso da câmara de Garreton e Simonin, 1994, é muito útil para a compreensão e aplicação da modelagem de combustão em câmaras cilíndricas. A câmara em questão apresenta a particularidade de ter um perfil de Damkohler bem diverso ao longo do seu comprimento o que garante uma variedade de modos para a ocorrência das reações, quando aplicando modelos de taxa de reação baseados na cinética química ou na taxa de mistura. Ficou muito claro o efeito do cisalhamento dos jatos concêntricos do queimador, propiciando a reação desde os primeiros perfis de medição, 312 [mm], inclusive mostrando uma independência da malha, mas não da condição térmica de contorno. O modelo de turbulência SST é o modelo que melhor modelou a região, apresentando bons resultados principalmente nas frações mássicas de dióxido de carbono e de temperatura, mesmo com o domínio sem a extensão da exaustão, pois ali não há influencia forte da condição de contorno de saída, Fig. 4.50.

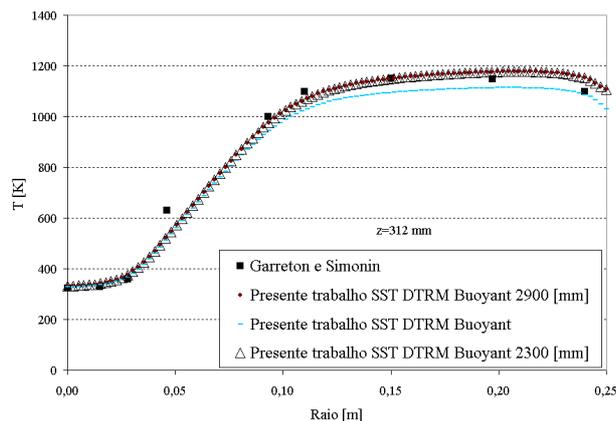


Figura 4.50 – Perfil de temperatura na cota 312 mm resultado de diferentes modelagens com o SST.

O fato de o modelo SST ter captado tão bem o efeito dos jatos, mostra também que o refinamento da malha na camada de cisalhamento entre jatos deve ser mais bem estudado e é um fator de sucesso do modelo, possibilitando uma discretização do domínio em menor número de nós, obtendo bons resultados.

O fato de o modelo SST sempre mostrar um valor menor no consumo dos reagentes e produtos no comprimento da câmara deixa claro que o modelo $k-\omega$ mesmo com uma malha mais refinada não apresentaria bons resultados, Fig. 4.51.

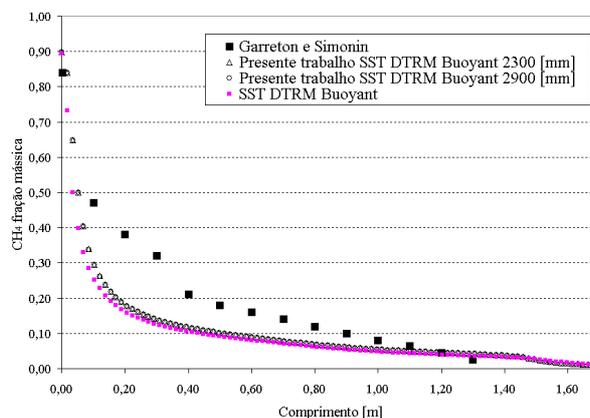


Figura 4.51 - Perfil de concentração de metano calculado pelo modelo SST em diferentes modelagens.

Apesar de no início do estudo o modelo BSL ter se apresentado como uma boa opção, devido à propriedade de variar a modelagem do transporte das tensões turbulentas, comprova-se que o modelo é fortemente dependente da malha e, caso fosse interpretado o primeiro resultado como uma boa alternativa de modelagem, cometer-se-ia uma falha em câmaras onde a condição térmica de saída fosse mais bem modelada na geometria.

A modelagem numa câmara similar obrigatoriamente deve calcular a troca radiativa, dadas as altas magnitudes de temperatura observadas dentro da câmara e que ocorrem em praticamente todas as câmaras industriais, mesmo com paredes tão frias. O modelo DTRM se mostrou como opção mais robusta por ter mostrado ótimo desempenho numérico e praticamente o mesmo tempo computacional que um modelo P-N. A interferência da condição de contorno no resultado independe do modelo, pois age de mesma forma na equação de transporte para ambos, portanto necessariamente o usuário de qualquer código computacional teria que averiguar se a geometria e malha do domínio estudado reflete o cenário experimental ou prático, principalmente quando se fala de fronteiras com troca radiativa. No código utilizado a condição local é a única além da temperatura prescrita. Uma alternativa é o cálculo da temperatura média da mistura e sua posterior imposição na saída, isto agregaria mais custo computacional ao cálculo por relacionar o campo solução diretamente com a condição de contorno e não somente os volumes no contorno, mas pode trazer melhora significativa do resultado.

Conclui-se que o caso tem validade no embasamento do uso de modelos de turbulência por média de Reynolds a partir da média das equações de Navier-Stokes e que o modelo $k - \varepsilon$ apresenta bom desempenho dentro de câmaras com um Damkohler diverso, mesmo com jatos concêntricos e em expansão, apesar de a bibliografia questionar seu uso no estudo de jatos, Fig. 4.52.

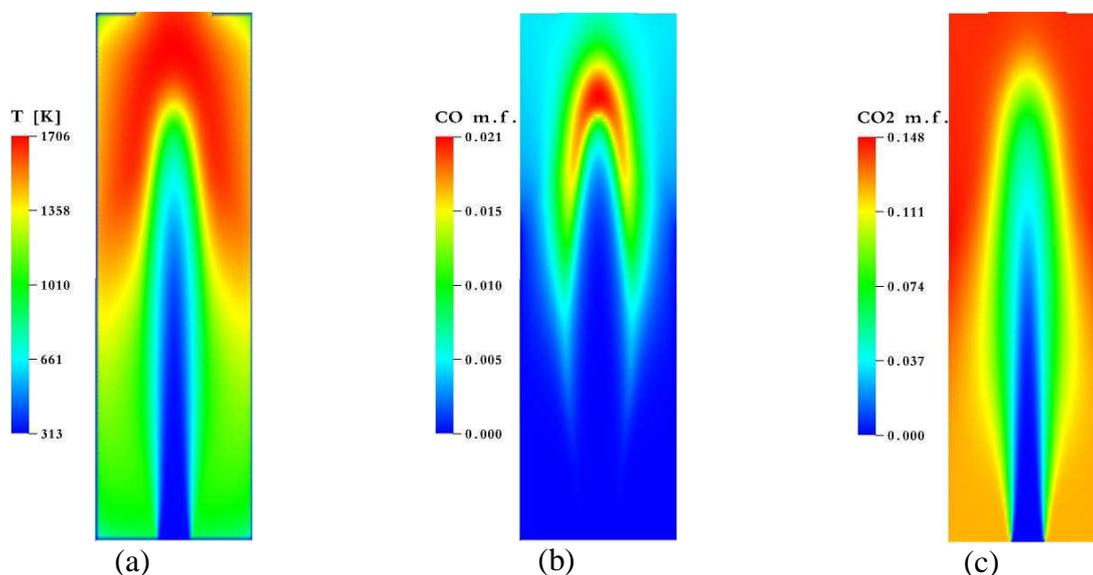


Figura 4.52 – Campos (a) de temperatura (b) monóxido de carbono e (c) dióxido de carbono.

A Fig. 4.53 mostra a evolução da modelagem utilizando o $k - \varepsilon$ com a implementação de termos de força de corpo como o empuxo, modelos de troca radiativa e diferentes malhas e geometrias para o campo de fração mássica do oxigênio.

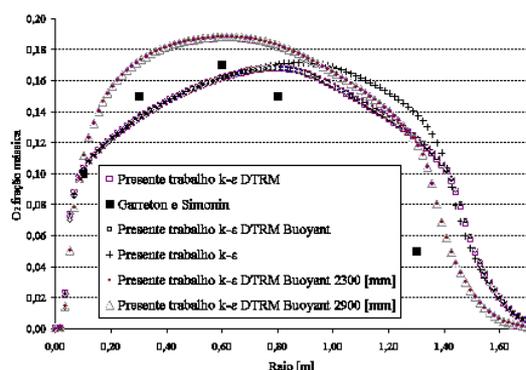


Figura 4.53 – Perfil de concentração de oxigênio axial , calculado pelos modelos utilizando o modelo $k - \varepsilon$.

4.3. SEGUNDO ESTUDO DE CASO

Este trabalho apresenta uma solução desenvolvida para uma câmara com alta intensidade de turbulência, apresentando alto *swirl* ($S=0,9$). Trata-se de um combustor de gás metano, com geometria similar aos usados em turbinas. Este queimador é experimentado por Meier, 2000, que no mesmo trabalho apresenta uma solução com o programa FLUENT, não alcançando os campos experimentais nem mesmo qualitativamente. O escoamento simulado acaba tendendo a uma chama muito aberta enquanto que o real apresenta uma chama de menor diâmetro com uma zona de recirculação central bem definida. A geometria do experimento é apresentada na Fig. 4.54.

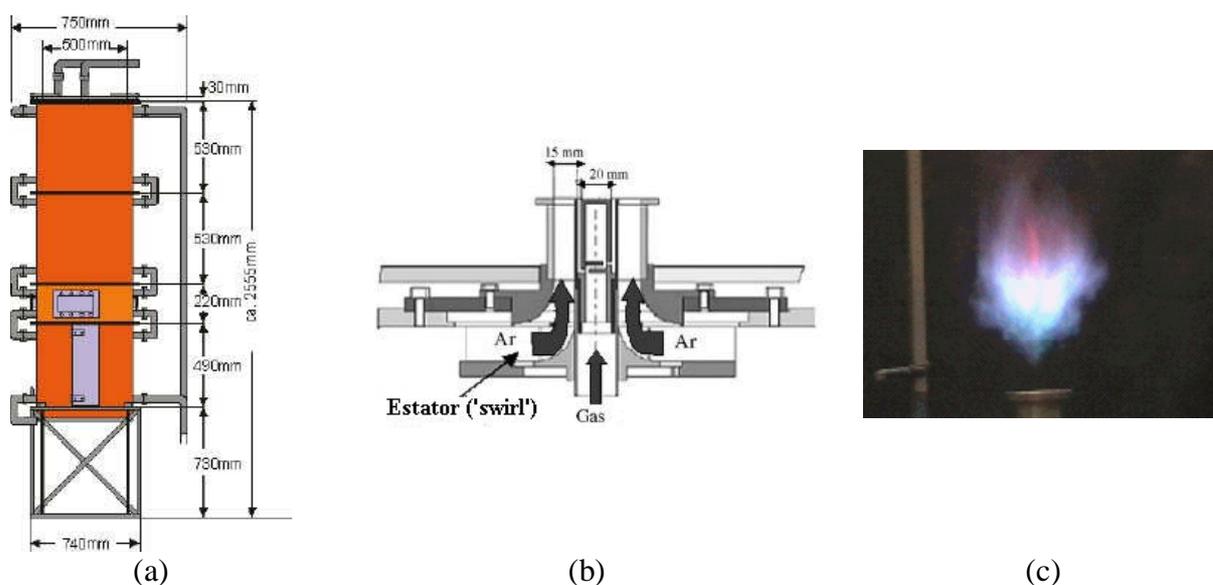


Figura 4.54 – (a) Geometria da câmara de combustão do experimento, (b) forma do combustor e (c) foto da chama visível durante o experimento.

A câmara de combustão desenvolve 150 kW de potência com diâmetro interno de 0,5 m e comprimento de 1,2 m, um queimador de diâmetro 0,06 m caracterizado por uma entrada anular concêntrica de 3 mm de gás natural e uma entrada também concêntrica anular de 15 mm de ar atmosférico; Ambos os reagentes são insuflados a 300 K com um excesso de ar de 1,2 e número de *swirl* 0,9. Estas características do escoamento dos reagentes são alcançadas pela condição de contorno da câmara que, de acordo com Frassoldati, 2005, pode ser aproximada pelos seguintes perfis de velocidade com o raio adimensionalizado em relação ao raio do queimador ($r_b = 0,03[m]$), Fig. 4.55.

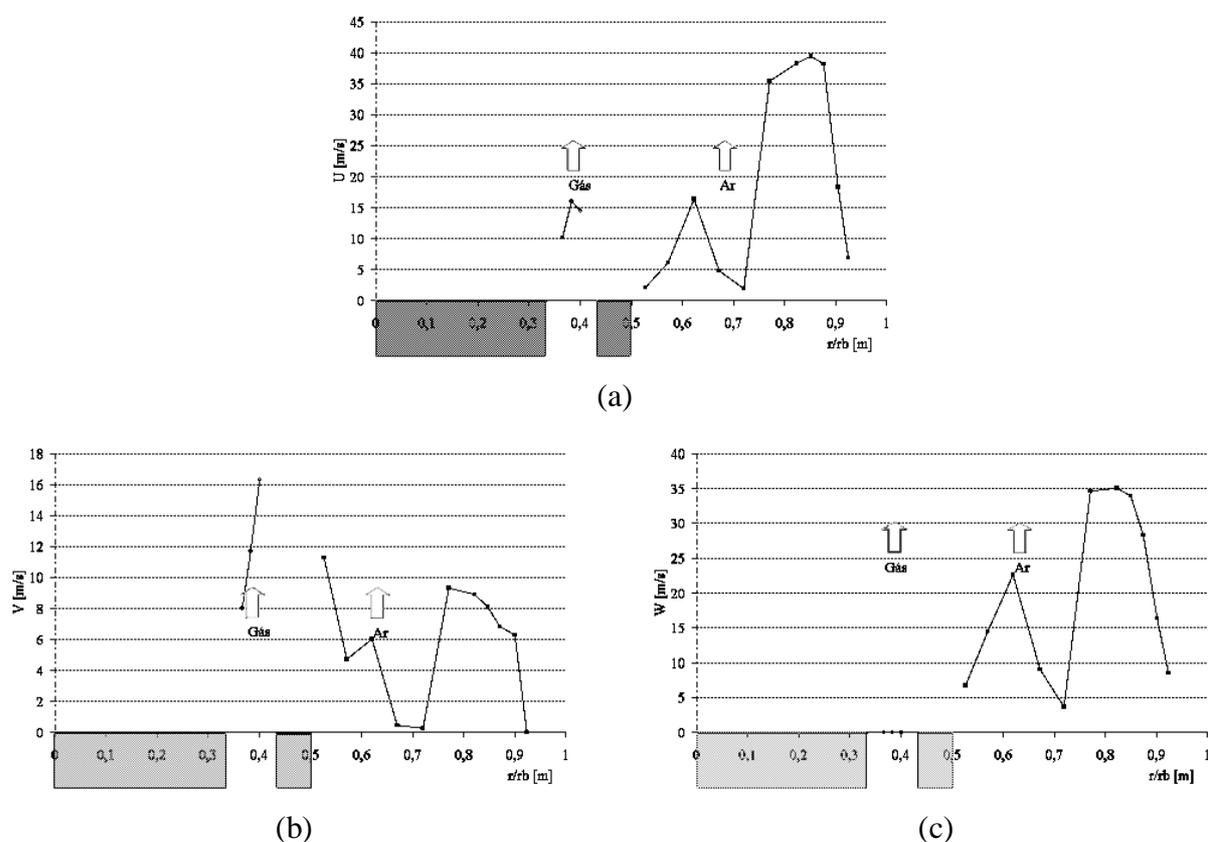


Figura 4.55 – Perfis de velocidade na entrada do combustor: (a) axial; (b) radial e (c) tangencial.

Pode-se visualizar que somente o ar tem velocidade tangencial, sendo esta corrente a responsável pelo *swirl* do escoamento. O escoamento de entrada dos reagentes também considera energia cinética turbulenta e a taxa de dissipação na entrada, com valores de 8 % e 30 mm, 5% e 6 mm para a intensidade turbulenta e comprimento característico respectivamente para o ar e o gás natural.

Inicialmente são testadas oito malhas com formas diferentes em refinamentos localizados e também com número de nós diferentes:

- Malha (A) – 333116 volumes
- Malha (B) – 323565 volumes
- Malha (C) – 259083 volumes
- Malha (D) – 304782 volumes
- Malha (E) – 358891 volumes
- Malha (F) – 387732 volumes
- Malha (G) – 447070 volumes
- Malha (H) – 371745 volumes

As topologias de distribuição da malha são apresentadas nas Figs. 4.56 a 4.64. Baseiam-se na construção de blocos de malha hexaédrica com arestas nas linhas de contorno das geometrias abaixo.

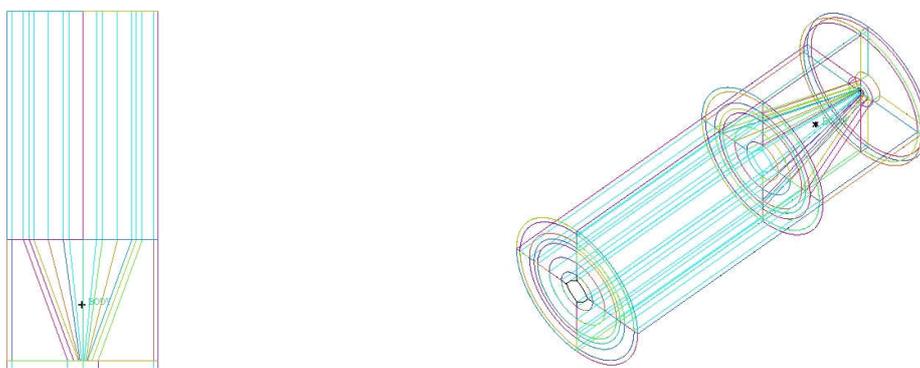
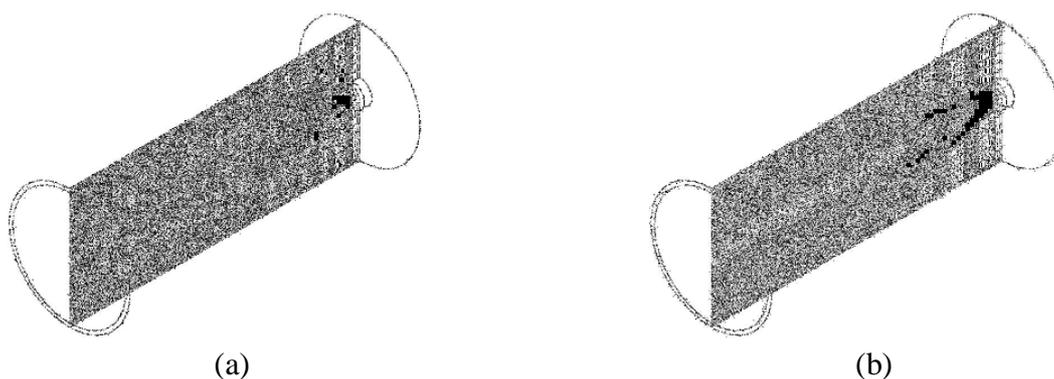
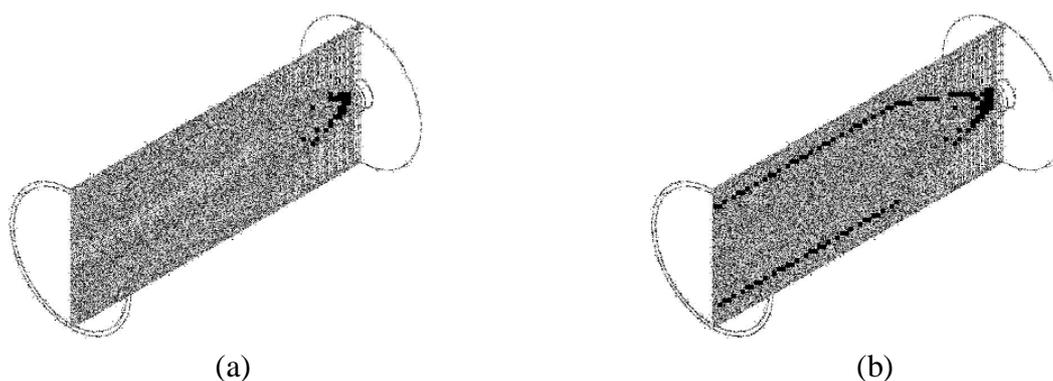


Figura 4.56 – Topologia adotada para as malhas (A), (B), (C) e (D).



(a)
Figura 4.57 – Imagem em corte da (a) Malha A (333116 volumes) e
(b) Malha B (323565 volumes).



(a) (b)
 Figura 4.58 – Imagem em corte da (a) Malha C (259083 volumes) e
 (b) Malha D (304782 volumes).

A topologia de malha utilizada nas malhas A, B e C tem o intuito de acompanhar o desenvolvimento da abertura do jato, Figs. 4.56 a 4.58, privilegiando o refino na zona de cisalhamento entre as correntes de ar e de gás natural, onde há forte atrito devido ao fato da corrente de ar ter momento angular enquanto que a de gás natural, não. Um problema grave é que devido ao fato desta forma de malha ser contínua, geram-se deformações dos volumes ao refinar próximo do queimador e da zona de saída da câmara. Para evitar isto gera-se uma malha de grande quantidade de nós desnecessariamente.

Uma forma de malha mais tradicional verificada em estudos em bibliografia de mecânica dos fluidos computacional é testada, Fig. 4.59 e 4.60. Mas, neste caso, tem-se o agravante de gerar um número maior de nós que as demais principalmente por ter as linhas centrais do domínio muito próximas, devido à geometria do problema em que os anéis de saída dos reagentes são muito menores que as dimensões gerais do domínio, sendo da ordem de milhares de vezes menores.

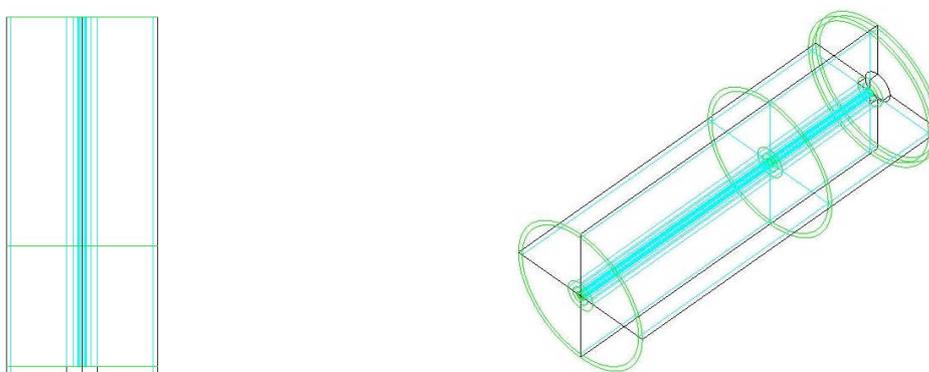


Figura 4.59 - Topologia adotada para as malhas E e F.

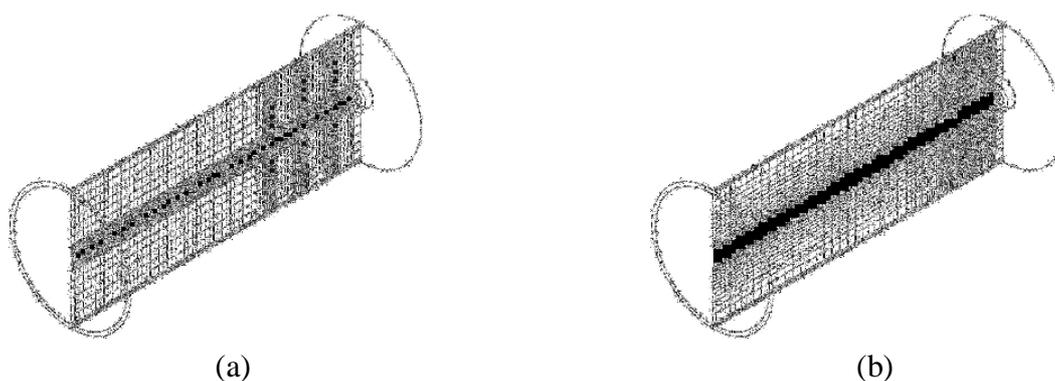


Figura 4.60 – Imagem em corte da (a) Malha E (358891 volumes) e (b) Malha F (387732 volumes).

A topologia de malha desencontrada é desenvolvida para poder aumentar melhor a discretização próxima ao bocal de saída do queimador, Figs. 4.61 a 4.64, sem gerar distorções na zona de exaustão da câmara.

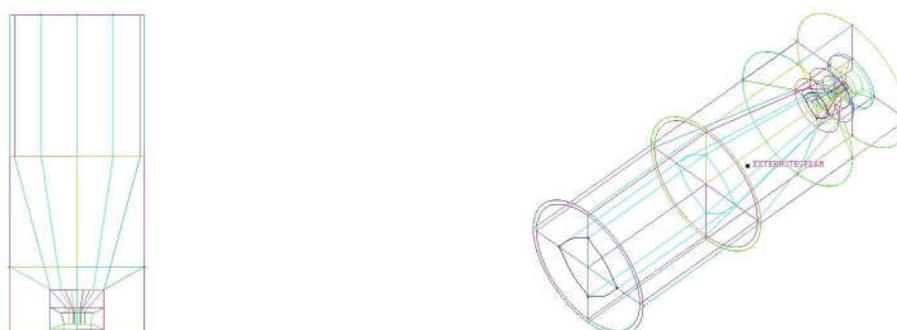


Figura 4.61 - Topologia adotada para a malha G.

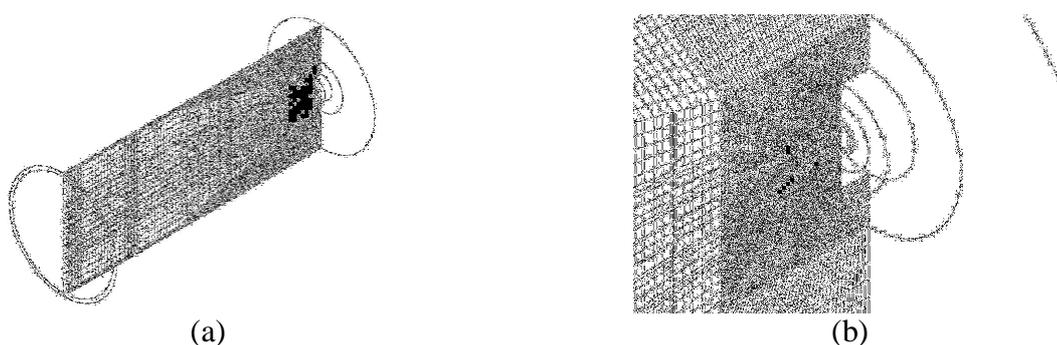


Figura 4.62 – Imagem em corte da (a) Malha G (447070 volumes) e (b) detalhe da região do queimador.

Uma avaliação da malha considerando somente um quarto da geometria da câmara e maior refino é utilizada na solução com o objetivo de verificar o desempenho de uma

discretização maior localmente sem aumentar o consumo de tempo computacional , (Figs. 4.63 e 4.64,).

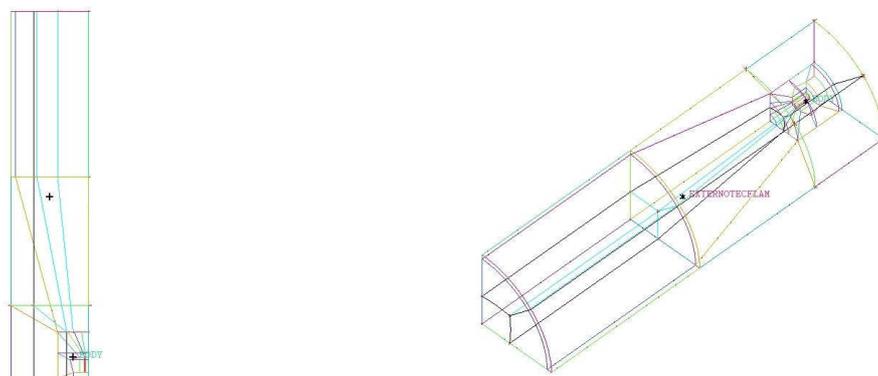


Figura 4.63 - Topologia adotada para as malhas H.

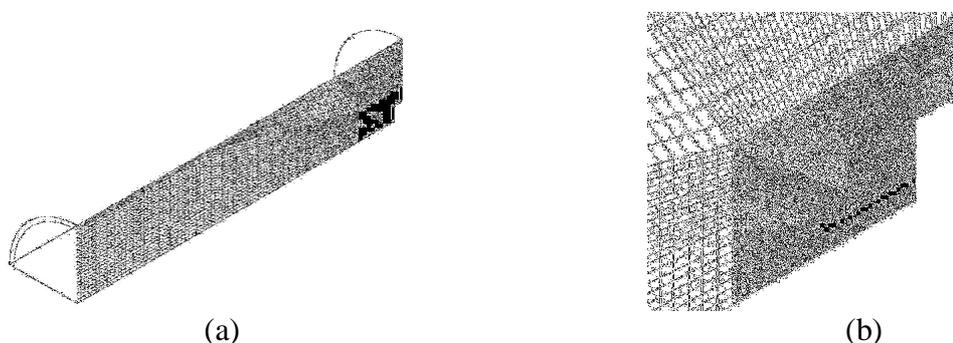


Figura 4.64 – Imagem em corte: (a) Malha H (371745 volumes) e (b) detalhe da região do queimador.

Os primeiros casos foram desenvolvidos com o escoamento dos reagentes entrando no domínio a 300 K conforme o descrito pelo experimento, [Meier, 2000]. A solução foi extremamente lenta e em alguns casos levando mais de 16 horas para solução alcançar patamares de resíduo normalizado da ordem de $1e-5$. A solução mesmo utilizando passos de tempo muito menores que o calculado para a geometria e dimensões características do escoamento, não alcançou valores inferiores a $1e-6$, apresentando grande variação de valores a cada iteração. A forte instabilidade do resíduo é devido ao fato do escoamento ser por natureza instável, variando inclusive a forma da chama, como visto em vídeo do experimento. As variações de forma e direção ao longo do tempo, mesmo numa simulação transiente, iriam ser captados com pouca definição visto que as escalas de tempo de variações desta ordem de velocidade podem ser imperceptíveis para o código de solução, com um passo de tempo razoável numericamente. Foram comparados inicialmente os perfis de velocidade axial, radial e tangencial nas mesmas cotas que as medidas experimentais, Fig. 4.65.

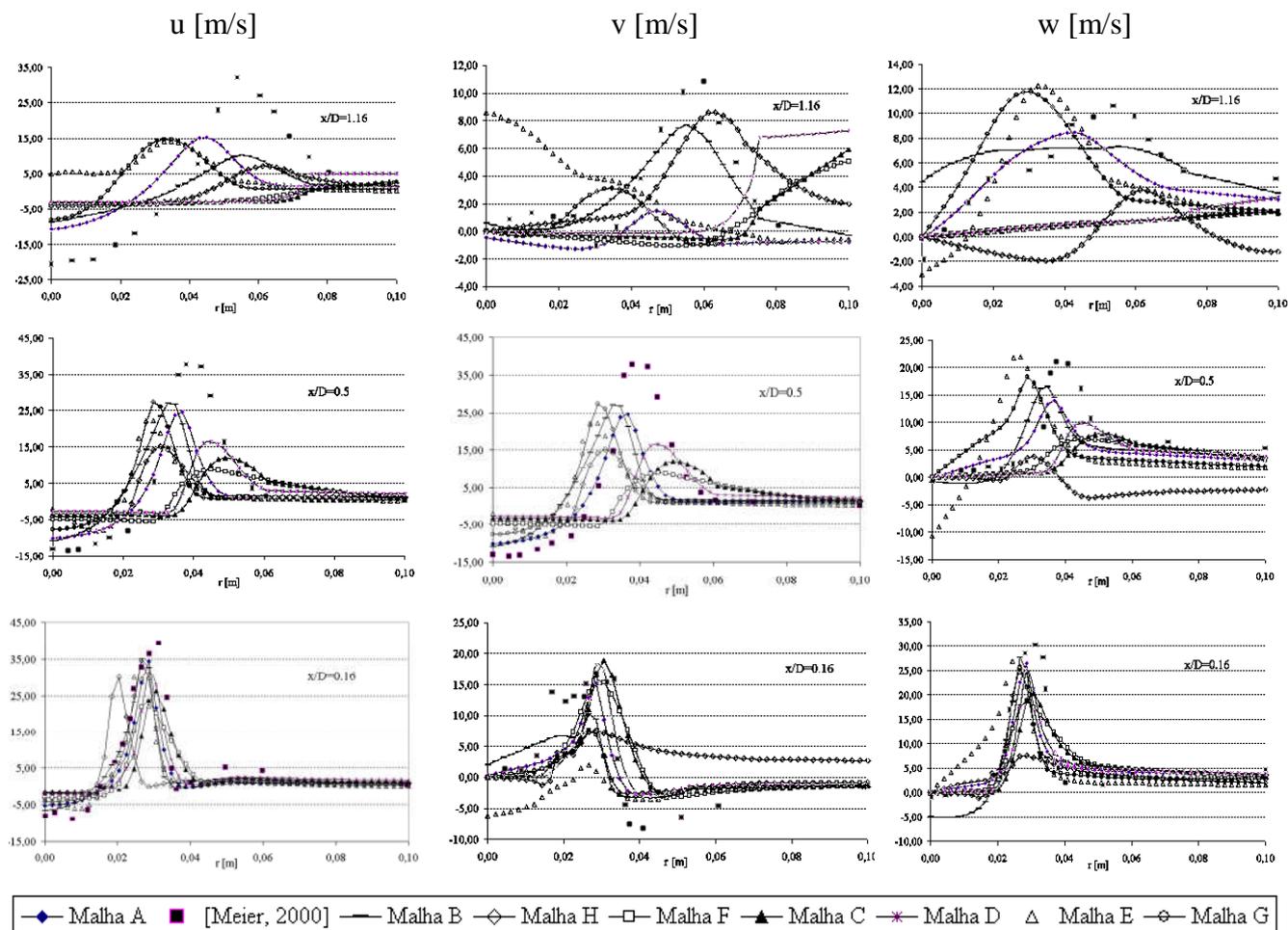
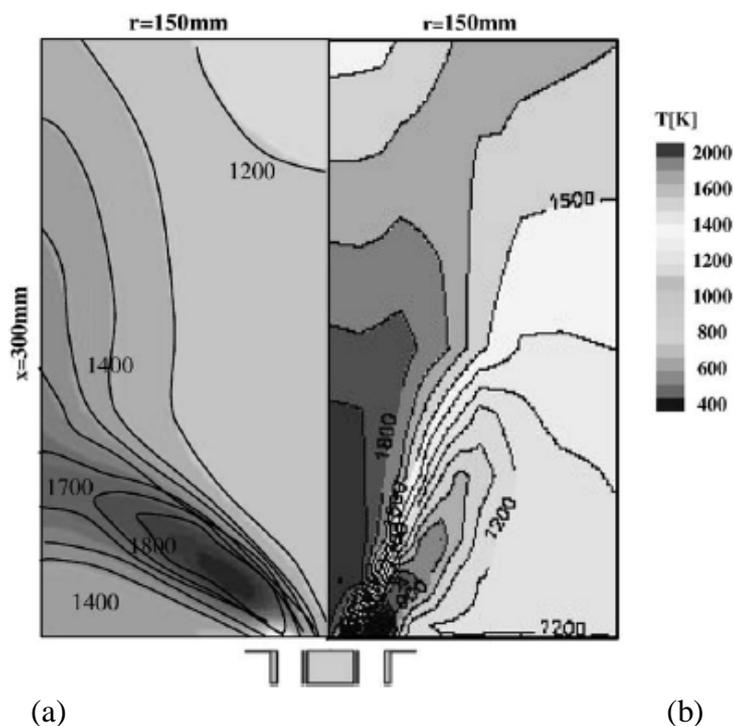


Figura 4.65 – Perfis de velocidade axial obtidos com as diferentes malhas em (a) $x/D=0.16$ (b) $x/D=0.5$ e (c) $x/D=1.16$.

Conforme observado nos gráficos nenhum dos modelos obteve muito boa aproximação, mesmo aplicando rigorosos refinamentos de malha próximo ao queimador. Uma alternativa para a solução é um procedimento apresentado na bibliografia por Frassoldati, 2005. Como já discutido o fenômeno em si é um desafio para solução, Meier, 2000, também relata dificuldades na solução do problema e inclusive indica que códigos CFD não são capazes de resolver tal problema.

O campo de temperaturas apresentado por Meier, 2000, Fig. 4.66, mostra que o jato tende a abrir durante a solução, encontrando nesta forma os menores resíduos. Durante a solução deste caso. Neste trabalho, verificou-se a mesma dificuldade.



(a) (b)
 Figura 4.66 – Campo de temperaturas obtido por Meier, 2000,
 (a) Computacional ; (b) Experimental.

Frassoldati, 2005, simula este combustor utilizando o programa de mecânica dos fluidos computacional FLUENT e sugere uma metodologia para resolver o problema. Observa que ao longo da solução, assim como Meier, 2000a, e Sadiki, 2002, a chama tende a tornar-se com maior diâmetro que o experimental, conforme também foi observado durante este trabalho que esta “abertura” ocorrera, então se segue a seguinte seqüência para solução:

1. Estimar inicialmente o campo aerodinâmico em condições frias, que já apresentam a zona de recirculação central.
2. Injetar ar e gás natural em alta temperatura (1500 [K]), assim como a condição inicial para o domínio no mesmo valor. Os perfis de velocidade devem ser os mesmos para o caso experimental, mesmo sendo conhecido que a vazão mássica é incorreta.
3. Quando estabilizada a solução, ou alcançada a condição critério ($1e-6$), passa-se a uma temperatura mais baixa de injeção dos reagentes até alcançar o valor experimental de 300 K.

A malha que apresentou melhor resultado seguindo esta seqüência foi a malha (G) por isso é utilizada para uma nova modelagem incluindo reação química, modelo de transferência radiativa DTRM e utilizando a seqüência proposta por Frassoldati, 2005. Apenas o esquema de interpolação do termo advectivo “Upwind” garantiu resíduos da ordem de $1e-5$. Primeiramente

foram obtidos os campos calculando a taxa de reação a partir somente do modelo de quebra de vórtices, pois os resultados do modelo misto não foram fisicamente consistentes e com resíduos altos desde o primeiro passo da solução. Os resultados obtidos nos perfis de velocidade são apresentados nas Figs. 4.67 a 4.69.

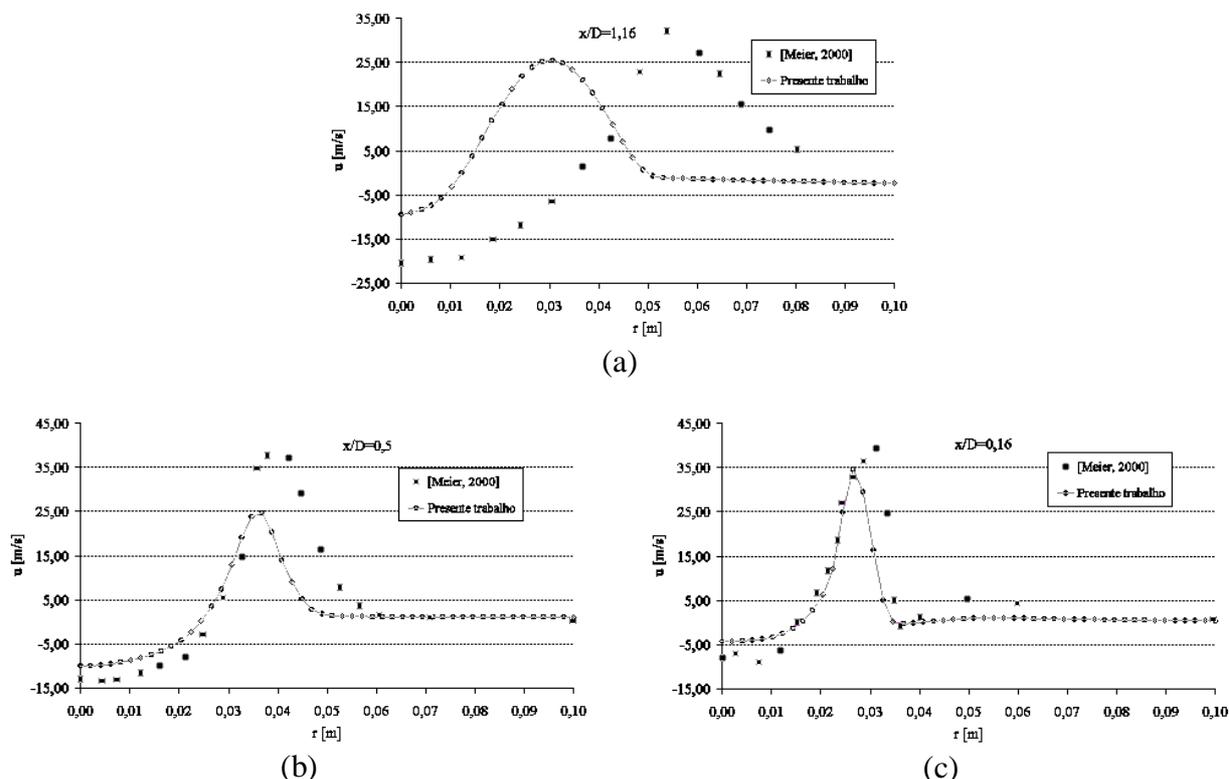


Figura 4.67 – Perfil de velocidade nas posições $x/D=$ (a) 1,16 (b) 0,5 e (c) 0,16.

Observando os gráficos obtidos pode-se verificar que escoamento simulado não alcança os mesmos valores de velocidade da zona de recirculação central que são negativos (gases que retornam a zona do queimador). Isto com certeza é um empecilho para reação no combustível, pois a câmara tende a perder o principal estabilizador da chama que é esta zona de gás quente recirculando próximo do bocal de saída dos reagentes.

Os perfis de velocidade tangencial mostram também, que a simulação aproximou-se razoavelmente do experimento, mas o comportamento do escoamento simulado ainda é diferente, principalmente porque aumenta a altura da pluma dentro da câmara, Figs. 4.67 a 4.69.

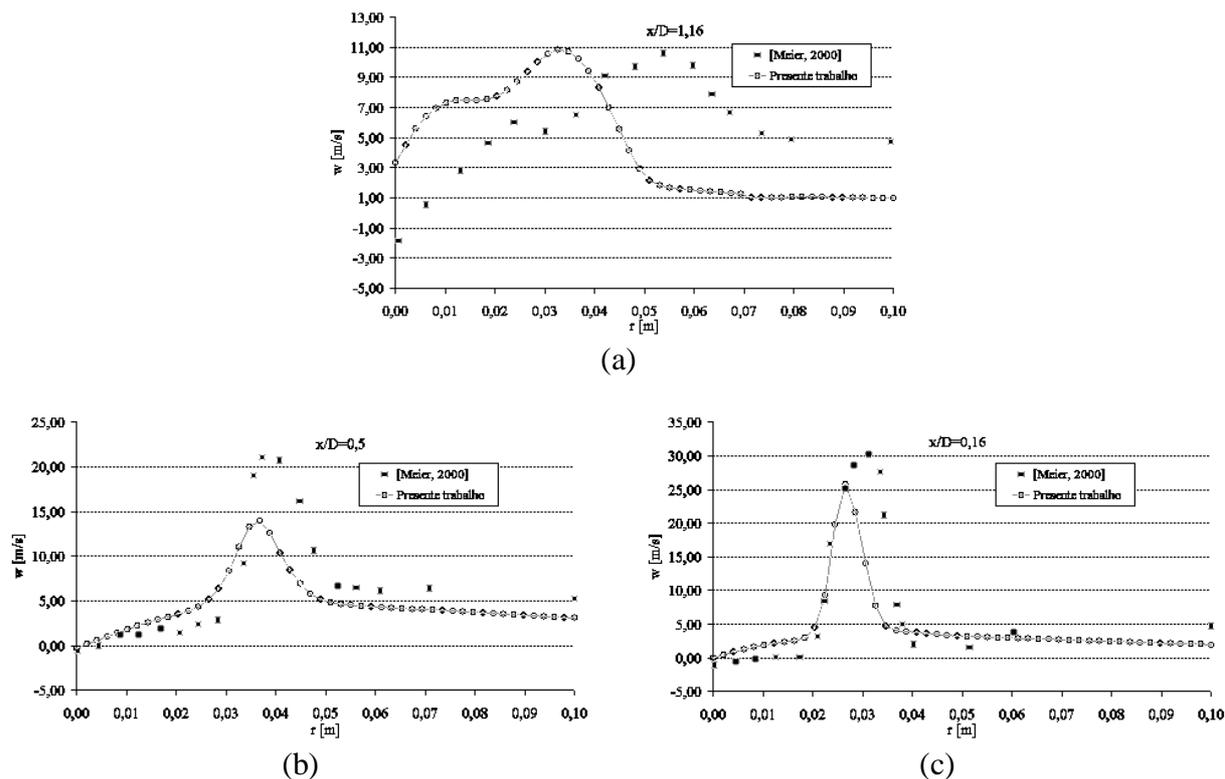


Figura 4.68 – Perfil de velocidade tangencial (a) $x/D=1,16$, (b) $x/D=0,5$ e (c) $x/D=1,16$.

Mesmo a velocidade tangencial aproximando bem os perfis e valores do experimento, verifica-se que quando em x/D igual a 1,16, Fig. 4.68, o escoamento simulado gera um obstáculo para o retorno dos gases quentes, pois tem o pico de velocidades em $r=0,03$ m enquanto que o experimental registra em $r=0,06$ m, isto mostra a barreira que os gases quentes têm de atravessar para a zona de recirculação central.

O comportamento qualitativo dos perfis apresenta a tendência da chama de ter altura maior que a do experimento, Fig. 4.69.

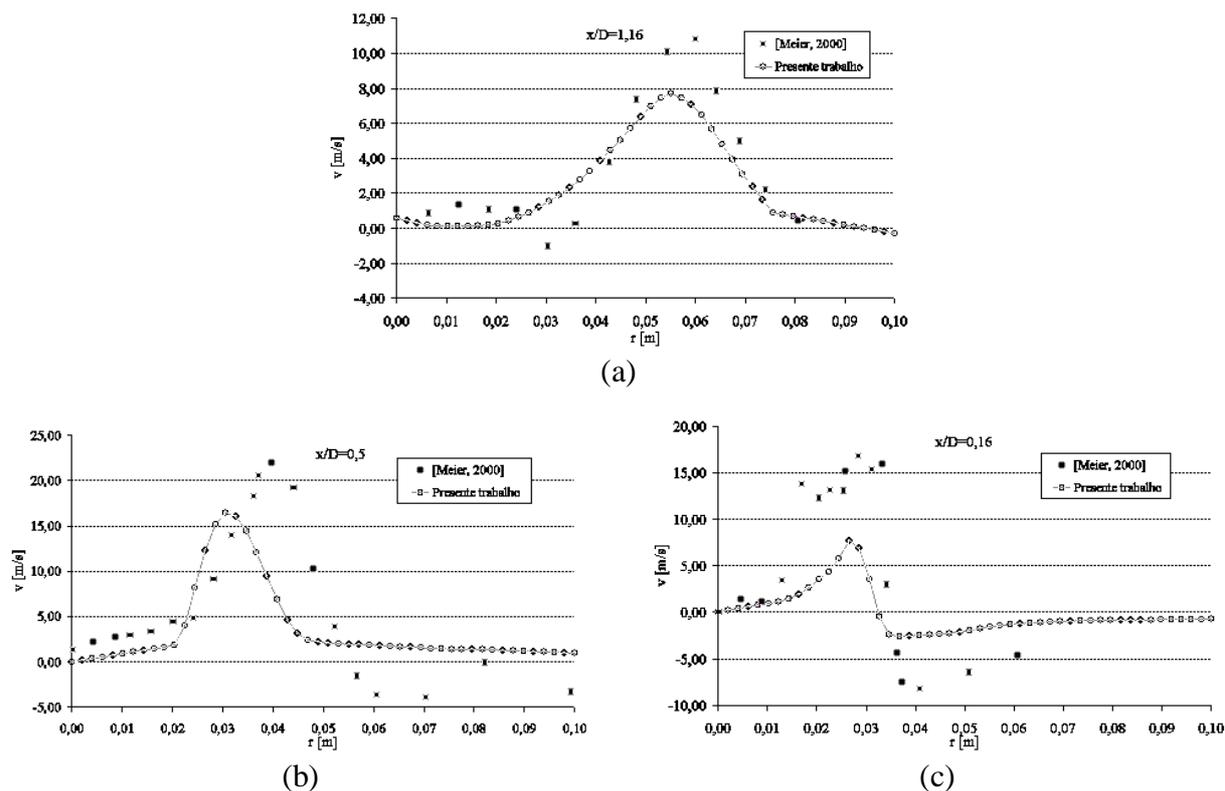


Figura 4.69 - Perfil de velocidade radial (a) $x/D=0,16$ (b) $x/D=0,5$ e (c) $x/D=1,16$.

Conforme comentado sobre a maior altura da pluma, as menores magnitudes da velocidade radial mesmo em $x/D=1,16$, Fig. 4.69 (b) e (c), representa maior transferência de energia para o momento axial e tangencial.

A malha (G) utilizada na estratégia de solução antes descrita propiciou a forma mais alongada da chama, Figs 4.70 e 4.71, como previsto pelo comportamento dos perfis de velocidade. As demais malhas, resolvendo apenas o campo aerodinâmico geraram uma chama de forma aberta, como a solução encontrada por Meier, 2000, com valores muito distantes do experimental.

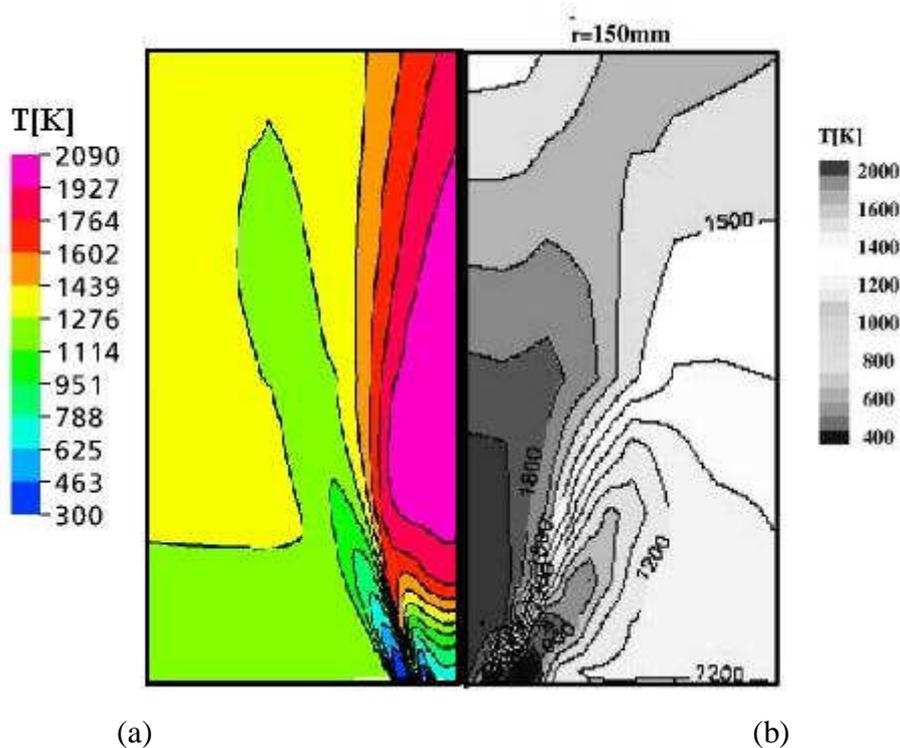


Figura 4.70 – Campos de temperatura: (a) Presente trabalho e (b) experimento, [Meier, 2000].

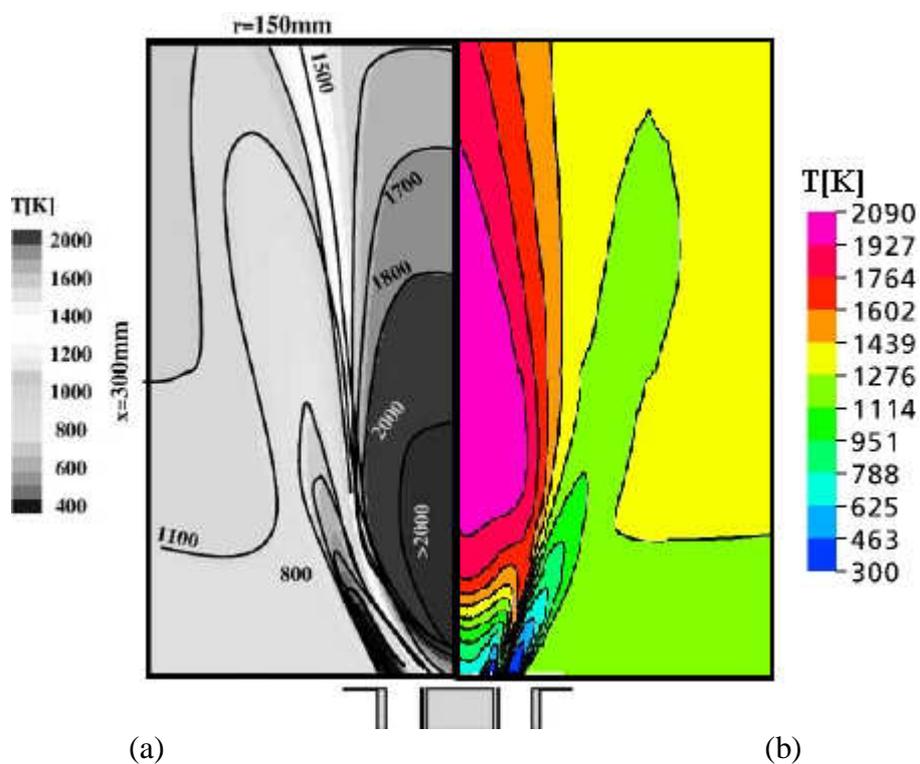


Figura 4.71 – Campos de temperatura: (a) Experimento, [Frassoldati, 2005]; e (b) Presente trabalho.

Os perfis de temperatura apresentam boa aproximação com o experimental, Fig. 4.72.

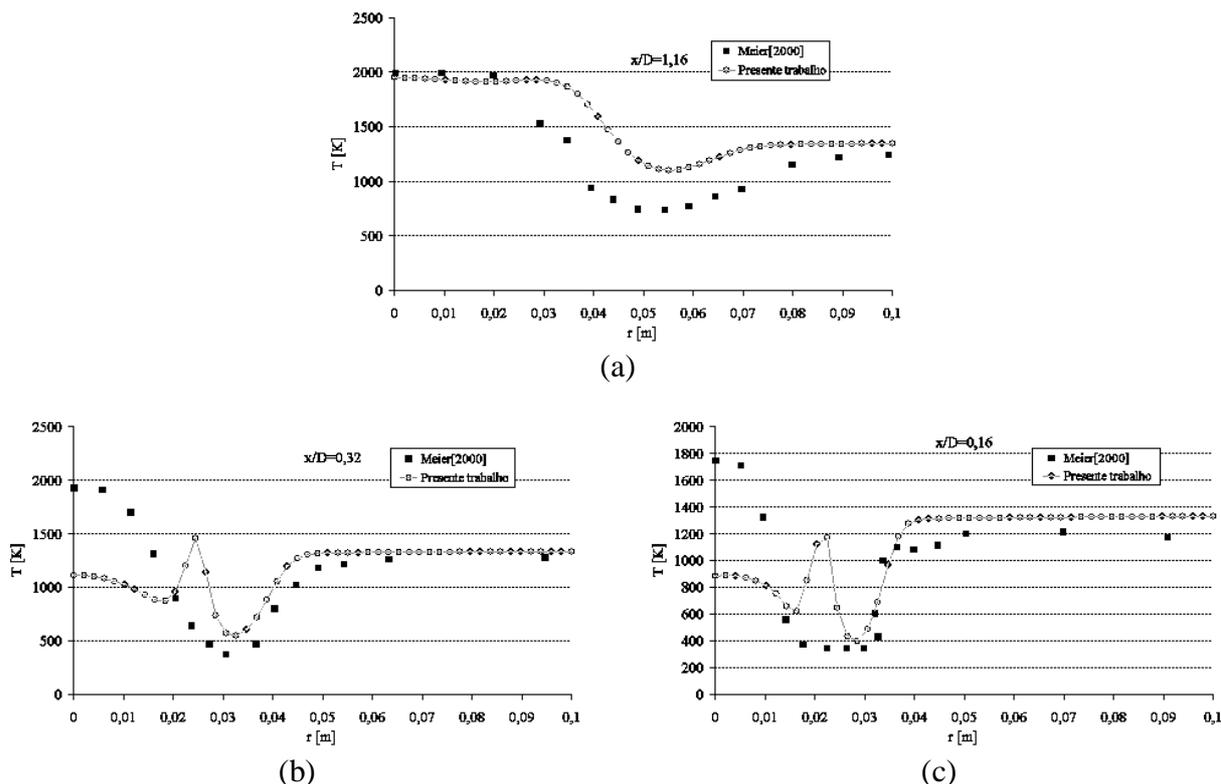


Figura 4.72 – Perfis de temperaturas na zona de reação comparados com o experimental (a) $x/D=1,16$, (b) $x/D=0,5$ e (c) $x/D=0,16$.

As baixas temperaturas na região central do queimador são um obstáculo para a formação principalmente do CO durante o cálculo da reação, esta zona de recirculação central é importante para a estabilização e continuação das reações químicas.

Simulações utilizando o modelo misto, mesmo com a malha refinada e seguindo a seqüência antes descrita, geraram resultados muito ruins que não são comparados com o experimental, mesmo seguindo a seqüência antes apresentada.

O procedimento adotado por Frassoldati, 2005, utilizando o modelo de taxa de reação por quebra de vórtices, foi o único capaz de conseguir uma solução mais próxima do experimental. Como já discutido no capítulo de revisão conceitual o mecanismo de ignição é complexo e pode ser um empecilho para um programa de mecânica dos fluidos computacional, podendo ser a causa das instabilidades observadas durante a solução. A evolução do resíduo normalizado apresenta um salto quando na diminuição de temperatura de entrada dos reagentes de 500 para 400 K durante a seqüência de solução. Isto pode representar uma dependência do fenômeno quanto à mecânica de ignição, como a caracterização do escoamento numa região de instabilidade do diagrama de Damkohler Reynolds apresentado no primeiro capítulo.

A intenção de simular um combustor pode não se concretizar pelo simples fato de o Engenheiro definir um campo inicial para o domínio com as mesmas condições de contorno imaginadas ou projetadas para o experimento.

O modelo de cálculo da taxa de reação por dissipação de vórtices neste caso obtém boa aproximação, pois ele se baseia na mistura turbulenta dos componentes. A fraca aproximação deste modelo próximo ao queimador mostra sua falha no cálculo do avanço da reação em regiões onde um modelo baseado na cinética química poderia ter melhor aproximação. O consumo do metano, por exemplo, mostra que o modelo consome quase todo combustível somente na zona de maior turbilhamento da câmara, Fig. 4.73, enquanto que em cotas mais baixas quase não há reação. Este fato deve-se as corrente fluidas ainda terem pouca interação nestes pontos ainda com pouca mistura dos reagentes.

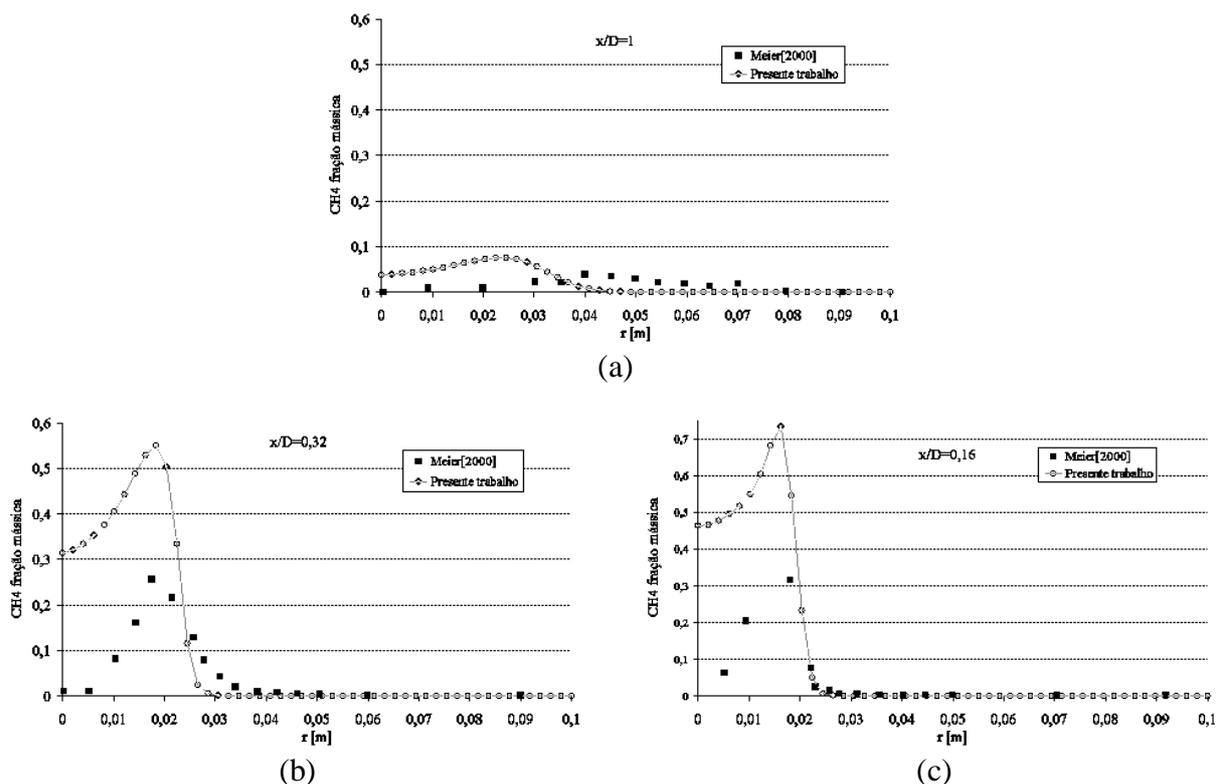


Figura 4.73 – Perfil de fração mássica de metano comparado com o experimental nas posições (a) $x/D=1$, (b) $x/D=0,32$ e (c) $x/D=0,16$.

Os perfis de CO mostram mais claramente a dependência o modelo de taxa de reação utilizado com a mistura dos reagentes. Na Fig. 4.74 observa-se picos de fração mássica nas posições onde as correntes fluidas estão em contato. Em contrapartida o dado experimental mostra baixa concentração neste local. A menor quantidade do monóxido de carbono que o experimental deve-se também fortemente ao fato da oxidação do CO ser dependente da

temperatura e com o modelo praticamente calculando reação por taxa de mistura, então a formação deste composto fica prejudicada, assim como a pirólise do metano que é um fenômeno considerável neste processo. Nas regiões de menor fração mássica poderá se evidenciar uma formação de dióxido de carbono que também é explicação para esta diferença, entretanto o experimento mostra que há uma formação de CO acima do calculado. Portanto o modelo está calculando uma reação teoricamente bem realizada, enquanto que o experimental mostra que a combustão na fornalha é incompleta e provavelmente deve ter o monóxido de carbono queimado em cotas superiores onde se encontram gases mais quentes e conteúdo de oxigênio.

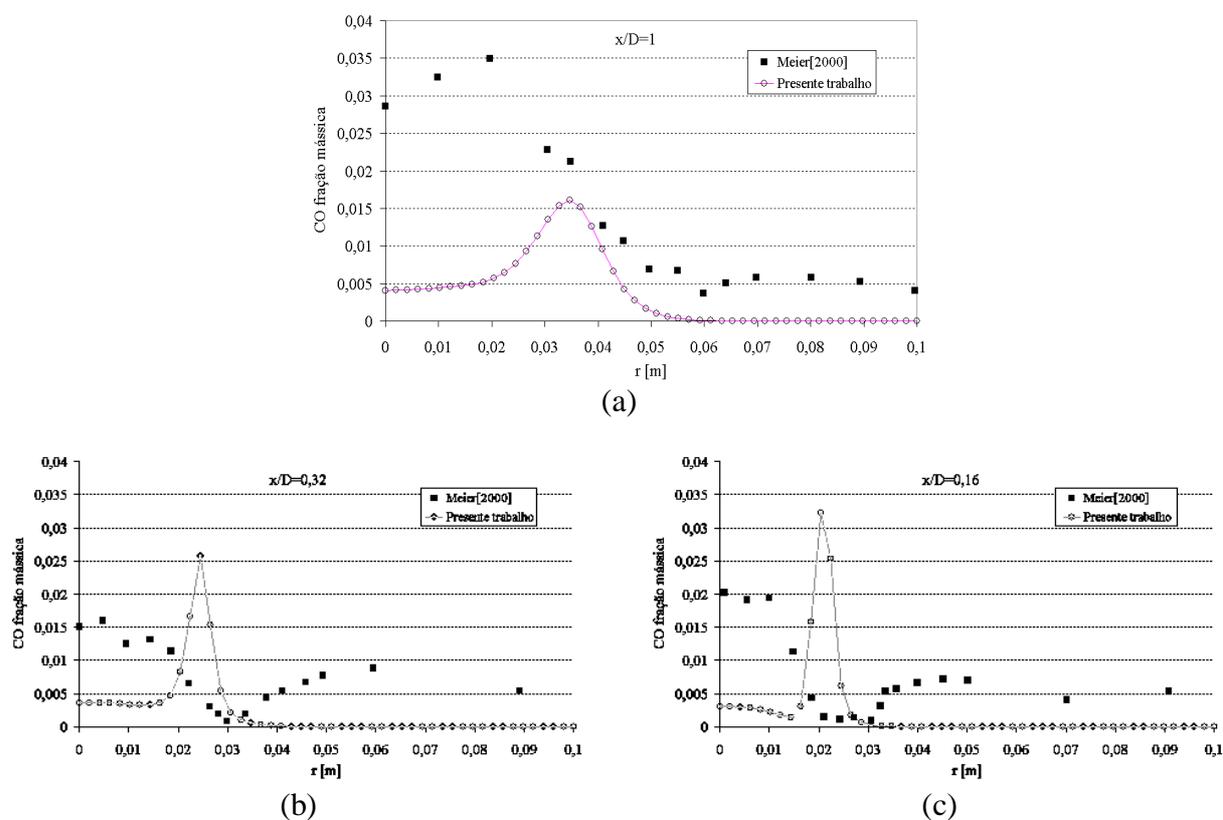


Figura 4.74 – Perfil de fração mássica de metano comparado com o experimental nas posições (a) $x/D=0,16$, (b) $x/D=0,32$ e (c) $x/D=1$.

Assim como os perfis de monóxido de carbono o perfil calculado da fração mássica de dióxido de carbono apresenta diferença na região próxima ao bocal do queimador, devido a baixa mistura entre as correntes ainda em baixa temperatura. As baixas temperaturas calculadas na zona central também influenciam a diferença nos perfis calculado e experimental, Fig. 4.75.

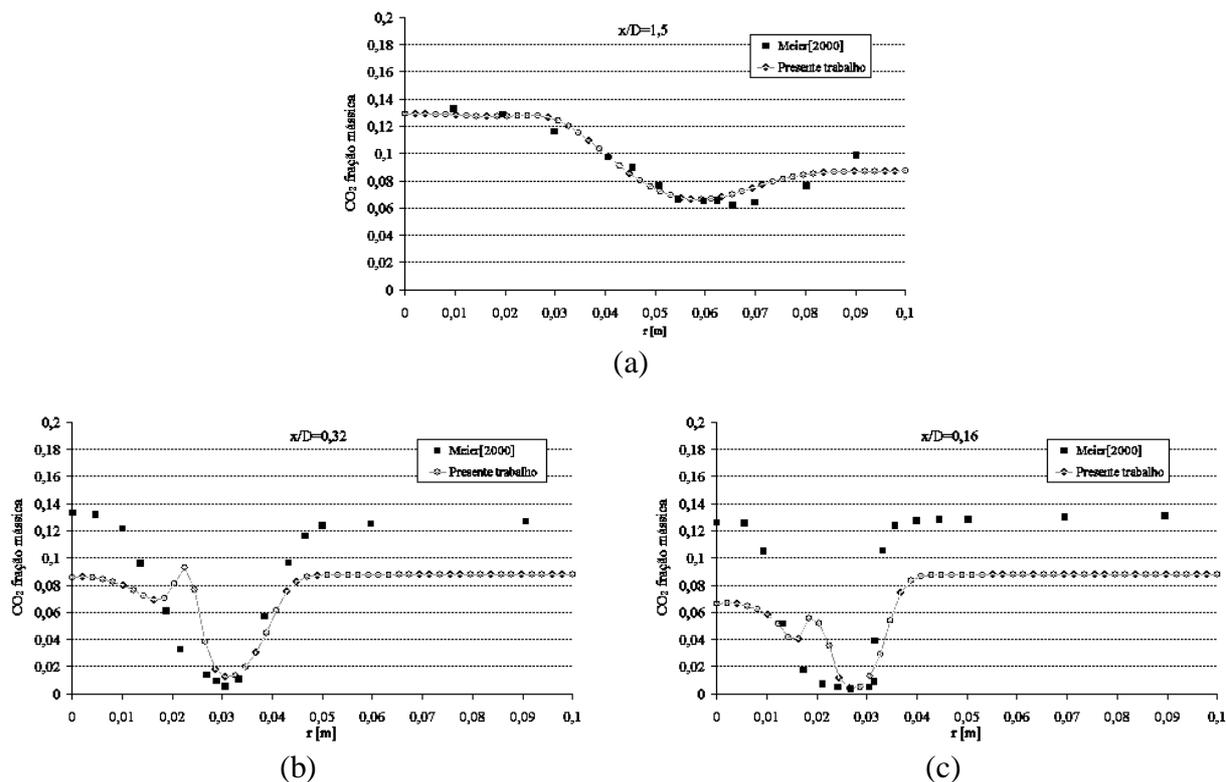


Figura 4.75 – Perfil de fração mássica de dióxido de carbono comparado com o experimental nas posições (a) $x/D=1,5$, (b) $x/D=0,32$ e (c) $x/D=0,16$.

O perfil na posição mais distante do queimador mostra que com a melhor mistura dos componentes pela evolução do escoamento o modelo consegue aproximar bem as medições experimentais.

Os perfis de oxigênio mostram, assim como o perfil calculado de metano, que não ocorre reação no modelo na região próxima ao queimador visto que as maiores frações estão distantes do eixo do queimador, mostrando que a corrente de ar não penetrou na de gás metano, Fig. 4.76.

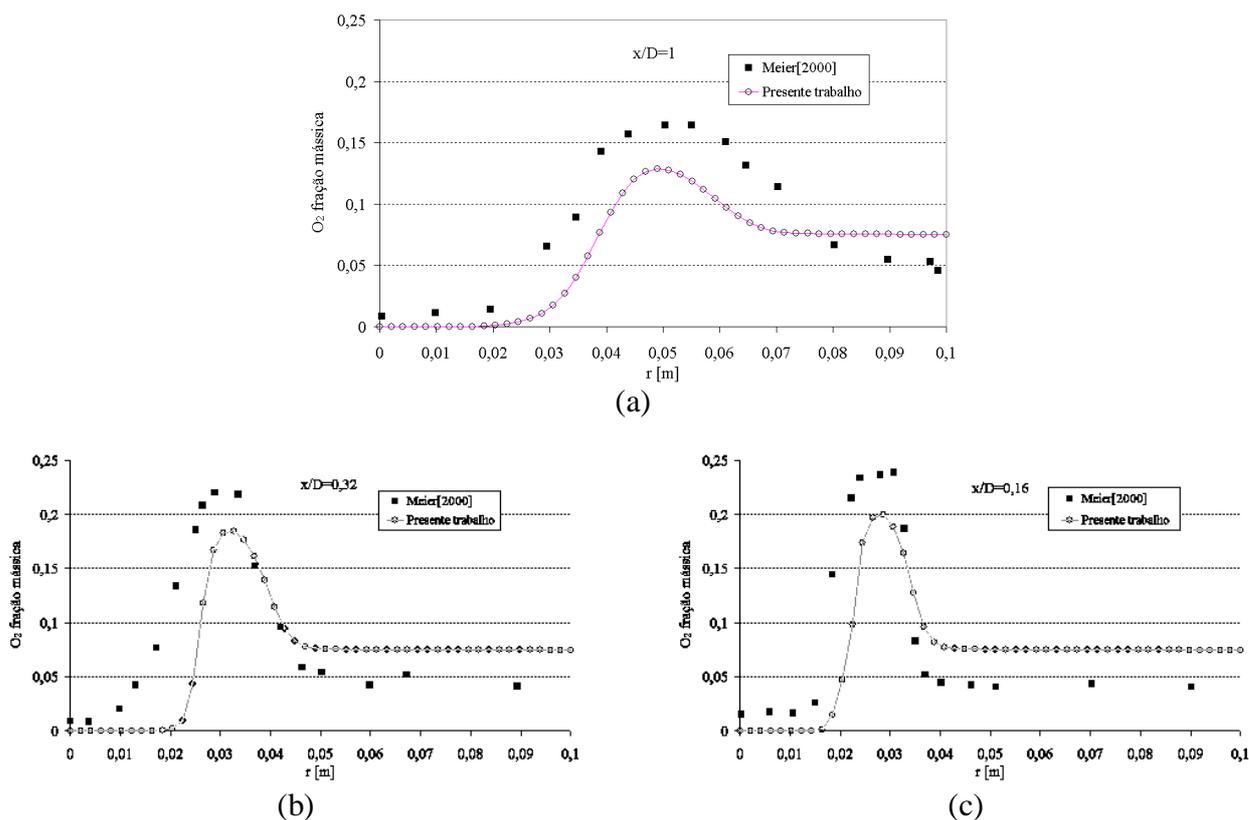


Figura 4.76 – Perfil de fração mássica de oxigênio comparado com o experimental nas posições (a) $x/D=0,16$, (b) $x/D=0,32$ e (c) $x/D=0,16$.

Neste caso simulado acredita-se que o modelo de radiação não atua de forma tão forte na transferência de energia como o primeiro caso, pois a diferença da temperatura alcançada pela chama e a parede da fornalha é 43% menor do que o caso de Garreton e Simonin, 1994. Além disso, por ser uma saída anular estreita, a condição de saída não é tão influente como a do primeiro caso. Mas com certeza a radiação influi na transferência de energia, conforme se visualiza na Fig. 4.77. Para economia de tempo computacional indica-se então em casos similares primeiramente tentar a simulação sem a radiação, deixando este cálculo para um refino da solução.

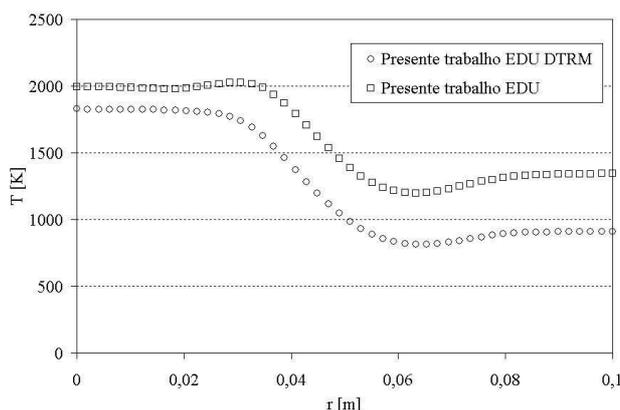


Figura 4.77 – Gráfico comparativo entre o modelo com e sem cálculo radiativo em $x/D=1.5$.

4.4. DISCUSSÕES E CONCLUSÕES SOBRE AS ANÁLISES DOS CASOS

A análise dos diferentes resultados numéricos dos estudos de caso permite concluir que todos os modelos fornecem comportamentos realísticos do fenômeno, pelo menos qualitativamente. Quantitativamente uma análise do objetivo que se deseja conhecer deve ser feita para melhor modelar o problema, especificando alterações na modelagem, refino na discretização ou uma estratégia a aplicar. Os modelos forneceram resultados aceitáveis para a análise do processo de combustão. O uso de um erro médio na avaliação dos resultados não é uma ferramenta precisa para o Engenheiro, pois não visualiza com ênfase as propriedades específicas do escoamento e dos fenômenos envolvidos na combustão. Entretanto, fornece um bom critério para comparar dados experimentais e dados numéricos em escoamentos complexos. O esquema de interpolação do termo advectivo mostrou-se muito importante, principalmente no segundo caso, mostrando uma dependência da solução quando observando os resíduos normalizados durante a solução do sistema. No primeiro caso a solução foi independente.

Nenhum dos modelos disponíveis no programa CFX-ANSYS tem aplicabilidade universal. Não existe uma indicação prioritária que diga ao usuário que escolha deve ser feita. Acredita-se que o Engenheiro deva testar diferentes modelos de turbulência e reação em um caso particular e extrair dali informações relevantes para sua solução. Obviamente esta conclusão é genérica e pode ser estendida para todos os códigos computacionais comerciais, visto que os modelos são comuns entre estes programas.

4.5. ESTUDO DE CASO BASEADO NAS ANÁLISES FEITAS

A indústria de beneficiamento mineral utiliza, dentre os principais equipamentos, fornos rotativos de secagem. As aplicações dos fornos rotativos neste ramo são a secagem de areia para processos de mistura ou a fabricação do cimento, a calcinação de carbonato de cálcio também para a indústria do cimento e de gesso e a secagem e aquecimento de material pétreo para a mistura com cimento asfáltico gerando o concreto betuminoso usinado a quente, CBUQ, Fig. 4.78. Em usinas de asfalto o material pétreo virgem é dosado e transportado (1) para o sistema de aquecimento e secagem (2), depois o material é então misturado ao ligante betuminoso num misturador (3) e transportado para aplicação no pavimento.

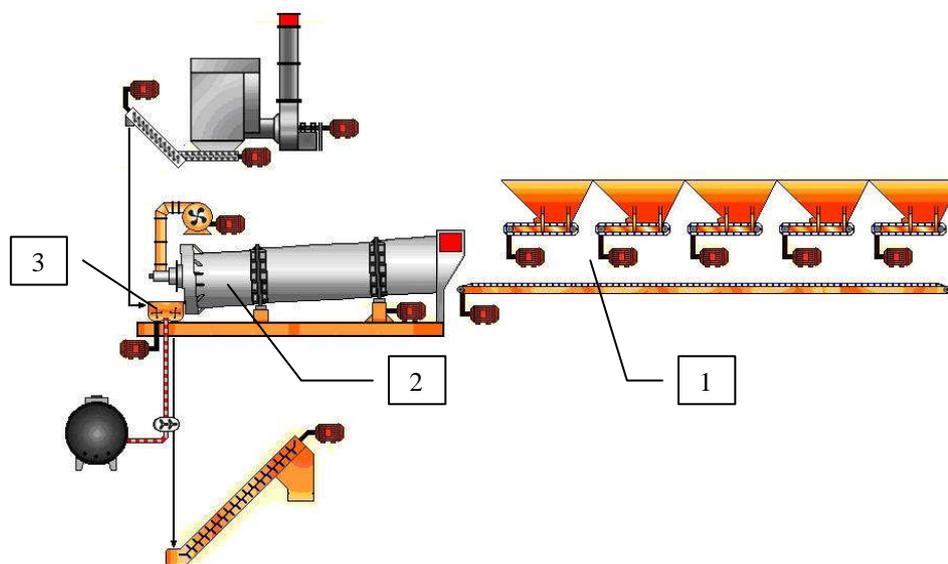


Figura 4.78 – Esquema básico de funcionamento de uma usina de asfalto, [CIBER, 2007].

Estes equipamentos são normalmente de grande porte, secando toneladas de material pétreo por hora. As capacidades podem variar da ordem de 10 a 400 toneladas por hora. A fonte de energia destes equipamentos na maioria das vezes é um queimador concêntrico ao forno gerando gases quentes para o processo de secagem. A Fig. 4.79 mostra a agitação do material por cascateamento que garante a troca de energia entre gases e sólidos.



Figura 4.79- Imagem da cascata gerada pela rotação de um secador rotativo, [CIBER, 2007].

O fornecimento de combustível de plantas industriais como as antes citadas são variadas, mas se pode afirmar que quase a totalidade das plantas utiliza combustíveis fósseis como fontes de energia e principalmente na América do Sul utilizam-se óleos pesados e gás natural. Os óleos pesados são uma fonte muito procurada pelo baixo custo de aquisição e a disponibilidade pelas refinarias que possuem excesso de rejeitos do refino de hidrocarbonetos mais nobres como gasolina ou óleo diesel. O gás natural é uma fonte ainda não tão disponível, mas investimentos governamentais vêm trazendo pontos de fornecimento cada vez próximos de unidades industriais. O gás natural tem como vantagem sobre os óleos pesados o fato de ser ecologicamente bem menos agressivo, custo baixo e a armazenagem, que não é necessária. A América do sul apresenta reservas consideráveis deste combustível em países como Bolívia, Argentina, Brasil e Venezuela.

Este trabalho foca a sugestão para a modelagem do processo de combustão em secadores rotativos de unidades produtoras de CBUQ. Trata-se de um cilindro construído por chapas de aço (1), contendo em seu contorno dois anéis de rolamento (2), um sistema motor que garante a rotação (3), Fig.4.80, câmaras de aspiração e combustão e um queimador com entrada de ar atmosférico, Fig. 4.81.

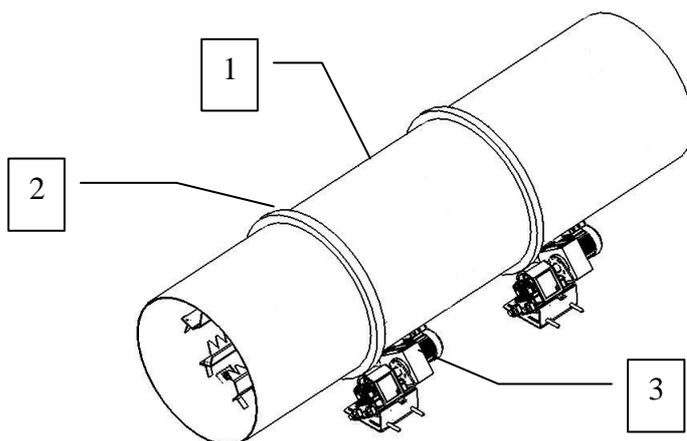


Figura 4.80 – Diagrama de funcionamento de um secador rotativo.



Figura 4.81 – Queimador de um secador rotativo.

Usualmente estes equipamentos apresentam 3 zonas térmicas características, Fig. 4.82. Primeiro o aumento de temperatura com o material encontrando a corrente de gases quentes; segundo, uma zona de temperatura uniforme caracterizada pela evaporação da água contida no material em estado virgem; e a última zona, que se caracteriza pela elevação de temperatura final do material pela corrente de gases quentes da fornalha e pela radiação direta do queimador presente.

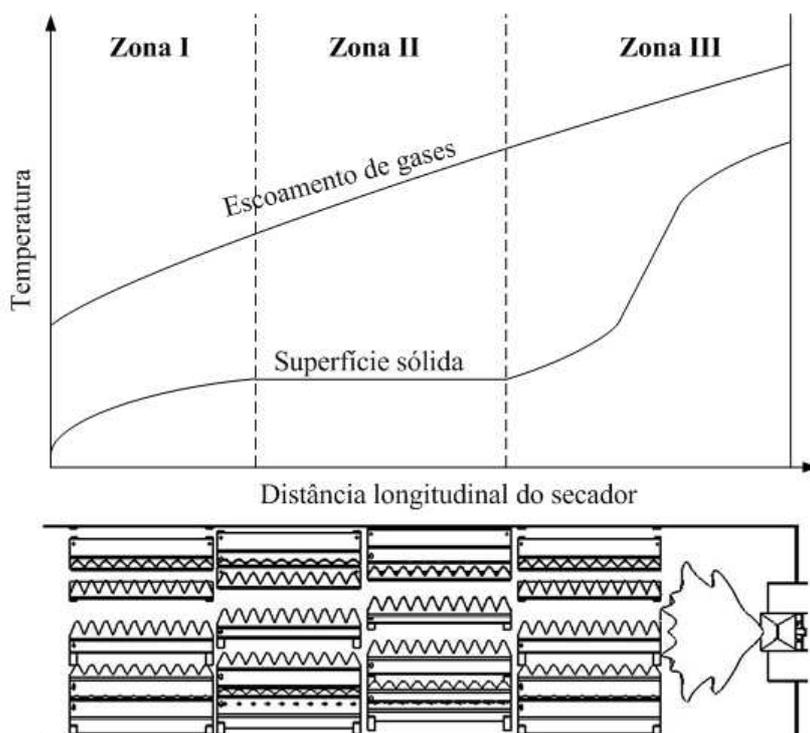


Figura 4.82 – Gráfico demonstrativo da evolução da temperatura num secador.

Normalmente estes equipamentos não trabalham com isolamento externo na casca e nem mesmo nas câmaras, atingindo temperaturas da ordem de 300 K nas paredes, conforme medições experimentais em equipamentos do tipo, Fig. 4.83.

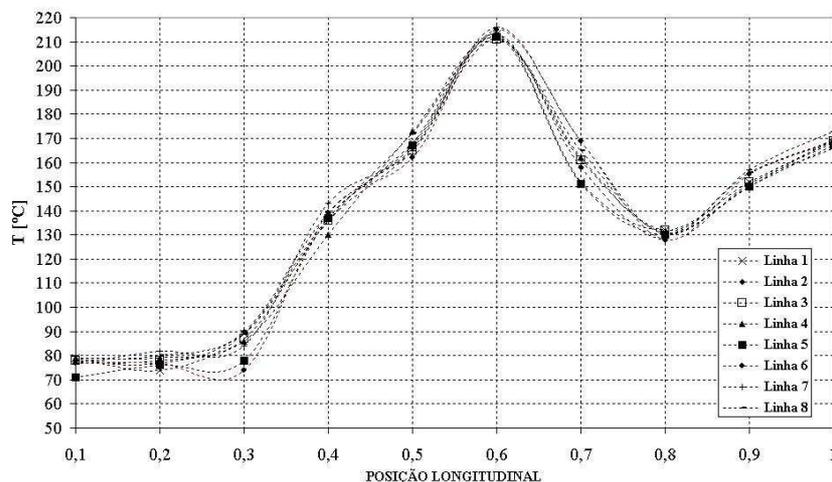


Figura 4.83 – Gráfico de temperaturas da parede cilíndrica de um secador rotativo, [CIBER, 2007].

A baixa temperatura da zona final, comparada com a central, é devido ao fato desta região conter um tipo de aleta que isola a câmara de combustão, sendo a região em que o

material pétreo recebe maior fluxo de energia através do modo da transmissão do calor por radiação. Nas demais zonas o material se aquece e eleva sua temperatura por convecção.

Um exemplo específico de queimador de sistemas como o discutido neste trabalho é aquele em que utiliza dois combustíveis, ora gás natural ora óleo combustível. Dados experimentais de queimadores deste tipo são difíceis de encontrar, por se tratar de aplicações industriais com interesses econômicos envolvidos. Alguns destes queimadores são apresentados na Fig. 4.84.

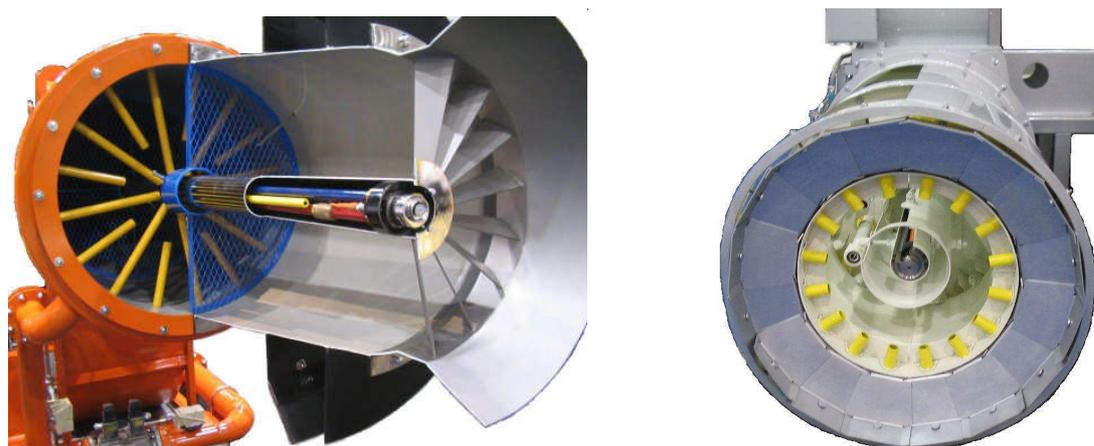


Figura 4.84 – Queimadores industriais para usinas de asfalto.

Uma ferramenta muito utilizada para estabilização da chama nestes queimadores é a presença de uma peça refratária (cerâmica ou metal) logo a pós a saída do queimador.

A maioria dos queimadores apresenta a geometria conforme a Fig. 4.85. No centro um bico nebulizador de óleo, concêntrico a ele uma entrada de ar com velocidade tangencial, uma entrada anular ou tubular de gás natural e externamente um duto de ar com *swir'* regulável. A geometria considerada no caso ilustrado nesta seção trabalha com um nebulizador tipo jato oco, com ar atmosférico como fluido auxiliar (1) (em caso de queima de gás natural esta entrada injeta somente ar para o sistema, com alta velocidade angular); Uma entrada de gás anular, externa ao nebulizador (2) e um escoamento de ar com velocidade angular variável entra por um duto externo ao conjunto (3), que tem a função de modificar a geometria da chama dentro do forno.

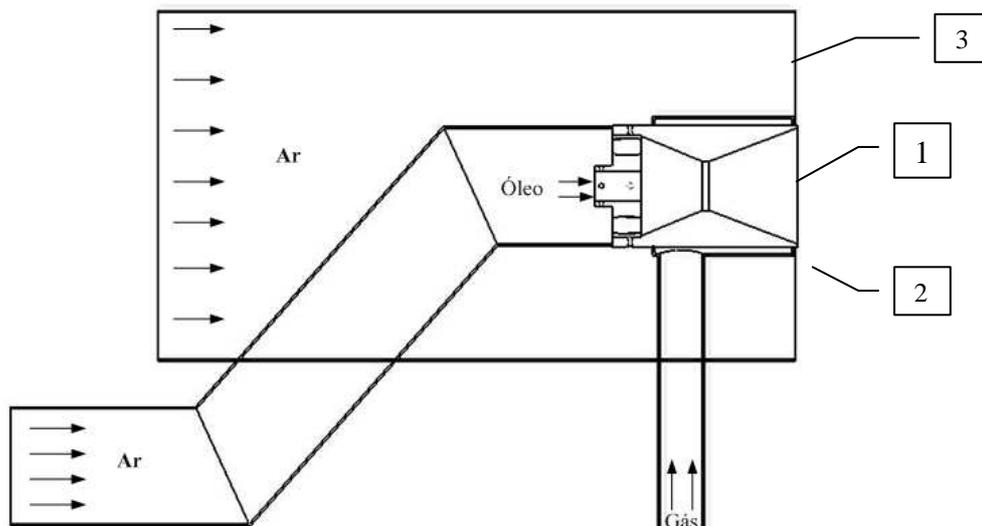


Figura 4.85 – Representação da geometria de interesse no problema.

A função do bico nebulizador é criar um filme líquido muito fino gerando gotas o quanto pequenas possíveis, 4.86. Para uma melhor evaporação e melhor queima do hidrocarboneto combustível, este trabalho não considera esta condição. No caso discutido um estator muito forte garante que o fluido auxiliar do nebulizador, o ar, tenha alta velocidade angular para a criação do filme líquido.

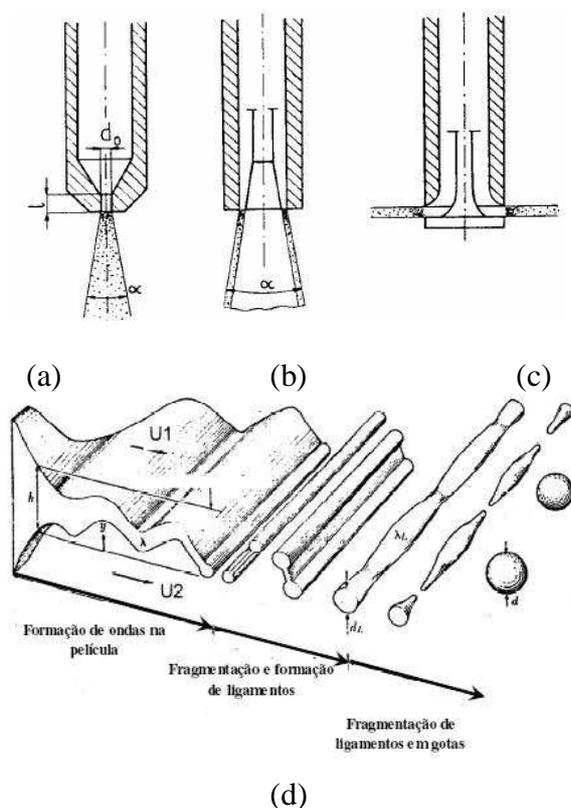


Figura 4.86 – Tipos básicos de nebulizadores (a) Jato maciço; (b) Jato oco; (c) Jato perpendicular; (d) Representação da formação das gotas dum filme líquido [IPT, 2000].

Não é discutida a característica do nebulizador e nem da combustão de líquidos, apenas a modelagem para combustão de gás. Este trabalho comenta especificamente sobre a modelagem de uma câmara contendo um queimador com uma entrada de ar em *swirl* central, uma entrada de gás natural concêntrica externa e uma entrada de ar anular mais externa, Fig. 4.85, com uma capacidade de 4 MW. A entrada central de ar gera um escoamento com *swirl* considerável da ordem de 0,3 a 0,6. Assim como no caso de Meier, 2000, deve-se encontrar problemas para a estabilização do escoamento e variações da forma do jato na câmara gerando resíduos da ordem de $1e-4$, mas uma menor dificuldade na formação da zona central de recirculação, pois o escoamento neste tipo de nebulizador caracteriza-se por esta formação sem haver obstáculo físico ao escoamento. O escoamento no duto externo de ar também pode evitar a abertura da chama como visto no caso de Meier, 2000.

O modelo da câmara de combustão deve representar a geometria da Fig. 4.87. Trata-se de um cilindro com um comprimento de 5 m e um diâmetro 1,2 m, com a saída pela câmara de aspiração do equipamento com uma área semicircular de raio 0,5 m. O diâmetro externo do queimador é de 0,4 m. O duto externo ao bico nebulizador é a entrada de gás que tem diâmetro interno de 0,1m e externo de 0,112 m. Para alcançar a potência demandada pelo processo a vazão de gás natural é de 0,055 kg/s. A entrada de ar é dada pela vazão mássica de 0,715 kg/s divididos entre o bico nebulizador e o duto mais externo do queimador.

A condição das paredes da câmara de combustão é de temperatura média prescrita no valor de 300 K. Em operação a chama tem à frente uma cascata densa de material que já está a uma determinada temperatura e absorve energia da chama por convecção e radiação. O cálculo da troca térmica, entre os gases quentes da chama e o material pétreo pode ser feito iterativamente com a solução do escoamento fluido e transporte de massa, entretanto é uma tarefa não discutida neste trabalho. Syahrul, 2002, mostra uma sugestão de modelo de cálculo térmico a partir do balanço das diferentes zonas de um secador.

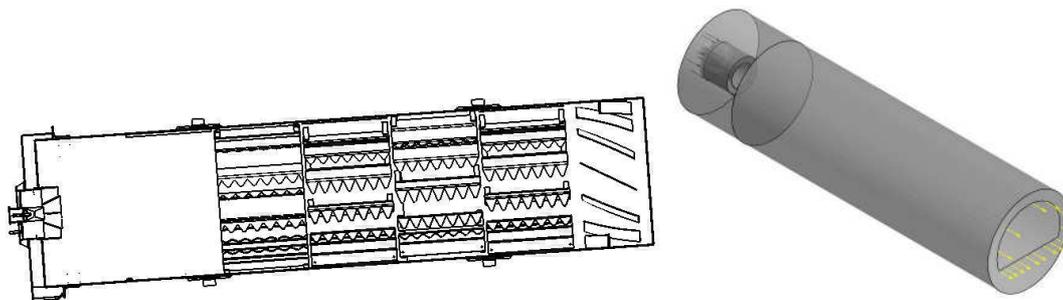


Figura 4.87 – Modelo da câmara de combustão a ser calculada.

A sugestão da modelagem na saída é uma condição de pressão nula em relação ao domínio, garantindo conservação de massa e evitando contra fluxos. A condição térmica na saída deve ser a de temperatura local, como a utilizada no primeiro caso. Como a distância da chama a saída do domínio é muito grande, pode-se então dizer que o efeito da condição não afetará o cálculo do escoamento reativo como foi visto no cálculo do caso de Garreton e Simonin, 1994.

O modelo de taxa de reação a ser utilizado neste exemplo num primeiro passo deve ser o modelo de quebra de vórtices para a visualização do comportamento do escoamento já com o campo de temperaturas resolvido. Como o *swirl* em questão é bem mais baixo que o experimentado por Meier, 2000, acredita-se numa boa solução pelo modelo misto, entretanto utilizando inicialmente o campo resolvido pelo modelo de quebra de vórtices.

Um estudo básico do escoamento em geometria similar a esta, CIBER, 2007, mostrou que existe um campo de velocidades tangenciais muito altas no interior do nebulizador e que o escoamento apenas de ar já caracterizou uma zona de recirculação bem definida.

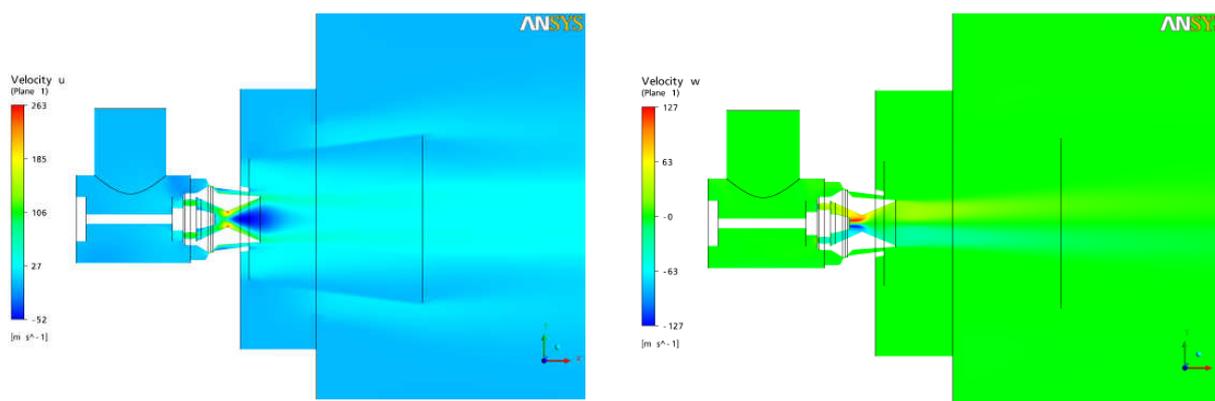


Figura 4.88 – Campos de velocidade (a) axial e (b) tangencial, de uma geometria similar a modelada nesta seção, [CIBER, 2007].

O cálculo da radiação é indispensável para correta avaliação do modelo, vista a diferença entre as temperaturas alcançadas pelas chamas de metano (~ 2000 [K]) e a parede da câmara de combustão (~ 300 [K]). Entretanto um primeiro passo deve ser dado sem o cálculo do termo radiativo para economia de tempo e avaliação do escoamento já com o campo de temperaturas resolvido.

O procedimento sugerido para o caso é descrito a seguir:

1. Cálculo apenas do escoamento na câmara, sem reação, verificação de máximas velocidades, mistura de componentes, visualização do perfil de Damkohler na câmara.
2. Avaliação dos modelos turbulentos $k - \varepsilon$, SST e SSG.
3. Avaliação do refino de malha na região do nebulizador e entrada de gás.

4. Cálculo multicomponente reativo na câmara com o modelo de cálculo da taxa de reação por quebra de vórtices com o esquema *Upwind* de interpolação do termo advectivo. Utilizam-se as temperaturas de trabalho do queimador (cerca de 323 K) nas condições de contorno de entrada.
5. Cálculo multicomponente reativo na câmara com o modelo de cálculo da taxa de reação misto também com o esquema *Upwind* de interpolação do termo advectivo. Utilizam-se as temperaturas de trabalho do queimador (cerca de 323 K) nas condições de contorno de entrada.
6. Caso os perfis de temperaturas e as concentrações tenham sido semelhantes nos dois passos anteriores, seguir com o modelo misto para o passo 8, se não o 7.
7. Caso o escoamento não tenha reagido com o modelo misto e sim com o modelo de quebra de vórtices, então recalculer o problema conforme passo 3 e 4, mas iniciando com temperatura de injeção dos reagentes e domínio da câmara em 1300 K, baixar 100 K a cada solução que alcançar ao critério de convergência desejado ($1e-5 \sim 1e-6$).
8. Utilizando o campo solução do passo 6 (ou 7), verificar a sensibilidade do campo de temperatura na região mais próxima do queimador a condição térmica de saída, calculando o termo radiativo. Caso haja modificações consideráveis da ordem de mais de 10%, impor uma temperatura média da mistura calculada na câmara como condição de contorno na condição de saída.

A modelagem de câmaras e queimadores industriais não é um problema fácil a ser resolvido. Os estudos de casos simples mostram que códigos computacionais comerciais não são ferramentas específicas para estas funções, mas trazem alternativas e modelos que se bem interpretados são ferramentas de projeto poderosas nas mãos dos Engenheiros.

A solução do escoamento reativo numa câmara como esta pode levar muito tempo e mesmo com os resultados em mãos será necessária a experimentação para verificar se a solução encontrou bons resultados.

5. CONCLUSÕES FINAIS E PROPOSTAS PARA CONTINUAÇÃO DO TRABALHO

5.1. CONCLUSÕES

O presente trabalho realizou uma série de simulações numéricas em duas câmaras de combustão. Os dois casos disponibilizam dados experimentais, possibilitando comparações com as simulações realizadas. As modelagens implementadas nas câmaras mostraram bons resultados e a análise dos diferentes modelos de turbulência, radiação e de taxa de reação química traz conhecimento da simulação da combustão utilizando mecânica dos fluidos computacional.

A discretização dos domínios calculados em três dimensões, com as grandezas reais do problema mostra que o custo computacional é alto e que além dos problemas relacionados com os modelos e turbulência, radiação e taxa de reação química, condições de contorno ainda agregam-se. Aos problemas de topologia de malha e não simplesmente ao número de nós.

O primeiro caso simulado de acordo com o experimento realizado por Garréton e Simonin, 1994, teve importância na visualização dos diferentes resultados gerados pelos modelos de turbulência utilizados. O modelo $k - \varepsilon$ apresentou melhor robustez e como a literatura mostra ainda pode ser um bom modelo inicial na modelagem de câmaras cilíndricas, mesmo com jatos livres.

O modelo misto de cálculo da taxa de reação química *Eddy-Break-Up* e *Finite Rate Chemistr'* (Arrhenius), mostrou bom desempenho. As diferenças nas concentrações encontradas nos diferentes perfis analisados podem ser atribuídas a parâmetros cinéticos químicos específicos, que este trabalho não teve por objetivo detalhar.

A radiação interfere consideravelmente nos resultados da câmara, especialmente pela modelagem do problema sem definir uma temperatura prescrita na saída, além de observar-se uma grande diferença entre a temperatura atingida pelo escoamento e a parede. O cálculo da transferência de calor por radiação no modelo apresenta diferenças consideráveis, conforme a Fig. 5.1. Pode-se concluir que o modelo atingiu resultados satisfatórios, aproximando bem os perfis experimentais. Entretanto, a condição de saída é problemática, e pode ser solucionada através da prescrição de uma temperatura calculada a partir da média da mistura na câmara.

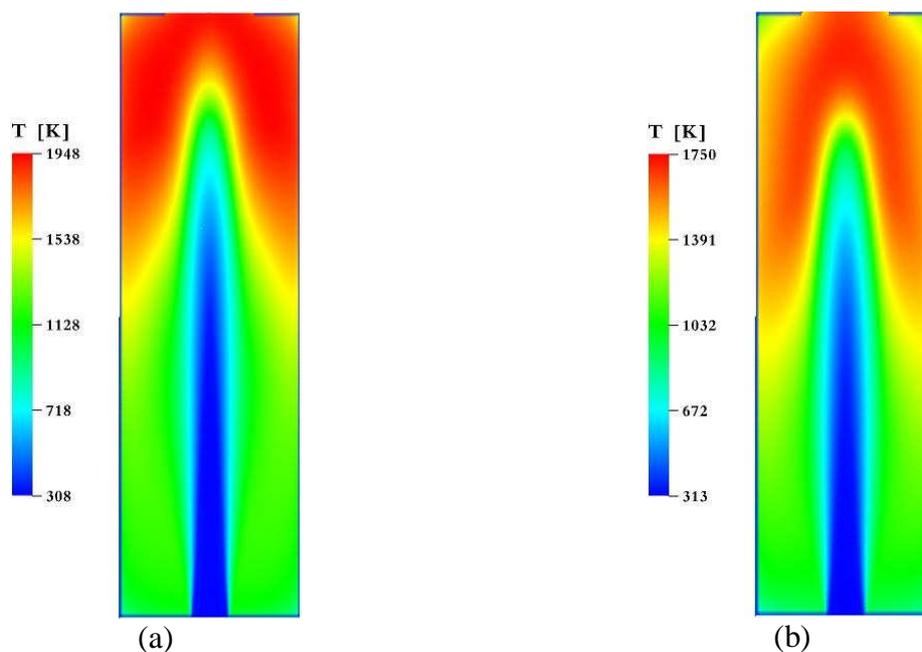


Figura 5.1 – Campo de temperaturas calculado (a) com radiação (b) sem radiação.

As análises feitas sobre a modelagem realizada no caso de Garreton e Simonin, 1994, aplicam-se muito bem em casos de queimadores de jatos concêntricos e caldeiras fumotubulares. A característica do escoamento desta fornalha é similar a várias outras aplicações industriais. Portanto os resultados e análises deste caso são uma ferramenta importante para o início de um estudo de caso semelhante, por exemplo, em caldeiras fumotubulares, Fig. 5.2.

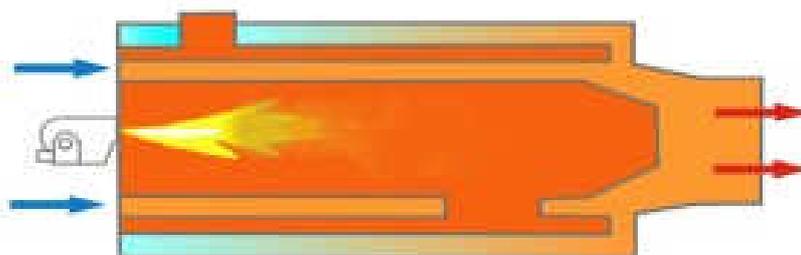


Figura 5.2 – Caldeira fumotubular em corte.

O segundo caso simulado neste trabalho apresentou um escoamento diferente do primeiro caso, inclusive a característica de chama, apresentando menor comprimento com maior diâmetro. Trata-se de um queimador similar ao aplicado em turbinas a gás e tem muita similaridade com queimadores industriais. O *swirl* imposto no escoamento garante altas taxas de mistura entre os reagentes, o que garantiu um bom desempenho do modelo *Eddy-Break-U'*. O estudo de caso mostrou que a dificuldade de topologia de malha e tempo de cálculo é um obstáculo na solução

de um queimador com escoamento tão complexo. Uma estratégia de solução para o caso foi desenvolvida e pode auxiliar a solução de casos semelhantes. A falha na solução do problema com o modelo misto pode estar vinculada ao refino de malha na região do queimador, e também a parâmetros cinético-químicos, como se conclui para o primeiro caso.

A principal deficiência da solução é a falha na formação da zona central de recirculação (ZRC). Na solução apresentada por este trabalho verifica-se que os gases quentes estão distantes do bocal do queimador, enquanto que os dados experimentais mostram uma zona de recirculação de gases quentes praticamente junto a saída do bocal, Fig. 5.3. A ZRC é um estabilizador da chama muito importante para o processo.

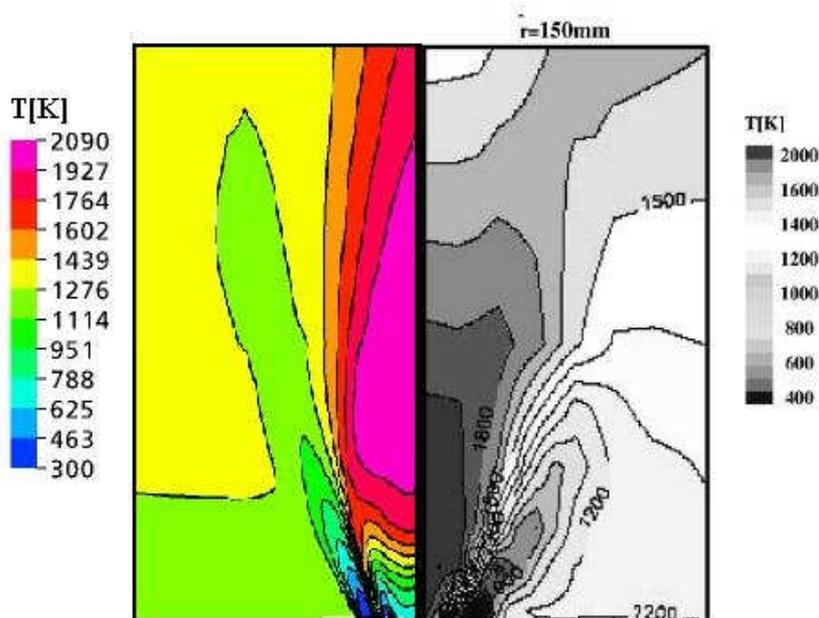


Figura 5.3 – Campo (a) calculado pelo presente trabalho e (b) medição experimental [Méier, 2000]

A discussão realizada sobre a solução do caso de Méier, 2000, é de grande utilidade em problemas de queimadores com alta intensidade de turbulência. Por exemplo, caldeiras de geração de vapor, fornos de tratamento térmico, turbinas e fornos rotativos.

Um estudo de caso real é apresentado como um exemplo de problema de Engenharia, em que os conhecimentos adquiridos nos dois primeiros casos puderam ser testados. Trata-se de um problema com geometria mais complexa que os anteriores, e sem dados experimentais para validar a solução. Por isso deve-se ter um bom conhecimento do processo de combustão para a correta modelagem. Uma seqüência de solução é proposta para o caso, totalmente baseada nas análises feitas para os casos anteriores, considerado as limitações, os modelos e as funcionalidades do programa de mecânica dos fluidos computacional utilizado.

Ferramentas de mecânica dos fluidos computacional podem ser utilizadas para o projeto de todo tipo de queimadores utilizados, em casos de equipamentos novos ou atualizações de sistemas em todo o mundo. Estas ferramentas podem economizar tempo ao visualizar problemas de processo além de fornecer soluções completas também.

Os benefícios e impactos destas ferramentas nas características da fornalha e sua performance podem ser muitos, tais como: melhoria da eficiência energética, redução da emissão de gases tóxicos (NO_x , CO , SO_x), facilitar o uso de energias alternativas, proporcionarem maior qualidade e robustez ao produto, reduzir tempo de desenvolvimento de um projeto, projetos melhorados de queimadores, diagnóstico mais rápido de problemas e opções mais amplas de resposta.

O presente trabalho mostra que a interpretação, sem o conhecimento do fenômeno e das ferramentas de modelagem, pode levar a conclusões erradas e orientações de projeto que não condizem com o processo real dentro de uma câmara de combustão. A análise detalhada do tipo de escoamento, da forma da câmara e do queimador, da forma de malha, da modelagem matemática implementada, e da aderência da modelagem com o fenômeno são tarefas vitais para a boa solução de um caso, ou pelo menos para uma boa aproximação.

5.2. PROPOSTAS DE FUTUROS TRABALHOS

Atualmente a disseminação de códigos comerciais de mecânica dos fluidos computacional vem aproximando cada vez mais o projeto mecânico das simulações, portanto é necessário um enfoque em soluções específicas de problemas vinculados a estes códigos, quando da solução de problemas mais complexos como os apresentados neste trabalho.

Uma série de ações poderia auxiliar na melhor compreensão dos fenômenos físicos e sua simulação por tais programas. Além de também gerar novas funcionalidades para o trabalho de solução:

1. Verificar a influência dos parâmetros cinéticos químicos envolvidos no processo de combustão dos casos modelados.
2. Testar a modelagem dos casos utilizando um modelo LES ou híbrido de turbulência.
3. Resolver o problema com outro gás combustível, por exemplo, Propano-Butano, validando com casos experimentais também.
4. Testar o uso de uma biblioteca com maior detalhamento da reação química do metano.
5. Simulação do caso apresentado e validação com experimento.

6. Realizar uma iteração entre a solução do escoamento e um algoritmo de controle de fornalha, criando um ambiente de simulação real de operação, apresentando gráficos de reações da caldeira e ações a serem realizadas pelo operador.
7. Criação de curvas de aumento e diminuição de temperatura da fornalha para interpolação por controladores lógicos programáveis que controlem equipamentos deste tipo.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ANSYS, Inc., 2006, “**ANSYS CFX – Solver Theory Guide**”, ANSYS CFX Release 11.0, Canonsburg, PA, USA.

Arrhenius, S., 1889. Physics and Chemistry.

Bejan, A., 2004. “**Convection heat transfer**”, Wiley, New Jersey.

Benson, S. W., 1972. Nat. Bur. Std. Spec. Publ. 357, p. 121.

Bodestein, M., 1913. Physics and Chemistry.

Borghi, R., 1988. “**Turbulent combustion modelling**”. Program of Energy and Combustion Science, Vol. 14, pp. 245-92

Boussinesq, J., [1877], “**Essai sur la théorie des courantes**”, Mem. Presentes Acad. Sci., 23:46.

Bradley, J.N., 1972. “**Flame and Combustion Phenomena**”, Chapman and Hall Ltd..

Bray, K.N.C., Peters, N., “**Laminar flamelets in turbulent flames**”, Turbulent reacting flows, pp. 63-113.

Burcat, A., Ruscic, B., 2005. “**Third millennium ideal gas and condensed phase thermochemical database for combustion with updates from active thermochemical tables**” U.S. Department of energy, Chicago.

CFX Inc., 2002. “**CFX user’s guide**”, CFX, Waterloo.

CIBER, 2007. “**Memoriais de cálculo internos**”, Porto Alegre, Brasil.

Damkohler, G., 1947. NACA Technical Memorials, No. 112.

Denis, V. e Vervisch, L., 2001, “**Turbulent combustion modeling**”, Progress in Energy and Combustion Science, 28: 193-266.

Djeridane, T., Amielh, M., Anselmet, F., 1996. “**Velocity turbulence properties in the near-field region os axisymmetric variable density jets**”, American institute of physics, Vol. 8, No. 6.

Eaton, A. M., Smoot,L.D., 1999, “**Components, Formulations, Solutions, Evaluation, and application of comprehensive combustion models**”, Progress in Energy and Combustion Science, Vol.25, pp.387-436.

Ferziger, J. H., 2001. “**Numerical Simulation of Turbulence**”. Colloquium of IAM-PIMS. Pacific Institute for the Mathematical Sciences.

Fluent Inc., 1997. “**Fluent user’s guide**”, Fluent Incorporated, New Hampshire.

Frassoldati, A., 2005. “**Determination of NOx emissions from strng swirling confined flames with an integrated CFD-based procedure**”, Chemical Engineering Science, vol. 60, pp.2851-2869.

Fuel, Vol. 82, pp. 1579-1586.

Fox, W. R. e McDonald, A.T., 1998, “**Introdução à Mecânica dos Fluidos**”, 4ª ed., LTC, Rio de Janeiro, RJ.

Garréton, D., Simonin, O., 1994, “**Aerodynamics and steady state combustion chamber and furnaces**”, ECOFTAC Bulletin, pp. 29-38

Glassman, I., Sawyer, R. F., 1970. “**The Performance of chemical propellants**”, Technivision, London.

Glassman, I., 1977. “**Combustion**”, Academic Press, In., New York.

Gordon, S., McBride, B.J., 1971. NASA SP-273

Gordon, S., McBride, B.J, "**Computer Program for Calculation of Complex Chemical Equilibrium Compositions and Applications: I. Analysis**", NASA Reference Publication 1311, October 1994.

Griswold, J., 1946 , "**Fuel, Combustion and Furnaces**", McGraw-Hill, London

Grotjans, H. and Menter, F.R., "**Wall functions for general application CFD codes**", ECCOMAS 98 Proceedings of the Fourth European CFD Conference, pp.1112-1117, John Wiley & Sons, 1998.

Hottell, H. C., Hawthorne, W. R., 1949. **3rd International Symposium of Combustion**, p. 255, Williams and Wilkens, Baltimore.

Huff, V.N., Morell, V.E., 1950. NACA TN 1113

Ibanez, W. A. C., Oliveira, A. A. M., 2006, "**Simulação numérica de jatos concêntricos e validação com resultados experimentais da literatura**", Proceeding of the 11th Brazilian Congress of Thermal Sciences and Engineering 2006, Paper CIT06-0461.

IPT, 2000. "**Curso de combustão Industrial**", IPT, São Paulo.

Isnard, A.A., Gomez, M.S.P., 1999. "**Numerical simulation of the NO_x and CO formation in natural gas diffuse flame**", XV Congresso Brasileiro de Engenharia mecânica, Águas de Lindóia.

John, R. R., Mayer, E., 1957. Arde Association Technical, Note 4555-5.

Kanury, A. M., 1975, "**Introduction to combustion phenomena**", Gordon and Breach Sciece Publishers, London.

Khitrim, L.N., 1975. "**The physics of combustion and explosion**". Israel program for scientific translation Ltd..

Kolmogorov, A.N., 1942, "**Equations of turbulent motion of an incompressible fluid**", Izv Akad. Nauk. USSR, Ser. Phis. 6:56-58.

Kolmogorov, A.N., 1941, **“The local structure of turbulence in compressible viscous fluid for a very large Reynolds numbers”**, Dokl. Akad. Nauk. USSR, vol. 10, pp.734-736.

Kovaznay, L. S. G., 1956. **Jet propulsion**. P. 26, 485.

Launder, B. E. & Spalding, D.B., 1972. **“Lectures in mathematical models of turbulence”**.Academic Press, London.

Launder, B. E. & Spalding, D.B., 1974. **“The numerical computation of turbulent flows”**,Comp. Meths. Appl. Mech. Eng., vol.3,pp269-289.

Launder, B. E. & Sharma, B.I., 1974. **“Application of the energy-dissipation model of turbulence to the calculation of flow near a spinning disc”**, Letters in heat and Mass Transfer, 19:519-524.

Liñán, A., 1994, **“Ignition and flame spread in laminar mixing layer”**, Combustion in Very High speed flows, pp. 461.

Lindemann, F. A., 1922. Trans. Faraday Society.

Maliska, C.R., 2004. **“Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional”**. LTC, Rio de Janeiro, RJ.

Magel, H.C., Schneider, R., Schnell, U. e Hein, K.R.G., 1995. **“Numerical simulation of utility boilers with advanced combustion technologies”**, Eighth International Symposium on Transport Phenomena in Combustion, San Francisco, CA.

Magel, H.C., Schneider, R., Schnell, U. e Hein, K.R.G., 1996a. **“Modeling of hydrocarbon and nitrogen chemistry in turbulent combustor flows using detailed reaction mechanisms”**, 3rd Workshop on Modeling of Chemical Reaction Systems. Heidelberg.

Magel, H.C., Schneider, R., Schnell, U. e Hein, K.R.G., 1996b. **“Simulation of detailed chemistry in a combustor flow”**, Twenty-Sixth Symposium (International) and Combustion/The Combustion Institute, pp. 67-74.

Magnussen, B.F., 1989. **“The eddy dissipation concept”**, XI Task Leaders Meeting – Energy Conservation in Combustion, IEA.

Magnussen, B.F. e Hjertager, B.H., 1977. **“On mathematical models of turbulent combustion with special emphasis on soot formation and combustion and combustion”**. XVI Symposium (International) on Combustion – The Combustion Institute, pp. 719-729. Cambridge, MA, Aug. 15-20.

Marias, F., et al., 2002. **“Quality of CFD Models for Jet Flow Analysis for the Design of Burners and Boilers”**, Korean Journal of Chemical Engineering, vol. 19, pp.28-40.

Meier, W., 2000. **“Investigations in the TECFLAM swirling diffusion flame: Laser Raman measurements and CFD calculations”**, Applied Physics B Laser and Optics, vol.71, pp.725-731.

Nieckele, A.O., Naccache, M.F., Gomes, M.S.P., Carneiro, J.E. and Serfaty, R., 2001. **“Evaluation of models for combustion processes in a cylindrical furnace”**, ASME-IMECE, International Conference of Mechanical Engineering, New York

Nieckele, A.O., Naccache, M.F., Gomes, M.S.P., Carneiro, J.E. and Serfaty, R., 2002. **“Predição da combustão de gás natural em uma fornalha utilizando reação em uma e duas etapas”**, CONEM, João Pessoa, PB.

Nieckele, A.O., Naccache, M.F., Gomes, M.S.P., Carneiro, J.E. and Serfaty, R., 199a. **“The influence of the oxygen injection configuration in the performance of an aluminum melting furnace”**, ASME, International Mechanical Engineering Congress, Nashville.

Patankar, L., 1975. **“Numerical Heat Transfer and Fluid Flow”**. McGraw-Hill, New York.

Penner, S. S., 1955. **“Introduction to the study of the chemistry of flow processes”**, Butterworths, London.

Pitts, W. M., 1991. **“Reynolds number effects on the mixing behaviour of axisymmetric turbulent jets”**, Experiments in Fluids 11, 135-141.

Prandtl, L., 1925. **“Bericht über Untersuchungen zur ausgebildeten Turbulenz”**, ZAMM, vol.3, pp. 136-139.

Prandtl, L., 1945. **“Über ein neues formelsystem für die ausgebildeten Turbulenz”**, Nachr. Akad. Wiss. Göttingen, vol., pp. 6-19.

PROMEC, **“Notas de aula da disciplina de modelagem de turbulência”**, UFRGS, Porto Alegre, Brazil.

Raw, M.J., 1994, **“A coupled algebraic multigrid method for the 3D Navier Stokes Equations”**, 10th GAMM Seminar

Reynolds, O., 1895, **“On the dynamical theory of incompressible viscous fluids and the determination of the criterion”**, Phil. Trans. Roy. Soc. London Ser. 186: 349-368.

Ronchetti, B., Vielmo, H. A., 2005, **“Simulation of Combustion in Cylindrical Chamber”**, Proceedings of the 18th Brazilian Congress of Mechanical Engineering, Ouro Preto, Brazil, COBEM2005-1541.

Russel, J.B., 1982. **“Química Geral”**, Mc Graw-Hill do Brasil, Brasil.

Sadiki, A., et al., 2002, **“Prediction of swirling confined diffusion flame with a Monte Carlo and a presumed-PDF-model”**, International Journal of Heat and Mass Transfer, Vol.45, 1271-1285.

Schelkin, K. I., 1947. NACA Technical Memorials, No. 110.

Schlichting, H., 1979. **“Boundary-layer Theory, McGraw-Hill”**.

Seery, D., Bowman, C. T., 1970. **“Combustion and Flames”**, p. 14, 37.

Siegel, R. e Howell, J. R., 2002. **“Thermal Radiation Heat Transfer”**, 4th edn, Taylor & francis, New York – London.

Silva, C. V. da, 2005, **“Numerical simulation of turbulent combustion of natural gas in cylinrical chamber”**, UFRGS, Porto Alegre, Brasil.

Spalding, D.B., 1971. **“Mixing and chemical reaction in steady confined turbulent flames”**, Thirteen Symposium (International) on Combustion, The Combustion Institute pp. 649-657.

Spalding, D.B., 1977. **“Development of the eddy-break-up model of turbulent combustion”**, Symposium (International) on Combustion, The Combustion Institute pp. 1657-1663.

Spalding, D.B., 1979. **“Combustion and Mass Transfer”**, Pergamon Press, Inc., New York.

Speziale, C.G., Abid, R., & Anderson, E.C., 1992. **“A critical evaluation of two-equation turbulence models for near-wall turbulence”**, Journal of American Institut of aeronautics and astronautics, vol. paper 90-1481.

Spode, C., 2006. **“Simulação de grandes escalas e simulação híbrida RANS/LES do escoamento sobre o degrau com condições de contorno turbulentas”**, UFU, Uberaba, Brasil.

Summerfield, M., Reiter, S. H., Kebely, V., 1955. **“Jet Propulsion”**, p. 25, 377.

Syahrul, S., Hamdullahpur, F., Dincer I., 2002, **“Thermal analysis in fludized bed drying of moist particles”**, Applied Thermal Engineering, vol.22, pp. 1763-1775.

Tennekes, H. Lumley, J. L., 1994. **“A First Course in Turbulence”**. 15^a ed. The MIT Press, Massachusetts.

Versteeg, H.K.& Malalasekera, W., 1995. **“An introduction to Computational Fluid Dynamics: The Finite Volume Method”**. Research Studies Pr, new York.

Wilcox, D.C., 1988. **“Reassessment of the scale-determining equation for advanced turbulence models, Journal of American Institut of aeronautics and astronautics”**, vol. 26(11),pp. 1299-1310.

Wilcox, D.C., 1998. **“Turbulence Modeling for CFD”**, volume 2nd. Ed. DCW Industries.

Vylen, G.J.V., Sonntag, R.E, 1970. **“Fundamentos da Termodinâmica Clássica”**, Edgard Blucher Ltda., Brasil.

Zhou, L.X.,et al., 2003, **“Simulation of swirling combustion and NO formation usinh a USM turbulence-chemistry model”**, Fuel 82: 1579-1586.

Zhou, L.X.,et al., 2002, **“A USM turbulence-chemistry model for simulating NOx formation in turbulent combustion”**, Fuel 81:1703-1709.

Zhou, X., Brenner, G., Weber, T. e Durst, F., 1999, **“Finite rate chemistry in modeling of two dimensional jet premixed CH₄/Air flame”**, International Journal Of Heat and Mass Transfer 42: 1757-1773.

Zhou, X., Sum, Z., Brenner, G. e Durst, F., 2000, **“Combustion modeling of turbulent jet diffusion hydrogen/air flame with detailed chemistry”**, International Journal Of Heat and Mass Transfer 43: 2075-2088.

ANEXO A

A.1 EXEMPLO DE REAÇÃO SIMULTÂNEA HIDROGÊNIO-IODINA

Um exemplo clássico é a reação Hidrogênio-Iodina, podendo ser melhor visualizada no Apêndice.



A taxa de formação de HI é então afetada por duas constantes de taxa, K_f e K_B , e é escrita

$$\frac{d(HI)}{dt} = 2K_f(H_2)(I_2) - 2K_b(HI)^2 \quad (\text{A.4})$$

No equilíbrio, a taxa de formação de HI é zero, e

$$2K_f(H_2)_{eq}(I_2)_{eq} - 2K_b(HI)_{eq}^2 = 0 \quad (\text{A.5})$$

onde o subíndice eq significa as concentrações no equilíbrio. Então

$$\frac{K_f}{K_b} = \frac{(HI)_{eq}^2}{(H_2)_{eq}(I_2)_{eq}} \equiv K_C \quad (\text{A.6})$$

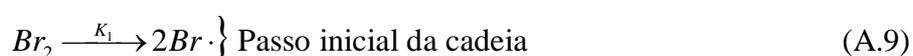
As constantes de reação a jusante e a montante são relacionadas à constante de equilíbrio baseada nas concentrações (K_C). Esta constante é uma quantidade termodinâmica e é dita como conhecida. Sendo assim a expressão de taxa para HI se torna

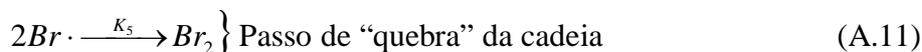
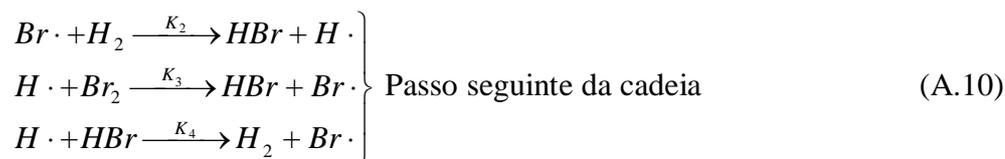
$$\frac{d(HI)}{dt} = 2K_f(H_2)(I_2) - 2K_b(HI)^2 = 2K_f(H_2)(I_2) - 2\left(\frac{K_f}{K_C}\right)(HI)^2 \quad (\text{A.7})$$

Que mostra uma constante de taxa independente no problema. Em grande parte dos problemas, duas moléculas reagentes não reagem diretamente como H_2 e I_2 , mas reagem por um dissociamento antes para formar radicais, que então iniciam uma cadeia de passos. Este processo também ocorre na reação do H_2 com outro alógeno Br_2 . Experimentalmente, [Bodenstein, 1913] encontrou que a taxa de formação de HBr obedece à expressão

$$\frac{d(HBr)}{dt} = \frac{K'_{exp}(H_2)(Br_2)^{1/2}}{1 + K''_{exp}[(HBr)/(Br_2)]} \quad (\text{A.8})$$

Esta expressão mostra que HBr está inibindo sua própria formação. Bodenstein explicou este resultado sugerindo que a reação $H_2 - Br_2$ era de caráter de cadeia e iniciada por um radical ($Br\cdot$). Ele propôs os seguintes passos:





A energia de ligação em Br_2 é 46 [kcal/mol] e em H_2 é [104/kcal/mole]. Conseqüentemente, acima de tudo a não ser em temperaturas muito elevadas, a dissociação de Br_2 será o passo inicial.

A.2 TEMPERATURA DE AUTO-IGNIÇÃO

Observa-se que a taxa de reação é função da temperatura, Eq.1.34, e para baixas temperaturas a liberação de energia devido à reação entre os reagentes é igual ou inferior à energia dissipada para o meio, portanto as reações químicas continuam a ocorrer lentamente sem elevação da temperatura.

Entretanto, a partir de um certo valor da temperatura, denominada temperatura de auto-ignição, a energia liberada excede a energia dissipada, conseqüentemente a temperatura se eleva desencadeando uma variação abrupta da taxa de reação, ocorrendo a combustão.

Semenov realizou uma análise termodinâmica da ignição de um sistema contendo mistura combustível-comburente [Bradley, 1972] e [Khitrim, 1975], que é esquematizada na Fig. A.1.

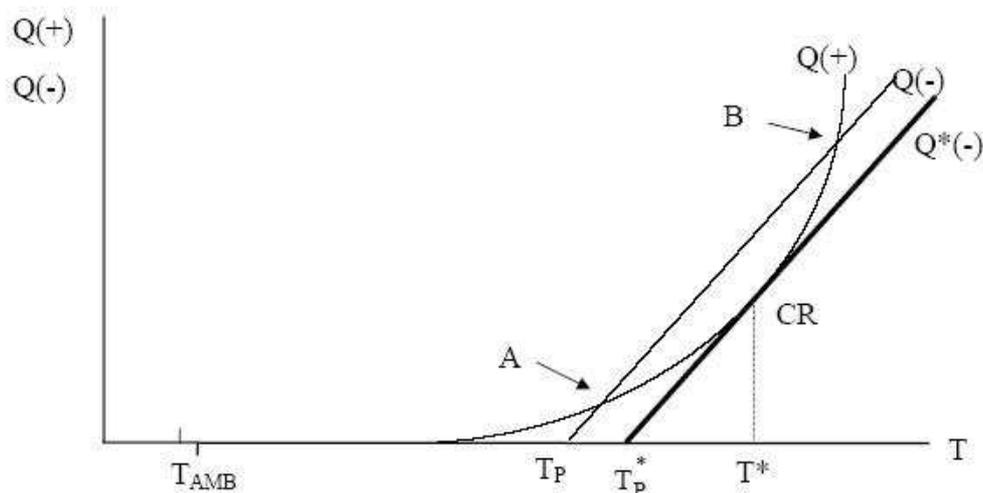


Figura A.1 – Representação da análise termodinâmica, segundo Semenov.

Na Fig. 1.11, tem-se em abscissas a temperatura da mistura combustível-comburente contida num recipiente, e em ordenadas os valores de $Q(-)$ (J/s), calor trocado por convecção através das paredes do recipiente e $Q(+)$ calor liberado pelas reações químicas que ocorrem no interior do recipiente.

Desprezando os efeitos de radiação, tem-se para $Q(-)$ a seguinte expressão

$$Q(-) = h_c S (T - T_w) \quad (\text{A.12})$$

considerando h_c , S e T_w constantes, $Q(-)$ é função linear de T . Para $Q(+)$ a seguinte expressão

$$Q(+) = h_{rp} A \exp\left(-\frac{E_A}{RT}\right) V \quad (\text{A.13})$$

onde, h_c é coeficiente de troca de calor por convecção ($\text{W}/\text{m}^2\text{K}$), S é a superfície do recipiente (m^2), T é a temperatura média do sistema (mistura) (K), T_w é a temperatura da parede do recipiente (K), h_{rp} a entalpia de reação (J/kg) e V o volume da mistura (m^3).

Fixada uma temperatura de parede (T_w), tem-se o ponto onde a reta $Q(-)$ intercepta o eixo das abscissas e, dada uma concentração C_{comb} de combustível na mistura, tem-se a curva $Q(+)$. As curvas de $Q(+)$ e $Q(-)$ podem se interceptar, por exemplo, em dois pontos A e B. Neste caso, para $T < T_A$ tem-se $Q(+)>Q(-)$ e a mistura se aquece tendendo a T_A . Para $T_A < T < T_B$, tem-se $Q(-) > Q(+)$, as perdas superam o calor liberado nas reações e o sistema tende ao ponto A. Para $T > T_B$, tem-se $Q(+)>Q(-)$ e o sistema se desequilibra, desencadeando a combustão, T_B corresponde a uma das temperaturas de ignição com concentração C_{comb} . Observa-se que a temperatura de ignição depende da configuração do recipiente e da temperatura da sua parede.

Pode ser visto na Fig. 1.11, que se a temperatura da parede T_w for aumentando gradativamente, chega-se a T_w^* , onde a reta $Q^*(-)$ tangencia a curva $Q(+)$ no ponto CR; esta temperatura T_w^* é maior temperatura de parede para a qual não ocorre a auto-ignição. O ponto CR corresponde à temperatura T^* da mistura reagente, denominada temperatura de auto-ignição.

Considerando a condição de auto-ignição, em que T_w^* e T^* é a temperatura da parede e temperatura de auto-ignição respectivamente, tem-se

$$Q(+)|_{T^*} = Q(-)|_{T^*} \therefore \frac{d}{dT} Q(+)|_{T^*} = \frac{d}{dT} Q(-)|_{T^*} \quad (\text{A.14})$$

obtendo-se as igualdades

$$h_c S (T^* - T_w^*) = h_{rp} A \exp\left(-\frac{E_A}{RT^*}\right) V \therefore h_c S = h_{rp} A \exp\left(-\frac{E_A}{RT^*}\right) V \frac{E_A}{RT^{*2}} \quad (\text{A.15})$$

$$\therefore T^* - T_w^* = \frac{RT^{*2}}{E_A} \quad (\text{A.16})$$

tem-se então um polinômio de segundo grau cuja solução é

$$T^* = \frac{E_A}{2R} - \frac{E_A}{2R} \left(1 - \frac{4RT_w^*}{E_A}\right)^{1/2} \quad (\text{A.17})$$

Observam-se na prática valores de E_A na ordem de 20000 cal/mol, $T_p^* \sim 800K$ e $R=1.98$ cal/molK. A solução passa por uma expansão em série binomial, onde se despreza o quarto termo [IPT, 2000]. Chegando ao resultado de

$$T^* - T_w^* \cong \frac{R}{E_A} T_w^{*2} \sim 64K \quad (\text{A.18})$$

Conclui-se que a temperatura de auto-ignição difere da temperatura da parede do reservatório de algumas dezenas de graus. Frank-Kamenetskii realizou uma análise da auto-ignição mais realista que Semenov, considerando um gradiente de temperatura no interior do reservatório.

Os resultados numéricos obtidos através do modelo de Frank-Kamenetskii apresentaram concordância muito boa com os resultados experimentais, e as conclusões são idênticas às obtidas por Semenov. Detalhes desta abordagem podem ser vistos em [Khitrim, 1975].

Dada a Eq. 1.84

$$h_c S (T^* - T_w^*) = h_{rp} A \exp\left(-\frac{E_A}{RT^*}\right) V \quad (\text{A.19})$$

sabe-se que uma das dependências do termo A é da concentração da mistura ($A = A(\sigma, C, T, M)$), pode-se separar esta dependência sendo uma função da concentração

$$A = cte f(C) \quad (\text{A.20})$$

Pela Eq. 1.86

$$T^* - T_p^* = \frac{R}{E} T_w^{*2} \quad (\text{A.21})$$

obtem

$$h_c S \frac{R}{E_A} T_w^* = h_{rp} cte f(C) \exp\left(-\frac{E_A}{RT_w^* \left(1 + \frac{R}{E_A} T_w^*\right)}\right) V \quad (\text{A.22})$$

Dados os valores antes citados comumente para R e E_A , ainda contando com T_w^* também como valor prático [IPT, 2000], tem-se

$$\frac{RT_w^*}{E_A} \sim 0,1 \ll 1 \quad (\text{A.23})$$

portanto

$$\frac{1}{1 + \frac{R}{E_A} T_w^*} \cong 1 - \frac{R}{E} T_w^* \therefore T_w^{*2} = \frac{V h_{rp} cte E}{h_c S R} \exp(1) f(C) \exp\left(-\frac{E_A}{RT_w^*}\right) \quad (\text{A.24})$$

$$\therefore T_w^{*2} = cte f(C) \exp\left(-\frac{E}{RT_p^*}\right) \quad (\text{A.25})$$

Chega-se então a conclusão que considerando uma mistura com certo teor de combustível, a função $f(C)$ será função da pressão, $f(C) = f(P)$, portanto é possível traçar o gráfico qualitativo da Fig. A.2, $T^* \times P$ para um dado teor de combustível na mistura, delimitando a zona de ignição,



Figura A.2 – Gráfico qualitativo de temperatura de auto ignição x pressão, para uma dada mistura de combustível.

Considerando a mistura com a pressão constante, a função $f(C)$ pode variar com a variação do teor de combustível na mistura. Seja uma mistura estequiométrica com $Q(+)$ est, calor liberado pelas reações químicas dessa mistura estequiométrica, conforme o gráfico, $Q(+)$ por T para diversos teores de combustível na mistura.

Se a relação estequiométrica combustível-comburente for modificada, mantendo-se a pressão constante, é razoável que a curva $Q(+)$ não estequiométrica, desloque-se para a direita, Fig. A.3, pois o número de colisões entre as moléculas reagentes deverá diminuir, reduzindo a taxa de reação para a mesma condição de pressão e temperatura; entretanto existem duas maneiras para sair da relação estequiométrica, que são:

- aumentando o teor de combustível, obtendo-se uma mistura rica com $Q(+)$ rico;
 - diminuindo o teor de combustível, obtendo-se uma mistura pobre com $Q(+)$ pobre,
- portanto, existem dois teores de combustível (concentração) para uma mesma pressão e temperatura de auto-ignição, que estabelecem os limites de auto-ignição.

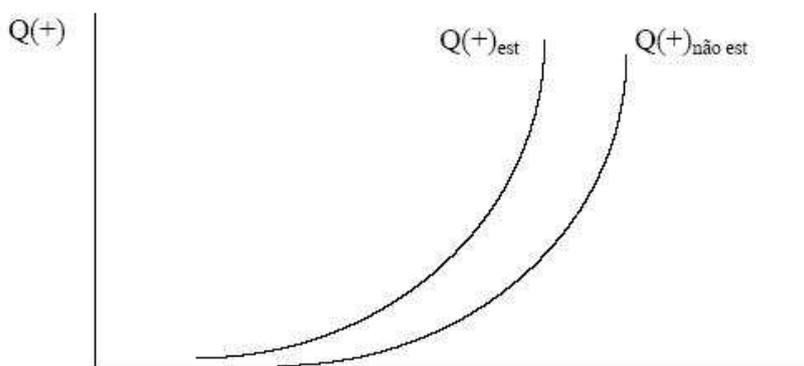


Figura A.3 – Diferença qualitativa na liberação de calor para diversos teores de combustível.

Logo, podem-se obter os gráficos das Figs A.4 e A.5, respectivamente T^* em relação ao teor de combustível, a pressão constante, e P^* em relação ao teor de combustível, a temperatura constante, onde delimitam as zonas de ignição.

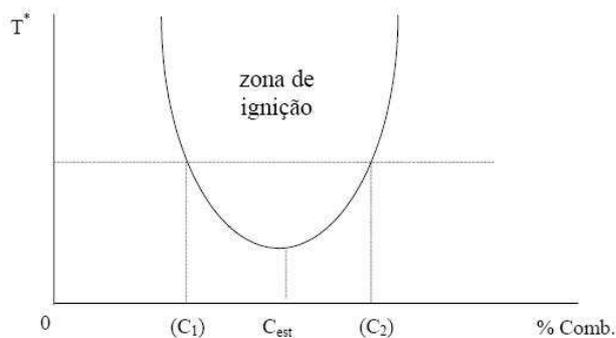


Figura A.4 – Efeito da temperatura na zona de ignição.

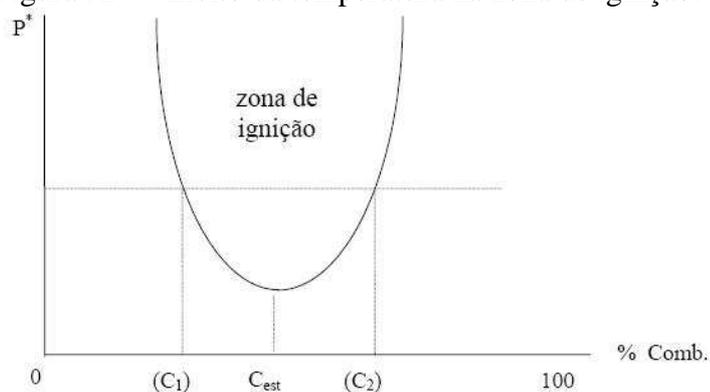


Figura A.5- Efeito da pressão na zona de ignição.

A.3 ANÁLISE TÉRMICA DO MECANISMO DE PROPAGAÇÃO DE CHAMA

A análise do mecanismo de propagação de chama pode ser realizada através de um modelo de propagação térmica [Bradley, 1972], conforme é apresentado na Fig. A.6, que mostra a evolução da temperatura e concentração no interior da chama.

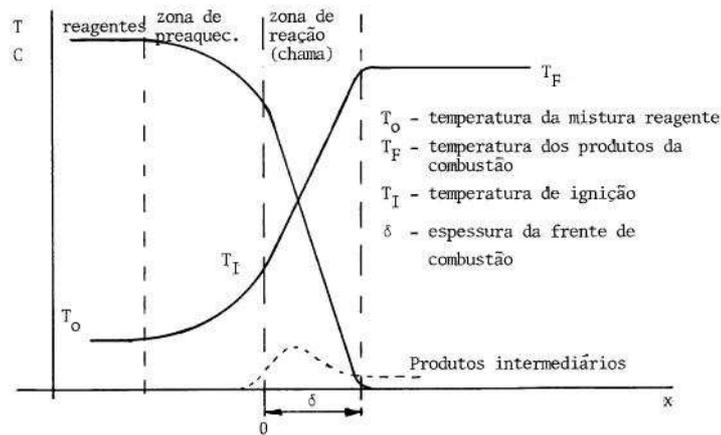


Figura A.6 – Perfil da temperatura e concentração na frente de chama [IPT, 2000].

Este modelo analisa as zonas de preaquecimento e de reação, que são separadas pela temperatura de ignição T_I . A equação de energia para estas zonas é dada pela expressão

$$\underbrace{c_p \rho \frac{\partial T}{\partial t}}_{\text{Variação no tempo da energia}} = \underbrace{\frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right)}_{\text{Condução}} - \underbrace{\frac{\partial}{\partial x} (c_p T \rho u)}_{\text{Convecção}} + \underbrace{h_{rp} Z_{AB} \exp\left(-\frac{E_A}{RT}\right)}_{\text{Reações químicas}} \quad (\text{A.26})$$

Sendo u a velocidade dos gases e como visto anteriormente $RR = Z_{AB} \exp\left\{-\frac{E_A}{RT}\right\}$,

considerando o processo em regime permanente, $\frac{\partial T}{\partial t} = 0$ e com propriedades constantes, obtêm-se para as zonas de pré-aquecimento e de reação as seguintes expressões

- zona de preaquecimento: considerando que o calor liberado pelas reações é pequeno e o escoamento unidimensional, a equação da continuidade fica

$$\rho_0 u_0 = \rho u \quad (\text{A.27})$$

sendo a equação da energia reduzida

$$\lambda \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} - \rho_0 u_0 c_p \frac{\partial T}{\partial x} = 0 \quad (\text{A.28})$$

sob condições

$$x = 0 \rightarrow T = T_I, \text{ e } x = -\infty \rightarrow \frac{\partial T}{\partial x} = 0 \quad (\text{A.29})$$

Segundo [IPT, 2000] a solução é

$$T = T_0 + (T_I - T_0) \exp\left(\frac{u_0 \rho_0 c_p}{\lambda} x\right) \quad (\text{A.30})$$

- zona de reação: a equação da continuidade para a mistura combustível poderá ser escrita na forma

$$u_0 \rho_0 n = \int_0^{\delta} r r dx = \overline{rr} \delta \quad (\text{A.31})$$

Onde \overline{rr} é a taxa de reação média e n é a fração de combustível que participa das reações, na mistura e δ a espessura da zona de reação (frente de chama). Admite-se ainda que o gradiente da temperatura na zona de reação seja constante,

$$\frac{\partial T}{\partial x} = \frac{T_F - T_I}{\delta} \quad (\text{A.32})$$

para x igual a 0 a partir da Eq. 1.100

$$\left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_{x=0} = \frac{u_0 \rho_0 c_p}{\lambda} (T_I - T_0) \quad (\text{A.33})$$

Como resultado final da combinação das três últimas condições chega-se que

$$u_0 = \frac{1}{\rho_0} \sqrt{\frac{\lambda}{c_p} \overline{rr}} \sqrt{\frac{1}{n} \left(\frac{T_F - T_I}{T_I - T_0} \right)} \quad (\text{A.34})$$

Conclui-se que:

- se a frente da chama for estacionária, a sua velocidade de deslocamento em relação à mistura reagente é o próprio $u_0 = S_L$ (velocidade da chama laminar).
- a velocidade da chama laminar é, portanto, proporcional à raiz quadrada da taxa de reação média e à relação da condutibilidade térmica pelo calor específico da mistura.
- a temperatura da mistura reagente T_0 influi na temperatura dos produtos da combustão e na velocidade da chama, vide Eq.1.100 e na Tab. 1.3.

Tabela A.1 – Valores de velocidade e temperatura de chamas dadas temperaturas iniciais, [IPT, 2000].

Mistura	T_0 (K)	T_F (K)	u_0 (cm/s)
$CH_4 - O_2$, contendo 62,5% de N_2	346	2420	85
	383	2450	89
	463	2465	97
	539	2490	106

A.4. LIMITES DE EXPLOSÃO E CARACTERÍSTICAS DE OXIDAÇÃO DE HIDROCARBONETOS

Os hidrocarbonetos de maior ordem, particularmente propano e acima deste, queimam mais lentamente que hidrogênio, mas são conhecidos por formar moléculas metaestáveis que

foram importantes ao explicar os limites de explosão do hidrogênio e monóxido de carbono. A existência destas moléculas metaestáveis torna possível explicar qualitativamente o limite único de explosão dos hidrocarbonetos complexos e ganhar conhecimento dos mecanismos de oxidação.

Misturas de hidrocarbonetos e oxigênio reagem muito lentamente a temperaturas abaixo de 200°C; com o aumento da temperatura uma variedade de compostos contendo oxigênio começa a se formar. Com o aumento posterior ainda da temperatura, CO e H_2O começam a predominar nos produtos e H_2O_2 (peróxido de hidrogênio), CH_2O (formaldeído), CO_2 , e outros compostos começam a aparecer. A 300-400 [°C] uma luz fraca começa a aparecer, que é seguida por uma explosão. Geralmente a presença de aldeídos é revelada.

Defini-se uma explosão de gás como um processo na qual a combustão de uma nuvem pré-misturada gasosa combustível-oxidante que causa um incremento rápido de pressão. Pode ocorrer tanto em áreas confinadas como em áreas abertas.

Quando uma nuvem inflamável é ignitada, a chama pode se propagar de dois modos diferentes: deflagração e detonação.

A deflagração é definida em velocidades subsônicas em relação ao gás não queimado imediatamente à frente da chama, o qual estará em movimento por ação dos produtos de combustão em expansão. Na deflagração a velocidade de chama varia de alguns metros por segundo até 50 a 100 [m/s] em relação à velocidade nula.

A detonação não requer confinamento para se propagar em alta velocidade, é definida como uma onda de combustão supersônica.

Em temperaturas de 300-400 [°C] e ainda um pouco acima, reações explosivas em misturas de hidrocarbonetos e ar podem ocorrer. Então limites de explosão de hidrocarbonetos podem ser representados na Fig. A.7.

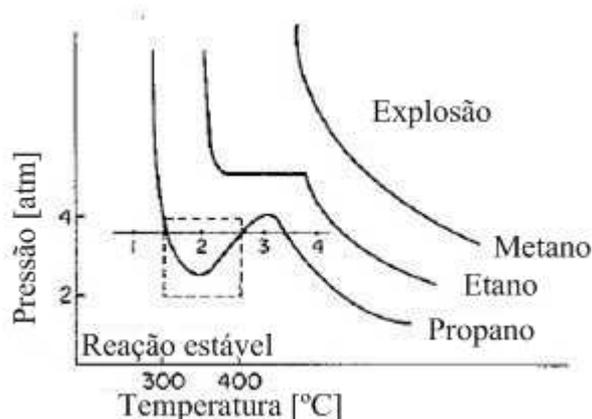


Figura A.7 – Regiões de oxidação e explosão para alguns hidrocarbonetos.

Espera-se a diferença de valores e formas entre as curvas da figura, pois moléculas mais complexas tenderão a quebrar mais rapidamente e formar radicais que promovem reação rápida. A forma da curva de propano sugere que reações em cadeia e ramificadas são possíveis em hidrocarbonetos. Pode-se concluir que os mecanismos do propano devem ser diferentes da reação $H_2 - O_2$.

Hidrocarbonetos exibem certas características experimentais de combustão que são consistentes com as curvas de limite de explosão, [Glassman, 1977], valendo listar:

1. Exibem intervalos de indução que são seguidos por uma taxa de reação muito rápida. Abaixo de 300°C estes intervalos são de ordem de 1 minuto, e acima de 400°C, são da ordem de 1 segundo ou uma fração deste.
2. A taxa de reação dos hidrocarbonetos é inibida fortemente adicionando uma superfície (por isto uma parte importante do mecanismo de reação deve ser do tipo de radical livre)
3. Grupos de aldeídos formam-se e têm grande influência. São aceleradores e diminuem atrasos de ignição.
4. Encontram-se as chamadas chamas frias, exceto para o metano e etano.
5. Exibem coeficientes de temperatura negativos para taxa de reação.
6. Ignição de dois estágios é observada e está relacionada, talvez, ao fenômeno de chama fria.
7. Explosão ocorre sem pré-aquecimento considerável (explosão em cadeia ramificada, sem aumento de temperatura permanente) e usualmente ocorre passando da região 1 para 2 na Fig. 1.18. Explosões ocorrerão em outras regiões, mas as reações são tão rápidas que não é possível dizer se elas se auto-aquecem ou não.

A.5. AVALIAÇÃO DA ALTURA DA CHAMA A PARTIR DE JATOS GASOSOS A PARTIR DA TEORIA CINÉTICA

A teoria cinética prevê que na difusão molecular o deslocamento médio de uma molécula é dado por

$$\frac{1}{2} \frac{d\overline{X^2}}{dt} = \Gamma \quad (\text{A.35})$$

onde Γ é o coeficiente de difusão e $\overline{X^2}$ é a média ao quadrado do deslocamento das partículas numa determinada direção no tempo t . Então para estimar o comprimento de chama, usa-se a equação a partir da teoria cinética na forma integrada

$$\xi^2 = 2\Gamma t \quad (\text{A.36})$$

onde ξ^2 é a média dos quadrados do deslocamento das moléculas a partir de algum lugar devido à difusão durante o tempo t . O comprimento de chama é assumido como local onde um ponto no eixo do escoamento onde a combustão é completa, a profundidade média de penetração do ar dentro do combustível é aproximadamente igual ao raio (proporcional ao raio mais exatamente) do tubo do queimador. Como uma aproximação ξ é constante, tal que o tempo t , o tempo necessário para completar o processo de difusão – que é o tempo que um elemento de gás escoar a partir da base do queimador para a ponta da chama – é dado por

$$t = \frac{y_F}{u} \quad (\text{A.37})$$

segue-se que já que $\xi = r_j$, então

$$y_{F,L} = \frac{r_j^2 u}{2\Gamma} = \frac{\dot{Q}}{2\pi\Gamma} \quad (\text{A.38})$$

onde \dot{Q} é a vazão volumétrica. Este resultado é significativo, pois prevê que para uma chama laminar de difusão a altura é proporcional somente a vazão volumétrica do gás, também auxilia na resposta para jatos turbulentos de combustível.

Para o caso turbulento, o mesmo embasamento pode ser utilizado exceto que ao invés de difusão molecular a difusividade turbulenta ε é utilizada e uma proporcionalidade similar a equação (A.38)

$$y_{F,L} \sim \frac{\pi r_j^2 u}{2\pi\varepsilon} \sim \frac{r_j^2 u}{\varepsilon} \quad (\text{A.39})$$

sendo $\varepsilon \sim l(\overline{u'^2})^{1/2}$, onde l é a escala de turbulência e é proporcional ao diâmetro do tubo (ou raio do tubo) e $(\overline{u'^2})^{1/2}$ a intensidade de turbulência, que é aproximadamente proporcional a velocidade média no eixo, ou

$$\varepsilon \sim r_j u \quad (\text{A.40})$$

combinando as duas últimas equações, (A.39) e (A.40)

$$y_{F,L} \sim \frac{r_j^2}{r_j} \sim r_j \quad (\text{A.41})$$

Este resultado mostra que a altura de uma chama turbulenta é proporcional ao raio de abertura do bocal do queimador, somente.

A.6. APROXIMAÇÃO DA ORDEM DE GRANDEZA E RELAÇÕES ENTRE VELOCIDADE TURBULENTA E LAMINAR DE CHAMA

Damkohler explica que teorias de transferências de calor fornecem a chama laminar

$$S_L \sim \left(\frac{\lambda}{\rho c_p} \right)^{1/2} \quad (\text{A.42})$$

onde λ é a condutividade térmica. Sendo o número de Prandtl definido como aproximadamente 1

$$\frac{\lambda}{\rho c_p} \text{Pr} = \frac{\lambda}{\rho c_p} \frac{c_p \mu}{\lambda} = \frac{\mu}{\rho} = \nu = \alpha \therefore S_L = \nu^{1/2} \quad (\text{A.43})$$

Todo este raciocínio foi desenvolvido, pois o coeficiente de troca ou viscosidade turbulenta μ_t tem significado físico em mecânica dos fluidos. Por similaridade, então Damkohler escreve

$$\frac{S_T}{S_L} = \left(\frac{\mu_t}{\nu} \right)^{1/2} \quad (\text{A.44})$$

Que essencialmente assume que não existem outros efeitos de outras variáveis que aparecem da teoria térmica da propagação de chama laminar. Schelkin expandiu este modelo assumindo

$$S_L \sim \left(\frac{\lambda_L}{\tau_c} \right)^{1/2} \quad (\text{A.45})$$

onde τ_c é o tempo de reação. Assumiu-se que no caso turbulento existe uma contribuição ao transporte térmico dos movimentos moleculares laminares (λ_L) e a movimentos turbilhonares (λ_T) e escreveu

$$S_T \sim \left[\left(\frac{\lambda_L + \lambda_T}{\tau_c} \right) \right]^{1/2} \sim \left\{ \left(\frac{\lambda_L}{\tau_c} \right) \left[1 + \left(\frac{\lambda_T}{\lambda_L} \right) \right] \right\}^{1/2} \quad (\text{A.46})$$

ou

$$S_T = S_L \left[1 + \left(\frac{\lambda_T}{\lambda_L} \right) \right]^{1/2} \quad (\text{A.47})$$

Uma característica é que o tempo de reação é afetado pela turbulência. Os tempos de reação podem ser representados por

$$\tau_L = \frac{d_L}{S_L}, \text{ e } \tau_T = \frac{d_T}{S_T} \quad (\text{A.48})$$

onde d é a espessura da chama (na realidade a espessura da zona de reação). Esta aproximação considera que a zona de reação possa se estender ao caso turbulento. Conceitualmente considera S_L sendo a medida da cinética química sozinha. Com as expressões para τ segue-se que

$$\frac{S_T^2}{S_L^2} = \frac{\varepsilon S_T / d_T}{\nu S_L / d_L} \quad (\text{A.49})$$

por eliminação algébrica

$$\frac{S_T d_T}{\varepsilon} = \frac{S_L d_L}{\nu} \quad (\text{A.50})$$

Dados experimentais em chamas laminares mostram que

$$\frac{S_L d_L}{\nu} \approx 10 \quad (\text{A.51})$$

então

$$\frac{S_T d_T}{\varepsilon} \approx \frac{S_L d_L}{\nu} \approx 10 \quad (\text{A.52})$$

tal que S_T deve ser determinado a partir da espessura de chama turbulenta e difusividade turbulenta.