

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

**ESTUDO NUMÉRICO DE CHAMAS TURBULENTAS NÃO PRÉ-MISTURADAS
ATRAVÉS DE MODELOS BASEADOS NO CONCEITO DE FLAMELETS**

por

Diego Luis Deon

Dissertação para obtenção do Título de
Mestre em Engenharia

Porto Alegre, fevereiro de 2016

**ESTUDO NUMÉRICO DE CHAMAS TURBULENTAS NÃO PRÉ-MISTURADAS
ATRAVÉS DE MODELOS BASEADOS NO CONCEITO DE FLAMELETS**

por

Diego Luis Deon
Engenheiro Mecânico

Dissertação submetida ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, 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 de Transporte

Orientador: Prof. Dr. Fernando Marcelo Pereira

Comissão de Avaliação:

Prof. Dr. Cristiano Vitorino da Silva (DECC/URI - Erechim, RS, Brasil)

Prof. Dr. Felipe Roman Centeno (Departamento Interdisciplinar/UFRGS -
Tramandaí, RS, Brasil)

Prof. Dr. Francis H. Ramos França (PROMEC/UFRGS - Porto Alegre, RS, Brasil)

Prof^ª. Dr^ª. Thamy Cristina Hayashi (PROMEC/UFRGS - Porto Alegre, RS, Brasil)

Prof. Dr. Luiz Alberto Oliveira Rocha
Coordenador do PROMEC

Porto Alegre, 29 de fevereiro de 2016

AGRADECIMENTOS

Esta dissertação só foi possível com auxílio de muitas pessoas, às quais dedico estes singelos e sinceros agradecimentos.

Primeiramente, expresso minha gratidão ao Prof. Dr. Fernando Marcelo Pereira, meu orientador, por sua excelente contribuição intelectual na realização deste trabalho e pelo tempo dedicado no seu debate ao longo destes dois últimos anos.

Também agradeço ao Cristian Alex Hoerle e ao Leonardo Zimmer pela solicitude e préstimos com a técnica FGM e pelas proveitosas discussões, assim como para os demais colegas do Laboratório de Combustão, que contribuíram no meu crescimento pessoal e profissional.

Foram também muito importantes todos os professores do PROMEC os quais tive a oportunidade de ter contato ao longo da realização do Mestrado. Espero ter retribuído com este trabalho com um pouco do conhecimento que me foi ofertado.

Por último, mas o mais importante, sou muito grato a minha família — minha mãe Dirce, meu pai Luiz Carlos e meu irmão Lucas — pelo amor e apoio incondicional e por não deixar de acreditar em mim mesmo nos momentos difíceis.

Sou muitíssimo grato a todas estas pessoas que contribuíram no cumprimento de mais esta etapa da minha vida.

RESUMO

A simulação numérica de chamas turbulentas é ainda hoje um desafio para as práticas de mecânica dos fluidos computacional. Compreendendo que as abordagens numéricas mais completas e realísticas atualmente disponíveis podem ser computacionalmente proibitivas, diversos modelos vêm sendo desenvolvidos com o objetivo de reproduzir os fenômenos envolvidos na combustão de uma forma simplificada, mas ainda fisicamente consistente. Este trabalho é, portanto, dedicado à comparação de diferentes modelos de fechamento para a turbulência baseados nas equações de Navier-Stokes em médias de Reynolds e de modelos para simplificação da cinética química baseados no conceito de *flamelets*, com e sem a modelagem da radiação térmica, esta última através do modelo de soma-ponderada-de-gases-cinzas. Para tanto, na primeira parte do presente trabalho são comparados seis modelos de turbulência na solução de um jato turbulento de propano, não reativo e isotérmico, circundado por uma corrente paralela de ar, quanto a sua eficiência na predição dos valores médios da velocidade longitudinal e transversal, fração mássica de propano e massa específica da mistura. Os modelos são o $k-\varepsilon$ Padrão (empregado na sua versão original e com mais duas modificações nas suas constantes conforme propostas encontradas na literatura), o $k-\varepsilon$ *Realizable*, o $k-\omega$ Padrão e o $k-\omega$ *Shear-Stress Transport*. Um dos modelos de melhor desempenho é então usado na simulação de uma chama turbulenta não pré-misturada de metano/hidrogênio/nitrogênio circundada por um escoamento coaxial de ar de baixa velocidade, no qual são então comparados os modelos para redução da cinética química baseados no conceito de *flamelets*, o *Steady Laminar Diffusion Flamelet* (SLDF) e o *Flamelet-Generated Manifold* (FGM), tendo os seus resultados comparados aos dados experimentais para os valores médios da velocidade longitudinal, fração de mistura, temperatura e frações mássicas das espécies químicas. Dentre os modelos de turbulência avaliados, é observado que as duas versões ajustadas do $k-\varepsilon$ Padrão e o $k-\omega$ Padrão se mostraram com melhor concordância em relação às medições experimentais do que os demais. No presente estudo é também avaliada a consistência dos dados experimentais reportados e uma discrepância é identificada neste jato, mas que, conforme verificado, não compromete a comparação dos modelos aqui proposta. Na solução do escoamento reativo, o modelo SLDF se mostrou com resultados bastante próximos aos resultados experimentais (exceto para o NO), sendo aprimorados ainda mais com a inclusão da modelagem da radiação térmica, sobretudo para regiões mais distantes do bico injetor do combustível, após o pico de temperatura da chama. O modelo FGM, contudo, apresentou resultados muito aquém dos esperados, sobretudo para as frações mássicas das espécies químicas, mesmo utilizando malhas com nível de refinamento muito maior e com o teste de diversas combinações de espécies para a variável de progresso da reação, e no qual a inclusão da radiação na modelagem também não trouxe benefícios perceptíveis. Todas as simulações numéricas foram realizadas empregando o código comercial ANSYS Fluent, versão 15.0.0.

Palavras-chave: combustão não pré-misturada turbulenta; modelos de turbulência RANS; Steady Laminar Diffusion Flamelet; Flamelet-Generated Manifold.

ABSTRACT

The numerical simulation of turbulent flames is still a challenge for today's computational fluid dynamics practices. Understanding that the most complete and realistic numerical approaches available today may be computationally prohibitive, several models have been developed in order to reproduce the phenomena involved in combustion in a simplified, but still physically consistent, way. Therefore, this work is dedicated to compare different models for turbulence closure based on the Reynolds-averaged Navier-Stokes equations and models for simplification of the chemical kinetics based on the flamelet concept, with and without thermal radiation modeling through the weighted-sum-of-gray-gases model. Thus, in the first part of the current work six turbulence models are employed to solve a turbulent non-reactive isothermal flow, a propane jet surrounded by a parallel stream of air. The models are compared through their effectiveness in predicting the mean values of longitudinal and transversal velocities, propane mass fraction and mixture density. The models are the Standard $k-\varepsilon$ (employed in its original version and with two modifications according to proposals found in the literature), the Realizable $k-\varepsilon$, the Standard $k-\omega$ and the Shear-Stress Transport $k-\omega$. One of the best performing models is then used to simulate a turbulent non-premixed flame of methane/hydrogen/nitrogen surrounded by a low-velocity air coflow, in which are compared the models to reduce the chemical kinetics based on the flamelets concept, the Steady Laminar Diffusion Flamelet (SLDF) and the Flamelet-Generated Manifold (FGM), being the numerical results compared to the experimental data for the mean values of longitudinal velocity, mixture fraction, temperature and species mass fractions. Among the six turbulence models evaluated, it is observed that the two adjusted versions of the Standard $k-\varepsilon$ and the Standard $k-\omega$ showed better agreement with the experimental measurements than the other models. In the current study it is also evaluated the consistency of the reported experimental data and a discrepancy is identified, which, as verified, does not compromise the models comparison here proposed. In the solution of the reactive flow, the SLDF model showed results very close to the experimental results (except for NO), being further enhanced with the inclusion of the thermal radiation modeling, especially for regions far from fuel nozzle, after the peak of temperature of the flame. The FGM model, however, showed results far below the expected, especially for the mass fractions of chemical species, even using meshes with much higher refinement level and testing of various species combinations for the reaction progress variable. The inclusion of the radiation modeling did not brought noticeable benefits. All the numerical simulations were performed employing the ANSYS Fluent version 15.0.0 commercial code.

Keywords: turbulent non-premixed combustion; RANS turbulence models; Steady Laminar Diffusion Flamelet; Flamelet-Generated Manifold.

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO.....	1
1.1	Motivação.....	2
1.2	Revisão Bibliográfica.....	3
1.2.1	Modelagem da Turbulência em Escoamentos Reativos.....	3
1.2.2	Modelos Baseados no Conceito de <i>Flamelets</i>	6
1.2.2.1	Estudos Comparativos entre os Modelos SLDF e FGM.....	8
1.3	Objetivos.....	11
2	FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA.....	12
2.1	Chamas Não Pré-Misturadas.....	12
2.2	Modelagem de Chamas Não Pré-Misturadas.....	12
2.3	Modelagem da Radiação Térmica.....	18
2.4	Modelagem da Turbulência.....	20
2.4.1	Modelagem RANS.....	22
2.4.2	Modelos de Fechamento para as Equações Médias de Reynolds.....	25
2.4.2.1	Modelo $k-\varepsilon$ Padrão.....	25
2.4.2.2	Modelo $k-\varepsilon$ <i>Realizable</i>	27
2.4.2.3	Modelo $k-\omega$ Padrão.....	28
2.4.2.4	Modelo $k-\omega$ <i>Shear-Stress Transport</i>	30
2.4.2.5	Tratamento para as Regiões Próximas às Paredes.....	32
2.4.2.6	Limitadores para a Produção da Energia Cinética Turbulenta.....	34
2.5	Modelos Baseados no Conceito de <i>Flamelets</i>	34
2.5.1	Flamelets Difusivos Laminares.....	36
2.5.2	Construção da Tabela Termoquímica Laminar.....	38
2.5.3	Incorporação dos Efeitos da Turbulência.....	40
2.5.4	Modelo <i>Flamelet-Generated Manifold</i>	45
2.6	Estudo de Refinamento da Malha.....	49
3	COMPARAÇÃO DOS MODELOS DE TURBULÊNCIA.....	51
3.1	Caracterização do Problema.....	52
3.2	Modelagem Numérica.....	54
3.2.1	Equações Governantes.....	55
3.2.2	Condições de Contorno e Propriedades Físicas.....	55
3.2.3	Comparação dos Resultados.....	57
3.2.4	Estudo de Refinamento da Malha.....	58
3.3	Resultados.....	60
3.3.1	Perfis Axiais.....	61

3.3.2	Perfis Radiais	63
3.3.3	Verificação das Condições de Contorno do Jato de Propano	69
3.4	Conclusões do Capítulo	73
4	COMPARAÇÃO DOS MODELOS SLDF E FGM	75
4.1	Caracterização do Problema.....	75
4.2	Modelagem Numérica.....	78
4.2.1	Equações Governantes e Criação das Tabelas Termoquímicas	78
4.2.2	Domínio Geométrico e Condições de Contorno.....	82
4.2.3	Estudo de Refinamento da Malha e das Tabelas Termoquímicas	84
4.3	Comparação dos Resultados do Modelo SLDF com os Experimentais.....	89
4.4	Comparação dos Resultados dos Modelos SLDF e FGM	91
4.5	Conclusões do Capítulo	94
5	CONCLUSÕES E CONSIDERAÇÕES FINAIS	96
5.1	Propostas para Trabalhos Futuros.....	97
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	98
	APÊNDICE A.....	111
	APÊNDICE B.....	112
	APÊNDICE C.....	113

LISTA DE FIGURAS

Figura 1.1 – Fontes primárias de energia mundiais ao longo das últimas décadas	1
Figura 1.2 – Fontes primárias domésticas de energia no Brasil em 2014.....	2
Figura 2.1 – Ilustração das estruturas microscópicas em uma chama multidimensional ...	34
Figura 2.2 – Grandeza das escalas em um escoamento reativo turbulento	35
Figura 2.3 – Configuração de chama laminar do tipo contracorrente.....	36
Figura 2.4 – Representação esquemática de uma chama não pré-misturada turbulenta ...	37
Figura 2.5 – Procedimento de solução dos <i>flamelets</i> laminares e armazenamento dos escalares reativos.....	40
Figura 2.6 – Descrição gráfica da função de densidade de probabilidade	41
Figura 2.7 – Exemplos de diferentes formas hipotéticas para a função beta.....	42
Figura 2.8 – Fluxograma de etapas empregadas pelos modelos SLDF e FGM	49
Figura 3.1 – Ilustração do aparato experimental	53
Figura 3.2 – Velocidade média longitudinal para cada malha e GCI entre elas	58
Figura 3.3 – Fração mássica média de propano para cada malha e GCI entre elas.....	58
Figura 3.4 – Massa específica média para cada malha e GCI entre elas.....	59
Figura 3.5 – Exemplo da representação dos resultados experimentais e numéricos.....	60
Figura 3.6 – Perfis axiais da velocidade média longitudinal em $r/D = 0$	61
Figura 3.7 – Perfis axiais da fração mássica média de propano em $r/D = 0$	61
Figura 3.8 – Perfis axiais da massa específica média em $r/D = 0$	62
Figura 3.9 – Perfis radiais da velocidade média longitudinal em $x/D = 4$	64
Figura 3.10 – Perfis radiais da velocidade média transversal em $x/D = 4$	64
Figura 3.11 – Perfis radiais da fração mássica média de propano em $x/D = 4$	64
Figura 3.12 – Perfis radiais da velocidade média longitudinal em $x/D = 15$	65
Figura 3.13 – Perfis radiais da fração mássica média de propano em $x/D = 15$	65
Figura 3.14 – Perfis radiais da massa específica média em $x/D = 15$	66
Figura 3.15 – Perfis radiais da velocidade média transversal em $x/D = 30$	66
Figura 3.16 – Perfis radiais da massa específica média em $x/D = 50$	67
Figura 3.17 – Perfis axiais da massa específica média em $r/D = 0$ recalculada a partir da fração mássica média de propano.....	70
Figura 3.18 – Perfis axiais da velocidade média longitudinal em $r/D = 0$ com condições de contorno modificadas.....	71
Figura 3.19 – Perfis axiais da fração mássica média de propano em $r/D = 0$ com condições de contorno modificadas.....	71
Figura 3.20 – Perfis axiais da massa específica média em $r/D = 0$ com condições de contorno modificadas	71

Figura 3.21 – Perfis radiais da velocidade média longitudinal em $x/D = 15$ com condições de contorno modificadas.....	72
Figura 4.1 – Configuração experimental e fotografia da chama DLR-A	77
Figura 4.2 – Resultados de T em função de Z para alguns valores selecionados de χ_{st}	80
Figura 4.3 – Domínio geométrico numérico empregado	82
Figura 4.4 – Campo de distribuição da temperatura média em avaliação preliminar	83
Figura 4.5 – Divisão dos volumes de controle no refinamento automático da malha	84
Figura 4.6 – Campo da fração de mistura média sobreposta pela malha na saída do bico injetor.....	85
Figura 4.7 – Fração de mistura e temperatura média em função das malhas no SLDF	85
Figura 4.8 – Fração de mistura e temperatura média em função das tabelas termoquímicas no SLDF	86
Figura 4.9 – Fração de mistura e temperatura média em função das malhas no FGM	87
Figura 4.10 – Frações mássicas médias de H_2O e CO_2 em função das malhas no FGM	87
Figura 4.11 – Temperatura média em função da definição de c	88
Figura 4.12 – Frações mássicas médias de CO_2 e CO em função da definição de c	88
Figura 4.13 – Frações mássicas médias de H_2 e O_2 em função da definição de c	88
Figura 4.14 – Fração de mistura e temperatura média em função das tabelas termoquímicas no FGM	89
Figura 4.15 – Resultados médios para a fração de mistura e temperatura com o SLDF ...	90
Figura 4.16 – Resultados médios para as frações mássicas de CH_4 , CO_2 , CO e O_2 com o SLDF	90
Figura 4.17 – Resultados médios para as frações mássicas de H_2 , H_2O e NO com o SLDF	91
Figura 4.18 – Comparação dos resultados médios para a velocidade longitudinal e fração de mistura com o SLDF e o FGM	92
Figura 4.19 – Comparação dos resultados médios para a temperatura e frações mássicas de CH_4 e CO_2 com o SLDF e o FGM	92
Figura 4.20 – Comparação dos resultados médios para as frações mássicas de H_2 , H_2O e OH com o SLDF e o FGM.....	93
Figura 4.21 – Comparação dos resultados médios para as frações mássicas de CO , O_2 e NO com o SLDF e o FGM	93
Figura 4.22 – Comparação do campo de temperatura média entre o SLDF e o FGM	94

LISTA DE TABELAS

Tabela 2.1 – Constantes do modelo $k-\varepsilon$ Padrão.....	26
Tabela 2.2 – Razão $C_{\varepsilon 1}/C_{\varepsilon 2}$ no modelo $k-\varepsilon$ Padrão.....	27
Tabela 2.3 – Constantes do modelo $k-\varepsilon$ <i>Realizable</i>	28
Tabela 2.4 – Constantes do modelo $k-\omega$ Padrão	30
Tabela 2.5 – Constantes do modelo $k-\omega$ SST.....	32
Tabela 3.1 – Propriedades de perfis de velocidade do tipo <i>power-law</i>	53
Tabela 3.2 – Propriedades medidas experimentalmente	54
Tabela 3.3 – Propriedades físicas das espécies químicas participantes.....	56
Tabela 3.4 – Iterações e tempo para obtenção da convergência dos resultados	59
Tabela 3.5 – Valores de R^2 nos perfis axiais	62
Tabela 3.6 – Valores de R^2 para a velocidade média longitudinal nos perfis radiais.....	67
Tabela 3.7 – Valores de R^2 para a velocidade média transversal nos perfis radiais	67
Tabela 3.8 – Valores de R^2 para a fração mássica média de propano nos perfis radiais	67
Tabela 3.9 – Valores de R^2 para a massa específica média nos perfis radiais	68
Tabela 3.10 – Condições de contorno do jato de propano exploradas numericamente	69
Tabela 3.11 – Valores de R^2 para a massa específica média recalculada a partir da fração mássica média de propano	70
Tabela 3.12 – Valores de R^2 nos perfis axiais com condições de contorno modificadas	72
Tabela 3.13 – Valores médios de R^2 nos perfis radiais com condições de contorno modificadas	73
Tabela 4.1 – Incertezas estimadas para as frações mássicas das espécies.....	78
Tabela 4.2 – Quantidade de pontos para cada variável de controle nas tabelas termoquímicas para armazenamento dos escalares reativos	81
Tabela 4.3 – Condições de contorno empregadas.....	83
Tabela 4.4 – Malhas utilizadas nas simulações com o modelo SLDF.....	85

LISTA DE SIGLAS E ABREVIATURAS

AMR	<i>Adaptative Mesh Refinement</i>
CFD	<i>Computational Fluid Dynamics</i>
DNS	<i>Direct Numerical Simulation</i>
DTRM	<i>Discrete Transfer Radiation Model</i>
EFPM	<i>Eulerian Particle Flamelet Model</i>
FGM	<i>Flamelet-Generated Manifold</i>
FPI	<i>Flame Prolongation of the ILDM</i>
FPV	<i>Flamelet-Progress Variable</i>
FVM	<i>Finite Volume Method</i>
GCI	<i>Grid Convergence Index</i>
GGM	<i>Gray Gas Model</i>
IEA	<i>International Energy Agency</i>
ILDm	<i>Intrinsic-Low Dimensional Manifold</i>
JPDF	<i>Joint Probability Density Function</i>
LBL	<i>Libe-by-Line</i>
LDV	<i>Laser Doppler Velocimetry</i>
LES	<i>Large-Eddy Simulation</i>
LFM	<i>Lagrangian Flamelet Model</i>
LIF	<i>Laser-Induced Fluorescence</i>
PAH	<i>Polycyclic Aromatic Hydrocarbon</i>
PDF	<i>Probability Density Function</i>
RANS	<i>Reynolds-Averaged Navier-Stokes</i>
RSTM	<i>Reynolds Stress Transport Model</i>
RTE	<i>Radiative Transfer Equation</i>
SIMPLE	<i>Semi-Implicit Method for Pressure Linked Equations</i>
SLDF	<i>Steady Laminar Diffusion Flamelet</i>
SST	<i>Shear-Stress Transport</i>
WGSr	<i>Water-Gas Shift Reaction</i>
WSGGM	<i>Weighted-Sum-of-Gray-Gases Model</i>

LISTA DE SÍMBOLOS

a	Fator de ponderação de emissividade de radiação; Quantidade de átomos
A	Fator pré-exponencial na equação de Arrhenius
A_i	Área de cada elemento da malha
a_s	Taxa de estiramento característica do <i>flamelet</i>
b	Coefficientes polinomiais da temperatura para os gases cinzas
c	Variável de progresso da reação normalizada
C_p	Calor específico sob pressão constante
d	Distância entre os bicos de saída dos jatos de correntes opostas
D	Diâmetro do duto de saída dos jatos
D_h	Diâmetro hidráulico
\mathcal{D}_k	Coefficiente médio de difusão de massa da espécie k dentro da mistura
\mathcal{D}_Z	Coefficiente médio de difusão da fração de mistura
E	Constante empírica do perfil logarítmico de velocidade na lei da parede
E_a	Energia de ativação
e	Erro relativo entre a solução de uma malha e outra
\mathbf{g}	Vetor gravitacional
G_b	Termo que controla a geração de \tilde{k} devida aos efeitos do empuxo
G_k e G_ω	Termos que controlam a geração de \tilde{k} e $\tilde{\omega}$, respectivamente
h	Entalpia; Tamanho representativo médios dos elementos da malha
I	Intensidade radiativa; Intensidade da turbulência
\mathbf{I}	Tensor identidade unitário
I_b	Intensidade radiativa correspondente à emissão de um corpo negro
\mathbf{j}_k	Vetor fluxo de difusão de massa
\mathbf{j}_q	Vetor fluxo de difusão de calor
k	Coefficiente da taxa de reação; Energia cinética turbulenta
K	Constante de equilíbrio da reação
l	Escala de comprimento característica
Le	Número de Lewis
Ma	Número de Mach
n	Fator exponencial do perfil de velocidades <i>power-law</i>
N	Tamanho da amostragem
p	Pressão; Ordem formal de discretização espacial
P	Função de densidade de probabilidade
Pr	Número de Prandtl
r	Taxa de reação; Fator de refinamento entre malhas; Posição radial

R	Raio
R_u	Constante universal dos gases ideais
Re	Número de Reynolds
R^2	Coefficiente de determinação R-quadrado
s	Distância espectral
\mathbf{S}	Tensor da taxa de deformação média
S_c	Termo fonte da variável de progresso da reação
S_h	Termo fonte da taxa de geração de calor por unidade de volume
S_{rad}	Termo fonte da taxa de transferência de calor devida à radiação
Sc	Número de Schmidt
t	Tempo
T	Temperatura; Escala de tempo total
u	Velocidade longitudinal
\mathbf{u}	Vetor velocidade
v	Velocidade transversal; Coeficiente estequiométrico
V	Velocidade relativa dos jatos de combustível e de oxidante
W	Massa molecular
x	Coordenada ortogonal; Posição axial
X	Fração molar
Y	Fração mássica
Y_k e Y_ω	Termos que controlam a dissipação de \tilde{k} e $\tilde{\omega}$, respectivamente
Y_c	Variável de progresso da reação não normalizada
Z	Fração de mistura

Símbolos Gregos

α	Fatores de ponderação das espécies na variável de progresso da reação
β	Expoente da temperatura na equação de Arrhenius
Γ_k e Γ_ω	Difusividades efetivas de \tilde{k} e $\tilde{\omega}$, respectivamente
γ	Intermitência da fração de mistura
δ	Função delta de Dirac
ϵ	Emissividade total de radiação
ε	Taxa de dissipação da energia cinética turbulenta
κ	Coeficiente de absorção radiativa
\mathcal{K}	Constante de von Kármán
λ	Condutibilidade térmica
μ e ν	Viscosidades dinâmica e cinemática, respectivamente
ξ	Variável dependente do tempo genérica
ρ	Massa específica da mistura

ρ_∞	Massa específica do oxidante puro
σ	Constante de Stefan-Boltzmann
τ	Tempo do <i>flamelet</i> ; Escala de tempo característica
$\boldsymbol{\tau}$	Tensor deviatório das tensões
φ	Variável escalar genérica
ϕ	Variável genérica
Ω	Ângulo sólido espectral
$\boldsymbol{\Omega}$	Tensor da taxa de rotação média
χ	Taxa de dissipação do escalar fração de mistura
ω	Taxa de dissipação específica da energia cinética turbulenta
$\dot{\omega}$	Taxa de produção/destruição de massa

Sub-Índices

a	Átomo a
ad	Condição adiabática da chama (<i>adiabatic</i>)
b	Sentido reverso da reação (<i>backward</i>)
ex	Condição de extinção da chama (<i>extinguishment</i>)
f	Sentido de avanço da reação (<i>forward</i>)
F	Combustível (<i>fuel</i>)
g	Gás cinza g
i	Quantidade genérica i
j	Elemento químico j
k	Espécie química k
m	Reação química m
O	Oxidante (<i>oxidizer</i>)
P	Produtos (<i>products</i>)
rms	Raiz do valor quadrático médio (<i>root mean square</i>)
st	Condição estequiométrica da chama (<i>stoichiometry</i>)
t	Regime turbulento
1	Corrente de combustível puro
2	Corrente de oxidante puro

Super-Índices

eq	Condição de equilíbrio químico (<i>equilibrium</i>)
0	Estado ambiente de referência
'	Reagentes; Parte instantânea dependente do tempo de uma variável
"	Produtos; Parte instantânea dependente do tempo de uma variável ponderada na massa

1 INTRODUÇÃO

A maior parte da energia consumida mundialmente é provida pela queima de combustíveis, sejam eles ou não de origem fóssil. E apesar do rápido desenvolvimento de fontes alternativas, a produção de energia a partir da combustão ainda deverá prevalecer ao longo das próximas décadas, uma vez que, de acordo com estatísticas de produção mundial de energia da Agência Internacional de Energia (IEA – *International Energy Agency*), não é percebida uma mudança nessa tendência, como pode ser observada na Figura 1.1 para a evolução das fontes primárias de energia mundiais ao longo das últimas décadas.

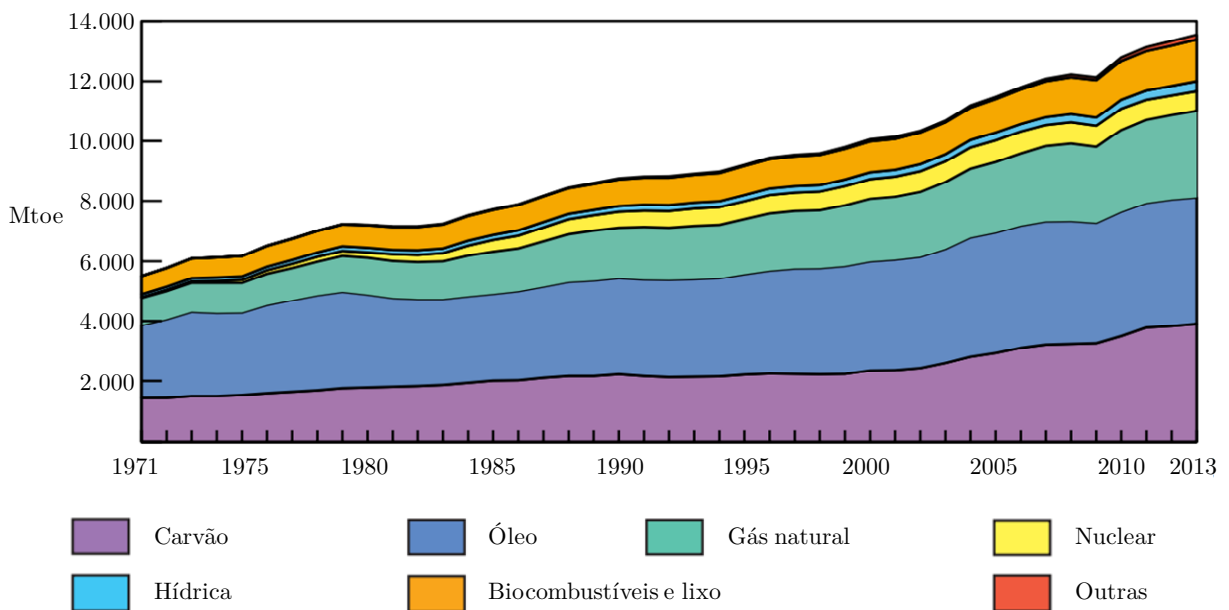


Figura 1.1 – Fontes primárias de energia mundiais ao longo das últimas décadas (a unidade *toe* é definida como a energia equivalente a uma tonelada de óleo, i.e., $1 \text{ toe} = 41,87 \cdot 10^9 \text{ J}$) [adaptada de International Energy Agency, 2015, p. 6]

O Brasil, privilegiado em fontes hídricas, teve 65,2% de sua energia elétrica obtida a partir das forças da água no ano de 2014 [Empresa de Pesquisa Energética (Brasil), 2015, p. 16], tornando-o quase uma exceção no panorama mundial. Contudo, em relação ao suprimento primário de energia, a situação não é muito diferente daquela no restante do planeta, ou seja, a maior parte das fontes primárias brasileiras está relacionada à combustão, conforme pode ser visto na divisão das fontes domésticas nacionais, de acordo com a Figura 1.2.

O consumo de energia está certamente ligado ao nosso modo de vida, afetando aspectos relativos ao avanço tecnológico e de mobilidade, influenciando diretamente o conforto e a qualidade de vida humana. Nesse âmbito, a combustão turbulenta de chamas não pré-misturadas é certamente a mais encontrada na maioria das aplicações, sobretudo as industriais, uma vez que permite um controle significativamente mais fácil do que as chamas pré-misturadas.

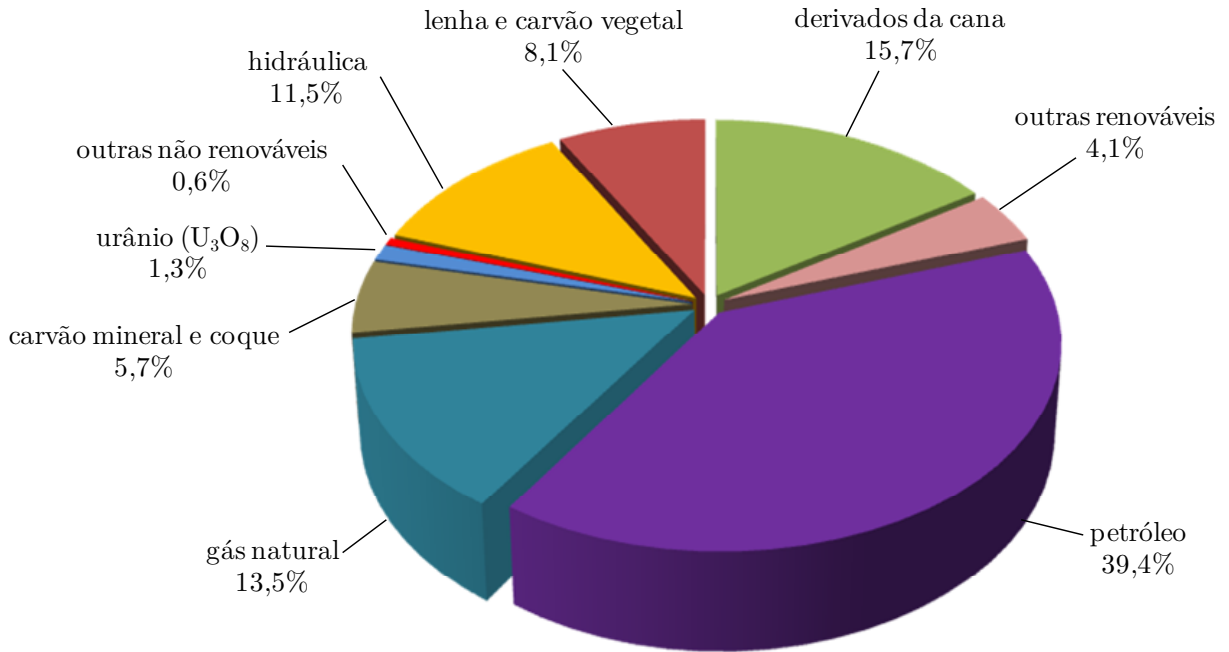


Figura 1.2 – Fontes primárias domésticas de energia no Brasil em 2014
[adaptada de Empresa de Pesquisa Energética (Brasil), 2015, p. 24]

Apesar da complexidade teórica envolvida na combustão turbulenta, a participação da turbulência em conjunto com as reações químicas costuma ser muito vantajosa para estas finalidades práticas, promovendo a mistura dos reagentes e o transporte de calor de forma bastante eficiente, uma vez que a difusão turbulenta é muito maior que a molecular. Devido a tais dificuldades teóricas, a combustão turbulenta foi estudada quase que exclusivamente de forma empírica ao longo de muitos anos. Avanços teóricos significativos no seu entendimento vieram somente no final dos anos 1970, através da simulação numérica, amparados em boa parte pelo avanço na computação [Law, 2006, p. 474].

1.1 Motivação

A simulação numérica de chamas turbulentas é ainda hoje um desafio para as práticas de mecânica dos fluidos computacional (CFD - *Computational Fluid Dynamics*), apesar dos avanços na computação observados nas últimas décadas, tornando os modelos numéricos mais completos e realísticos praticamente proibitivos para até mesmo pesquisas científicas. Em conjunto a isso, o desenvolvimento de tecnologias mais eficientes e menos poluentes nos processos de combustão tem se tornado uma exigência cada vez mais intensa e presente.

Na indústria há uma tendência para tornar o ciclo de desenvolvimento de novos produtos cada vez mais curto e mais eficiente, ciclo esse que pode compreender uma combinação de experimentos e simulações numéricas. Experimentos, por sua vez, costumam exigir muito dinheiro e tempo na sua realização, o que tem tornado as práticas CFD cada vez mais visadas.

Compreendendo que os modelos numéricos mais realísticos para a combustão turbulenta podem levar a metodologias muito dispendiosas computacionalmente, como fazer com que eles sejam acomodados em códigos CFD ainda práticos, mas ainda mantendo a sua consistência física e de uma forma que haja pouco sacrifício da qualidade dos resultados? Esta questão nos leva então a uma série de modelos teóricos que visam reproduzir os diversos fenômenos envolvidos na combustão de uma forma simplificada, mas ainda fisicamente coerente.

A compreensão teórica da combustão não é uma tarefa fácil, uma vez que nela está compreendida uma grande diversidade de fenômenos físicos, ligados uns aos outros de uma forma bastante complexa, sobretudo na combustão turbulenta. Ademais, ao analisar os resultados de uma simulação numérica, é difícil determinar a contribuição de cada submodelo (ou combinação de submodelos). Sendo assim, pode ser muito vantajosa a validação de cada modelo ou submodelo teórico de forma isolada, separando-os o quanto possível.

1.2 Revisão Bibliográfica

Tendo em vista que é praticamente proibitiva a utilização dos modelos mais completos na solução em escala real da combustão turbulenta, o presente trabalho é, portanto, dedicado à avaliação de diferentes modelos de turbulência e de abordagens para simplificação da cinética química na solução numérica de chamas turbulentas não pré-misturadas do tipo jato.

1.2.1 Modelagem da Turbulência em escoamentos Reativos

A turbulência por si só está longe de ser plenamente compreendida, sendo provavelmente um dos problemas não resolvidos mais significativos na física clássica. Contudo, uma vez que a turbulência está presente em praticamente todas as aplicações de engenharia que envolvam escoamentos, existe uma necessidade de resolvê-la, mesmo que através de soluções preliminares, denominadas modelos de fechamento.

Os modelos fechamento da turbulência partem das equações de Navier-Stokes, tomando-as como base até certo ponto, mas introduzindo hipóteses para a modelagem de alguns dos termos, suportadas por argumentos dimensionais e empirismo. A evolução destes modelos alcançou um sucesso expressivo na solução de problemas de engenharia, pelo menos enquanto eram empregados apenas em escoamentos sem a presença de reações químicas.

A combustão turbulenta introduziu um novo desafio às técnicas CFD. A mistura entre combustível e oxidante acontece a nível molecular, em uma escala muito menor que a faixa dos diferentes tamanhos das estruturas da turbulência. Assim, ao mesmo tempo que a turbulência promove a mistura entre os reagentes, de fato, as reações se dão apenas nos interstícios dos menores vórtices do escoamento. As previsões mais otimistas estimam que em problemas reais a solução de todas estas diversas escalas dos escoamentos turbulentos

reativos só acontecerá daqui a algumas décadas [Pope, 2013]. Além disso, a turbulência apresenta um comportamento transiente e não determinístico, portanto, qualquer técnica CFD que se proponha a resolver por completo o fenômeno deverá ser transiente, mesmo que o escoamento seja estacionário.

Ao lidar com escoamentos turbulentos existem diferentes vias matemáticas e computacionais pelas quais pode ser abordado o fenômeno. Nos escoamentos reativos a abordagem baseada nas equações de Navier-Stokes em médias de Reynolds (RANS - *Reynolds-Averaged Navier-Stokes equations*) é ainda bastante difundida, apesar de disponíveis metodologias mais avançadas, como a simulação de grandes escalas (LES - *Large-Eddy Simulation*) ou a simulação numérica direta (DNS - *Direct Numerical Simulation*). A abordagem RANS oferece um bom compromisso entre custo computacional e fidelidade dos resultados, o que permite sua utilização em problemas mais complexos.

Contudo, dentro da abordagem RANS existe uma grande variedade de modelos de fechamento para a turbulência, e nos quais em cada um deles pode haver ainda a possibilidade de realizar outras modificações, como nos valores de suas constantes. Esta diversidade de modelos e modificações se fazem justificáveis tendo em vista o fato de a turbulência não ser um fenômeno universal, e fortemente dependente das condições de contorno iniciais dos problemas [George et al., 2001]. Sendo assim, para que sejam obtidos resultados satisfatórios quanto a sua fidelidade é preciso antes avaliar as melhores alternativas disponíveis nos modelos.

No presente trabalho, para a comparação dos modelos de turbulência RANS foi escolhido como referência um jato livre não reativo e isotérmico de propano circundado por um escoamento coaxial de ar. O caso escolhido foi conduzido experimentalmente no *Sandia Turbulent Diffusion Flame Facility* [Schefer et al., 1986 e 1987; Schefer e Dibble, 1986 e 2001; Dibble et al., 1987], fazendo parte como um dos casos de referência para o *International Workshop on Measurement and Computation of Turbulent Nonpremixed Flames* [Sandia National Laboratories]. Desde que seus resultados foram disponibilizados, o caso tem sido explorado numericamente em uma série de trabalhos, geralmente com o objetivo de validar novos modelos numéricos desenvolvidos ou na comparação de diferentes modelos já existentes. Estes trabalhos são revisados brevemente a seguir.

O primeiro estudo numérico no qual foi empregado este caso foi o de Gouldin et al., 1986, com praticamente a mesma equipe que conduziu o experimento. Os autores empregaram um modelo similar ao modelo $k-\varepsilon$ Padrão, mas mais sofisticado, que consistiu de equações de transporte para as velocidades médias, a fração mássica média de propano, as componentes das tensões de Reynolds, a variância da fração mássica de propano, os fluxos escalares e as taxas de dissipação da energia cinética turbulenta e da fração mássica de propano. Também são notáveis no seu modelo de turbulência as constantes utilizadas ($C_{\varepsilon 1} = 1,45$, $C_{\varepsilon 2} = 1,90$ e $C_{\varepsilon 3} = 1,45$), levemente modificadas em relação aos valores padrões do modelo $k-\varepsilon$ Padrão ($C_{\varepsilon 1} = 1,44$, $C_{\varepsilon 2} = 1,92$ e $C_{\varepsilon 3} = \tanh|\tilde{v}/\tilde{u}|$), como proposto por

Launder e Spalding, 1972. Os autores apresentam os resultados ao longo da linha central e em $x/D = 30$ para a velocidade longitudinal, sua flutuação e a fração mássica de propano. Os perfis axiais parecem bastante consistentes com os dados experimentais. Contudo, os perfis radiais em $x/D = 30$ mostram alguns desvios significativos, especialmente para a fração mássica de propano.

Chen, 1987, empregou um modelo condicional de segunda ordem comparando a combinação de quatro funções de densidade de probabilidade compostas distintas. O autor se focou nos resultados para a velocidade longitudinal, a fração mássica de propano e sua intermitência, γ , sendo esta última definida como a fração de tempo que a fração mássica de propano é maior que um limite próximo de zero. Os resultados obtidos com cada uma das quatro funções de densidade de probabilidade empregadas são apenas levemente diferentes.

Morgans et al., 1999, por sua vez, compararam a eficácia do modelo $k-\omega$ Padrão, na época recentemente revisado por Wilcox, em 1998, contra o modelo $k-\varepsilon$ Padrão, com os valores padrões para as constantes e com a modificação proposta por Morse, 1977, e Pope, 1978. Os autores avaliaram apenas a velocidade longitudinal média e a energia cinética turbulenta. Nas suas simulações, o modelo $k-\omega$ Padrão se mostrou muito superior ao modelo $k-\varepsilon$ Padrão sem modificações, mas no máximo tão bom quanto o modelo $k-\varepsilon$ Padrão ajustado conforme proposto por Pope, 1978.

Imine et al., 2005, empregaram o modelo $k-\varepsilon$ Padrão com os valores padrões para suas constantes, mas com a inclusão de uma nova equação de transporte para a variância da fração mássica de propano. Os autores investigaram três casos diferentes de escoamentos de massa específica variável, e para o escoamento de propano-ar no artigo são apresentados apenas os resultados para a variância da fração mássica de propano. De uma forma geral, os autores concluíram que é evidente a má concordância entre os resultados numéricos e os experimentais, o que eles atribuem ao fato de o modelo $k-\varepsilon$ Padrão ser um modelo de turbulência isotrópico, de forma a causar uma superestimação na variância da fração mássica de propano. Gharbi et al., 1996, p. 1879, observaram esse mesmo comportamento na simulação de outros jatos turbulentos de massa específica variável, e concluíram que a anisotropia não é bem prevista com os modelos $k-\varepsilon$ tradicionais.

Olivieri et al., 2011, compararam os resultados de duas abordagens. O primeiro, um modelo $k-\varepsilon$ com a inclusão de uma nova equação de transporte para a intermitência da fração mássica de propano, desenvolvido por Cho e Chung, 1992, e com as constantes do modelo conforme Alvani e Fairweather, 2008. Já o segundo, um modelo para as tensões de Reynolds, também com a inclusão de uma nova equação de transporte para a intermitência da fração mássica de propano, baseado na combinação e extensão dos modelos de Jones e Musonge, 1988, e Savill, 2002. Ambas as abordagens foram acopladas a soluções de funções de densidade de probabilidade para variáveis escalares. Os autores compararam os valores numéricos e experimentais dos perfis radiais, para diversas distâncias medidas a partir da saída do bico injetor de propano, para a velocidade longitudinal e sua variância, para a fração

mássica de propano e sua variância, e para as tensões cisalhantes e a intermitência da fração mássica de propano. O modelo *Reynolds stress- γ* se mostrou claramente superior ao modelo *k- ϵ - γ* .

Uma simulação LES é devida a Gilliland et al., 2012, com a incorporação de uma equação de transporte para a intermitência da fração mássica de propano. Os resultados mostraram boa concordância com os valores experimentais, contudo, são apresentados apenas os resultados para a fração mássica de propano, sua variância e intermitência.

Não foi encontrado na literatura disponível trabalho que apresente uma comparação ampla, sistemática e quantitativa dos modelos de fechamento para este problema. Além disso, os trabalhos revisados apresentam os resultados para apenas algumas variáveis medidas experimentalmente, e na maioria deles para poucas posições.

1.2.2 Modelos Baseados no Conceito de *Flamelets*

Em relação à parte reativa do escoamento, uma alternativa reside no conceito de *flamelets*. Modelos nele baseados assumem que uma chama multidimensional pode ser vista como um conjunto de estruturas de chamas laminares quase unidimensionais, denominadas *flamelets*. Cada *flamelet* é submetido às condições locais do escoamento, resultando na sua convecção e no seu estiramento, contudo, mantendo sua estrutura interna preservada.

Esta abordagem permite a separação da interação entre as reações químicas e o campo do escoamento. Dessa forma, a estrutura local da chama pode então ser descrita por parâmetros locais do escoamento somente, usualmente a fração de mistura, em conjunto com alguma outra variável que consiga contabilizar o afastamento da condição de equilíbrio químico ou que rastreie a posição de reação da chama.

Sendo assim, a estrutura laminar dos *flamelets* pode ser pré-calculada e tabulada em um banco de dados, contendo os escalares reativos mais importantes, parametrizados por um pequeno número de variáveis de controle. Uma vez conhecidos os valores destes parâmetros no escoamento, as quantidades termoquímicas podem ser recuperadas do banco de dados.

Esta visão foi primeiramente proposta por Williams, 1975. Mais tarde, Liew et al., 1981, propuseram a utilização de perfis obtidos a partir de chamas não pré-misturadas laminares na solução dos valores médios em chamas turbulentas. As equações para descrever a estrutura dos *flamelets* foram pela primeira vez propostas por Peters, 1980, e Kuznetsov, 1982, de forma independente. Desenvolvimentos subsequentes tornaram esta metodologia uma ferramenta poderosa e bastante popular entre os pesquisadores na área da combustão.

O sucesso do conceito de *flamelets* fez também que surgisse uma série de variações nos modelos. Este trabalho é então dedicado a dois deles, o SLDF (*Steady Laminar Diffusion Flamelet*) e o FGM (*Flamelet-Generated Manifold*).

O SLDF foi formalizado por Peters, 1984, alguns anos após ter proposto o equacionamento que descreveria a estrutura dos *flamelets*. Desde então tem sido aplicado, na

sua forma original ou com pequenas modificações, na solução de escoamentos reativos diversos, para chamas laminares ou turbulentas. Em relação a chamas não pré-misturadas turbulentas, alguns dos exemplos de pesquisas a ele relacionadas são os trabalhos de Lentini e Puri, 1995, Sanders et al., 1997, Pitsch, 2000, Coelho e Peters, 2001, Wen et al., 2003, Claramunt, 2005, Hossain e Malalasekera, 2005, Yilmaz et al., 2005, Odedra e Malalasekera, 2007, Lee e Choi, 2009, Ravikanti et al., 2009, Emami e Fard, 2012, e Ziani et al., 2013.

O desenvolvimento do modelo FGM, contudo, é menos ordenado, tendo propostas similares sendo apresentadas por pesquisadores diversos em um curto espaço de tempo. Por exemplo, a fim de determinar a propagação da chama e altura de levantamento na combustão de jatos turbulentos de metano, Müller et al., 1994, combinaram o conceito de *flamelets* com a teoria da equação G (de propagação da frente de chama), esta última uma formulação desenvolvida inicialmente para a combustão pré-misturada. Mais adiante, no ano 2000, dois grupos distintos, trabalhando independentemente, propuseram uma evolução de outras técnicas de redução automática da cinética química, como o *Intrinsic-Low Dimensional Manifold* (ILDm), de Maas e Pope, 1992, e o próprio SLDF. Os modelos desenvolvidos são similares, mas receberam nomenclaturas distintas, um deles como *Flamelet-Generated Manifold* (FGM) [van Oijen e de Goey, 2000] e o outro como *Flame Prolongation of the ILDM* (FPI) [Gicquel et al., 2000]. Por fim, Pierce, 2001, com o objetivo de melhorar a predição da altura de levantamento e da ignição e extinção de chamas não pré-misturadas, combinou o modelo SLDF com a teoria da equação C (do conceito de progresso da reação), denominando o seu modelo como *Flamelet-Progress Variable* (FPV), trabalho que só veio à comunidade científica na forma de artigo alguns anos depois [Pierce e Moin, 2004].

Alguns dos exemplos das pesquisas nas quais foi empregado o FPV na solução de chamas não pré-misturadas turbulentas são os trabalhos de Pitsch e Ihme, 2005, Cecere et al., 2007, Zhouqin et al., 2010, e Coclite et al., 2015a, tendo somente este último empregado a abordagem RANS. A maioria dos trabalhos com o FPV utiliza a abordagem LES. Os trabalhos nos quais foi empregada a designação FGM ou FPI, contudo, têm majoritariamente se concentrado na modelagem de chamas totalmente e parcialmente pré-misturadas, para as quais o modelo foi originalmente proposto. Sua utilização na combustão completamente não pré-misturada é bem mais ocasional, tendo como alguns exemplos os trabalhos de Verhoeven, 2011, Verhoeven et al., 2012 e 2013, e Hoerlle, 2015, na investigação de chamas laminares, e os de Bekdemir, 2008, e Bekdemir et al., 2009a, 2009b e 2011, para jatos de diesel na forma de *spray*.

Em vista desta diversidade de nomenclaturas para modelos similares, no presente trabalho foi escolhida a designação utilizada no código CFD comercial empregado (ANSYS Fluent), ou seja, *Flamelet-Generated Manifold* (FGM), apesar de não ser integralmente igual a nenhum dos modelos acima citados. Essa variação entre os modelos é tratada brevemente na Seção 2.5.4.

1.2.2.1 Estudos Comparativos entre os Modelos SLDF e FGM

Os estudos nos quais foram confrontados estes dois modelos, o SLDF e o FGM, são ainda bastante escassos. O primeiro deles foi o de Pierce, 2001, no qual os modelos foram comparados na simulação LES de um jato de metano em um combustor com configuração coaxial. No trabalho é facilmente observada uma vantagem do FGM sobre o SLDF na solução do caso sob investigação, prevendo de forma significativamente melhor a concentração das espécies químicas e a posição da chama, tendo o SLDF se aproximado à solução obtida com um modelo de cinética química rápida baseado somente no equilíbrio químico, também utilizado na comparação. Ademais, o modelo FGM foi capaz de prever uma extinção local próxima da saída do jato de combustível, com conseqüente levantamento da chama, efeito esse que não foi capturado pelo SLDF, o qual resultou em uma chama completamente ancorada ao injetor de combustível da câmara.

Outra simulação LES comparando os modelos é devida a Zhouqin et al., 2010. No seu estudo, que consistiu da simulação da combustão de um jato supersônico de hidrogênio em um bocal convergente-divergente, foi observado que o modelo FGM prevê de forma mais satisfatória a mistura entre os reagentes e o formato da chama do que o SLDF. Novamente, o SLDF não conseguiu prever o levantamento da chama, como o fez o FGM.

Jha e Groth, 2011, por sua vez, compararam os modelos na solução de chamas laminares nas configurações de correntes opostas e de correntes paralelas. Na chama com contracorrentes, de metano e ar, os dois métodos se mostraram muito similares e bastante satisfatórios em relação à concordância com os resultados experimentais. Já na solução da chama de correntes paralelas, de metano diluído com nitrogênio e de ar, o FGM se mostrou superior ao SLDF em relação à solução obtida com um mecanismo de cinética química completo, sendo, mais uma vez, capaz de prever o levantamento da chama, o que não foi possível com o SLDF.

No presente trabalho, para a comparação dos modelos SLDF e FGM foi escolhida como base uma chama não pré-misturada de $\text{CH}_4/\text{H}_2/\text{N}_2$, denominada *DLR-A*, conduzida experimentalmente pela primeira vez no *DLR Institute of Combustion Technology* de Stuttgart [Bergmann, 1998]. Assim como o jato isotérmico e não reativo previamente descrito, esta chama também faz parte como um dos casos de referência do *International Workshop on Measurement and Computation of Turbulent Nonpremixed Flames* [TNF Workshop, 1998]. Desde que disponibilizados seus resultados, o caso tem sido amplamente explorado, servindo como referência para diversos estudos numéricos [Pitsch, 2000; Kim et al., 2005; Yilmaz et al., 2005; Tabet-Helal et al., 2007; Lee e Choi, 2009; Emami e Fard, 2012; Ziani et al., 2013]. Dentre estes, cinco empregaram o modelo SLDF, os quais são revisados brevemente a seguir.

Ziani et al., 2013, avaliou o desempenho do modelo SLDF na solução numérica da chama *DLR-A* em conjunto com três modelos de turbulência diferentes, o $k-\varepsilon$ Padrão na sua

versão original, o $k-\varepsilon$ Padrão ajustado de acordo com Morse, 1977, e Pope, 1978, e o modelo de transporte das tensões de Reynolds (RSTM - *Reynolds Stress Transport Model*). Para a solução dos *flamelets* laminares os autores utilizaram o mecanismo de cinética química GRI-Mech 2.11 [Bowman et al., 1995], que contém 49 espécies químicas, envolvidas em 277 reações elementares. Suas simulações numéricas foram realizadas com uma malha de simetria radial e com cerca de 16.400 volumes de controle, adotando discretizações espaciais com o esquema *upwind* de primeira ordem. O trabalho apresenta resultados apenas para a temperatura e a fração mássica de metano, na forma de perfis radiais para as posições em $x/D = 5$ e 40. Em $x/D = 5$ os modelos de turbulência se mostraram relativamente próximos, mas certamente com vantagem da versão ajustada do $k-\varepsilon$ Padrão sobre os demais. Em $x/D = 40$, porém, a versão original do $k-\varepsilon$ Padrão e o RSTM se mostraram muito aquém do esperado, com resultados muito distantes das medições experimentais, sobretudo na região central do jato, com ambos os modelos de turbulência resultando em uma superpredição da temperatura e uma subpredição da concentração do metano nessa região, posição na qual a versão ajustada do $k-\varepsilon$ Padrão se mostrou muito melhor.

Pitsch, 2000, também empregou o modelo SLDF em conjunto com a versão modificada por Morse, 1977, e Pope, 1978, para o $k-\varepsilon$ Padrão. Contudo, sua modelagem incluiu ainda uma modificação para a incorporação de *flamelets* transientes na formulação do modelo SLDF, denominado *Lagrangian Flamelet Model* (LFM), modelo este tratado em detalhes por Pitsch et al., 1998. A maior parte dos resultados apresentados, na forma de perfis axiais e radiais, foi obtida empregando um mecanismo de cinética química composto por 20 reações elementares, reduzido a partir do mecanismo detalhado de Warnatz et al., 2006. De uma forma geral, houve uma boa concordância com as medições experimentais. O seu mecanismo de cinética química também foi confrontando com o GRI-Mech 2.11 e com o mecanismo reduzido de Peters, 1993, composto por 14 reações elementares. No caso da temperatura e da fração mássica de CH_4 , os resultados nos perfis axiais são praticamente indistinguíveis entre os modelos, indicando que o consumo de combustível e a liberação de calor são descritos de forma muito similar por estes mecanismos de cinética química. O autor indica ainda que o mesmo foi observado nas frações mássicas de H_2 e H_2O , apesar de não apresentar os seus perfis. Contudo, os mecanismos mostram resultados diversos para as concentrações de CO_2 e CO , com uma vantagem do mecanismo de Bowman et al. no caso do CO_2 , e do mecanismo de Peters, 1993, no caso do CO , o que evidencia a importância de fazer uma boa escolha do mecanismo de cinética química para cada caso.

Ainda no mesmo trabalho, o autor também investigou os efeitos da difusão preferencial, confrontando a consideração de Lewis unitário para todas as espécies contra os resultados de uma formulação de *flamelets* que dá conta dos efeitos da difusão preferencial [Pitsch e Peters, 1998]. Na sua avaliação, foi observado que os resultados próximos à saída do bico injetor foram melhor previstos pela formulação com Lewis não unitário, região na qual os autores assumem ser mais intensa a influência da difusão preferencial. Contudo, para as

regiões mais distantes do bico injetor, os resultados obtidos com esta formulação se distanciaram das medições experimentais, sendo forçados a uma correção muito forte da concentração de algumas espécies, como, por exemplo, subpredizendo a fração mássica do CO_2 , e superestimando a do CO . Para essas regiões mais distantes do bico injetor, o modelo com Lewis unitário se mostrou com melhor desempenho.

Emami e Fard, 2012, também empregaram a versão modificada por Morse, 1977, e Pope, 1978, para o $k-\varepsilon$ Padrão em conjunto com um modelo de *flamelets* transientes. Para a solução dos *flamelets* laminares os autores utilizaram o mecanismo de cinética química GRI-Mech 3.0 [Smith et al., 1999], que contém 53 espécies químicas, envolvidas em 325 reações elementares. Suas simulações numéricas foram realizadas com uma malha de simetria radial com 18.900 volumes de controle, adotando discretizações espaciais de segunda ordem. O trabalho apresenta os resultados para a temperatura, a fração de mistura e a fração mássica das espécies na forma de perfis radiais para posições diversas medidas a partir da saída do bico injetor. De uma forma geral, foi observada uma boa concordância com as medições experimentais para os valores médios destas propriedades, e razoável no caso nas suas variâncias. Em alguns desses perfis são também comparadas as soluções obtidas através de um modelo de combustão baseado apenas no equilíbrio químico, sendo que este último se mostrou muito inferior ao modelo baseado no conceito de *flamelets*.

Lee e Choi, 2009, empregaram o modelo SLDF em conjunto com a versão original do $k-\varepsilon$ Padrão. Os autores também avaliaram a contribuição da radiação térmica na modelagem do problema, através de um modelo para meios opticamente finos, e da incorporação de *flamelets* transientes, através do *Eulerian Particle Flamelet Model* (EPFM), de Barths et al., 1998a. Os autores empregaram como mecanismo de cinética química o GRI-Mech 3.0, em conjunto com as sub-rotinas do ChemKin-II [Kee et al., 1989] e do TRANFIT [Kee et al., 1983] para obter as propriedades termodinâmicas e de transporte de cada espécie. Suas simulações numéricas foram realizadas com uma malha de simetria radial com 5.600 volumes de controle. No trabalho os resultados são apresentados na forma de perfis axiais para a temperatura, a fração de mistura e as concentrações molares de algumas espécies químicas, no qual foi possível observar uma significativa melhora dos resultados com a inclusão da radiação térmica e dos *flamelets* transientes na modelagem do problema. Para a temperatura, a modelagem sem a radiação resultou em valores significativamente superiores às medições experimentais para a região longe do bico injetor. Os ganhos com a inclusão dos *flamelets* transientes, por sua vez, foram melhor observados na correção do comportamento das concentrações do OH e do NO , sendo que as demais espécies foram bem resolvidas mesmo com a formulação de *flamelets* estacionários apenas.

No trabalho de Yilmaz et al., 2005, por sua vez, o modelo SLDF foi empregado em conjunto com a abordagem LES. Para a solução dos *flamelets* laminares os autores empregaram um mecanismo de cinético química composto por 18 espécies, no qual estão presentes também as reações de formação do NO . Os resultados para a temperatura, fração

de mistura e fração mássica das espécies são apresentados na forma de perfis axiais. De uma forma geral, foi observada uma boa concordância com as medições experimentais, com exceção do NO, o que os autores atribuem ao fato de seu modelo não dar conta dos efeitos combinados da cinética química e da modelagem do escoamento. E assim como observado por Emami e Fard, 2012, as soluções obtidas com o modelo baseado no conceito de *flamelets* também foram melhores do que aqueles obtidos do equilíbrio químico apenas.

Contudo, apesar dessa diversidade de estudos numéricos para a chama *DLR-A*, inclusive com modelos baseados no conceito de *flamelets*, nenhum deles empregou o modelo FGM.

1.3 Objetivos

O objetivo principal deste trabalho é a avaliação de modelos de turbulência RANS e de modelos para simplificação da cinética química baseados no conceito de *flamelets*, com e sem radiação térmica, na simulação numérica de chamas turbulentas não pré-misturadas. Para tanto, este trabalho é dividido nas etapas dadas a seguir:

- i. Comparação de seis modelos de turbulência RANS baseados em duas equações diferenciais parciais na solução de um escoamento turbulento de massa específica variável, não reativo e isotérmico, composto por um jato central de propano circundado por uma corrente paralela de ar. Os modelos investigados são o $k-\varepsilon$ Padrão (empregado na sua versão original e com mais duas modificações nas suas constantes conforme propostas encontradas na literatura), o $k-\varepsilon$ *Realizable*, o $k-\omega$ Padrão e o $k-\omega$ *Shear-Stress Transport*.
- ii. Comparação dos modelos *Steady Laminar Diffusion Flamelet* e *Flamelet-Generated Manifold*, com e sem radiação térmica, na solução de uma chama turbulenta não pré-misturada de metano/hidrogênio/nitrogênio, circundada por um escoamento coaxial de ar de baixa velocidade.

2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

No presente capítulo são abordados os elementos teóricos que dão consistência aos objetivos deste trabalho. O capítulo foi dividido de forma a dar conta da modelagem numérica de chamas não pré-misturadas através do método dos volumes finitos (FVM - *Finite Volume Method*), na sua forma detalhada e através de modelos de redução da cinética química baseados no conceito de *flamelets*, apresentando as equações de conservação das variáveis resolvidas, os cálculos das propriedades e a modelagem da cinética química. Também são abordados os modelos de fechamento da turbulência e da radiação térmica.

2.1 Chamas Não Pré-Misturadas

Chamas não pré-misturadas, também designadas por chamas difusivas, ou de difusão, são aquelas nas quais os reagentes estão inicialmente separados, com o oxidante e o combustível se combinando através de difusão. Dessa forma, a combustão ocorre na interface entre os reagentes, dado que a mistura e a combustão se dão simultaneamente.

De acordo com Coelho e Costa, 2007, p. 321, diferentemente das chamas pré-misturadas, as chamas não pré-misturadas não possuem uma propriedade característica, como velocidade de propagação, espessura de referência ou razão de equivalência. Esta última, em uma chama não pré-misturada varia desde 0, para a região onde há apenas o oxidante, a até ∞ , para a região onde há apenas o combustível.

Devido a razões de segurança, as chamas não pré-misturadas são certamente as mais encontradas em aplicações práticas, sobretudo na indústria. Um exemplo comum de uma chama não pré-misturada é a chama de uma vela. Também são comuns nos queimadores de caldeiras e fornalhas, uma vez que sua configuração, com os reagentes alimentados separadamente, facilita o controle e a estabilização da frente de chama, o que as torna mais seguras.

2.2 Modelagem de Chamas Não Pré-Misturadas

A modelagem matemática da combustão tem como base os princípios de conservação de massa total, massa das espécies químicas, quantidade de movimento e energia, em conjunto com a modelagem da cinética química e das propriedades termodinâmicas e de transporte.

As equações a seguir apresentadas podem ser encontradas em notações diversas e em uma série de textos clássicos de combustão [Coelho e Costa, 2007, p. 123-147; Law, 2006, p. 157-166; Poinot e Veynante, 2005, p. 1-21; Turns, 2000, p. 215-240; Williams, 1985, p. 2-4], de onde podem ser obtidas informações mais detalhadas sobre sua derivação, sendo que aqui são apresentadas apenas na sua forma final. Ademais, neste trabalho se optou por apresentá-

las na notação vetorial, por ser mais compacta e aplicável a qualquer sistema de coordenadas. Elas são inicialmente apresentadas assumindo um escoamento em regime laminar, sendo na sequência acopladas a modelos de transporte de energia por radiação térmica e de fechamento da turbulência.

Conservação de massa total:

A equação de conservação de massa total, oriunda de um balanço de massa sobre um elemento diferencial de volume do fluido (ou seja, um volume de controle), também conhecida como equação da continuidade, é expressa por

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0, \quad (2.1)$$

onde t é o tempo, ρ é a massa específica do fluido e \mathbf{u} é o vetor velocidade do escoamento.

Sob a consideração de que a velocidade do fluido é pequena se comparada à velocidade do som no meio (regime de baixo número de Mach, Ma), as variações na massa específica da mistura são muito mais dependentes de variações da temperatura do que da pressão, de forma que o escoamento pode ser considerado hidrodinamicamente incompressível. Com esta consideração, a equação de estado utilizada para calcular a massa específica do fluido é dada por

$$\rho = \frac{p^0 W}{R_u T}, \quad (2.2)$$

onde p^0 é a pressão de referência ambiente, W é a massa molecular da mistura, R_u é a constante universal dos gases e T é a temperatura.

Conservação de massa das espécies químicas:

A fração mássica de uma espécie química k é determinada através de uma equação de transporte, para um total de N_k espécies, tal que

$$\frac{\partial(\rho Y_k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} Y_k) = -\nabla \cdot \mathbf{j}_k + \dot{\omega}_k \quad \text{para } k = 1, N_k - 1, \quad (2.3)$$

onde Y_k é a fração mássica da espécie química k , \mathbf{j}_k é seu fluxo de difusão de massa e $\dot{\omega}_k$ é sua taxa de produção/destruição de massa. A fração mássica da espécie N_k (usualmente o inerte N_2) é encontrada através de

$$Y_{N_k} = 1 - \sum_{k=1}^{N_k-1} Y_k, \quad (2.4)$$

tendo em conta que a soma das frações mássicas de todas as espécies deve resultar na unidade, uma vez que

$$\sum_{k=1}^{N_k} Y_k = 1. \quad (2.5)$$

Sendo assim, se somadas as equações de conservação de massa de todas as espécies, chegar-se-á à equação da continuidade, uma vez que, por definição, a soma dos fluxos difusivos de todas as espécies químicas da mistura é igual a 0, assim como o somatório de todos os seus termos fontes, ou seja,

$$\sum_{k=1}^{N_k} \dot{j}_k = 0 \quad \text{e} \quad \sum_{k=1}^{N_k} \dot{\omega}_k = 0. \quad (2.6)$$

O fluxo de difusão de massa, \dot{j}_k , é devido a três fenômenos: a difusão ordinária, \dot{j}_k^d , resultante do gradiente de concentração da espécie k ; a difusão térmica, \dot{j}_k^T , nomeadamente o efeito Soret, resultante do gradiente de temperatura; e a difusão causada pelo gradiente de pressão, \dot{j}_k^p . Portanto,

$$\dot{j}_k = \dot{j}_k^d + \dot{j}_k^T + \dot{j}_k^p. \quad (2.7)$$

De acordo com Coelho e Costa, 2007, p. 128, nos casos em que a combustão ocorre à pressão atmosférica e os gradientes de pressão são pequenos, pode ser desprezada a contribuição da difusão causada pelos gradientes de pressão ($\dot{j}_k^p = 0$). O mesmo pode ser dito para a contribuição da difusão causada pelo efeito Soret, correspondente aos gradientes de temperatura ($\dot{j}_k^T = 0$), importante apenas para espécies de pequena massa molar (H, H₂, He) e a baixas temperaturas. Sendo assim, o fluxo de difusão de massa se resume ao efeito causado pelos gradientes de concentração das espécies, \dot{j}_k^d , para a qual é frequentemente assumida a Lei de Fick, dada por

$$\dot{j}_k^d = -\rho \mathcal{D}_k \nabla Y_k, \quad (2.8)$$

onde \mathcal{D}_k é um coeficiente médio de difusão de massa da espécie k dentro da mistura. Na sua determinação é comumente empregada a aproximação de Hirschfelder e Custiss [Hirschfelder et al., 1954 *apud* Poinot e Veynante, 2005, p. 14], desenvolvida para um gás com múltiplas espécies. De acordo com Ern e Giovangigli, 1994 [*apud* Poinot e Veynante, 2005, p. 14], é a melhor aproximação de primeira ordem em relação à solução mais completa, ou seja, se considerada uma difusão de massa binária entre as espécies, tarefa difícil e custosa matematicamente.

Contudo, uma forma mais simples é obter diretamente o coeficiente de difusão médio considerando um número de Lewis, Le , constante para cada espécie, uma vez que esse relaciona a difusividade térmica da mistura e a difusividade mássica das espécies, através de

$$Le_k = \frac{\lambda}{\rho C_p \mathcal{D}_k}, \quad (2.9)$$

onde λ é a condutibilidade térmica e C_p é o calor específico sob pressão constante, ambos referentes à mistura. Este último é obtido considerando-o como uma média ponderada dos calores específicos individuais das espécies, $C_{p,k}$, ou seja,

$$C_p = \sum_{k=1}^{N_k} Y_k C_{p,k}. \quad (2.10)$$

A aproximação dada na Equação 2.9 costuma ser significativamente válida, uma vez que o número de Lewis é próximo de 1 para todas as espécies químicas, especialmente no caso de escoamentos turbulentos [Coelho e Costa, 2007, p. 137-138], e variam muito pouco na frente de chama [Poinson e Veynante, 2005, p. 15].

Conservação de quantidade de movimento:

A equação de conservação de quantidade de movimento, oriunda de um balanço de forças sobre um volume de controle (ou seja, através da segunda Lei de Newton), também conhecida por equação de Navier-Stokes ou de *momentum*, é dada por

$$\frac{\partial(\rho \mathbf{u})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) = -\nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \rho \mathbf{g}, \quad (2.11)$$

na qual \mathbf{g} é o vetor aceleração gravitacional e $\boldsymbol{\tau}$ é o tensor deviatório das tensões, ou tensor das tensões viscosas, o qual, assumindo a hipótese de Stokes para um fluido newtoniano, é definido por

$$\boldsymbol{\tau} = \mu \left[\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T - \frac{2}{3} (\nabla \mathbf{u}) \mathbf{I} \right], \quad (2.12)$$

onde μ é a viscosidade dinâmica molecular do fluido e \mathbf{I} é o tensor identidade unitário, um tensor matricial no qual os termos da diagonal principal são iguais a 1 e os demais, a 0.

Do lado esquerdo da igualdade na Equação 2.11, o primeiro termo representa os efeitos temporais e o segundo, os efeitos advectivos, sendo toda a expressão à esquerda da igualdade a derivada material da velocidade do escoamento. Do lado direito da igualdade, o primeiro termo representa as forças de pressão, o segundo representa as forças de origem viscosa, e o último, as forças de campo gravitacionais, dando origem aos efeitos de empuxo.

Conservação de energia:

A equação de conservação de energia, oriunda de um balanço de energia sobre um volume de controle (ou seja, através da primeira Lei da Termodinâmica), pode ser escrita de múltiplas formas, em termos da energia total, da energia interna, da temperatura, ou da entalpia. Na implementação em códigos CFD, a forma mais convencional é esta última, em termos da entalpia total da mistura, h , dada por

$$\frac{\partial(\rho h)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} h) = \frac{Dp}{Dt} + \boldsymbol{\tau} : \nabla \mathbf{u} - \nabla \cdot \mathbf{j}_q + S_h, \quad (2.13)$$

onde \mathbf{j}_q é o fluxo de difusão de calor e S_h é um termo fonte da taxa de geração de calor por unidade de volume, devido, por exemplo, a uma centelha elétrica, um laser ou um fluxo radiativo. A derivada material da pressão, Dp/Dt , e os termos viscosos, $\boldsymbol{\tau} : \nabla \mathbf{u}$, são usualmente desprezados para escoamentos de baixos números de Mach e chamas não pré-misturadas abertas para o ambiente.

Assim como o fluxo de difusão de massa, o fluxo de difusão de calor, \mathbf{j}_q , é composto por três fenômenos: a difusão devida à concentração das espécies, conhecida como o efeito Dufour, usualmente desprezada em processos de combustão; a difusão devida aos gradientes de temperatura, governada pela Lei de Fourier; e a difusão de calor devido à difusão ordinária de massa, \mathbf{j}_k^d . Sendo assim, o fluxo de difusão de calor pode ser expresso por

$$\mathbf{j}_q = -\lambda \nabla T + \sum_{k=1}^{N_k} h_k \mathbf{j}_k^d, \quad (2.14)$$

onde h_k é a entalpia específica da espécie k .

Relacionando o gradiente de temperatura com o de entalpia, através de $\nabla h = C_p \nabla T$, e assumindo a Lei de Fick para o fluxo de difusão de massa, juntamente com a definição do número de Lewis, o fluxo de difusão de calor pode ser dado por

$$\mathbf{j}_q = -\frac{\lambda}{C_p} \nabla h + \sum_{k=1}^{N_k} \left(1 - \frac{1}{Le_k}\right) \frac{\lambda}{C_p} h_k \nabla Y_k. \quad (2.15)$$

Assim, com a utilização da Equação 2.15, a equação de balanço da energia resulta em

$$\frac{\partial(\rho h)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} h) = \nabla \cdot \left(\frac{\lambda}{C_p} \nabla h \right) - \nabla \cdot \left[\sum_{k=1}^{N_k} \left(1 - \frac{1}{Le_k}\right) \frac{\lambda}{C_p} h_k \nabla Y_k \right] + S_h. \quad (2.16)$$

O efeito das reações químicas é contabilizado na entalpia através de

$$h = \sum_{k=1}^{N_k} Y_k h_k \quad \text{e} \quad h_k = h_{f,k}^0 + \int_{T^0}^T C_{p,k}(T) dT, \quad (2.17)$$

onde $h_{f,k}^0$ é a entalpia de formação à temperatura de referência ambiente, T^0 .

Taxas de produção/destruição de massa:

O termo de produção ou destruição de massa para as espécies químicas, $\dot{\omega}_k$, foi introduzido nas equações governantes apresentadas anteriormente, mas não detalhado ainda. Este termo precisa de uma explanação acerca dos mecanismos da cinética química da combustão, feita de forma breve a seguir, para então se chegar a uma forma de expressar matematicamente essas taxas de geração de qualquer espécie química participante.

A oxidação de combustíveis formados por hidrocarbonetos é governada por uma série de etapas de reações elementares. De uma forma genérica, seja um mecanismo constituído por N_m reações, no qual intervêm N_k espécies, as N_m equações para as reações químicas podem ser expressas como [Poinsot e Veynante, 2005, p. 8-10]

$$\sum_{k=1}^{N_k} v'_{k,m} \mathcal{M}_k \Leftrightarrow \sum_{k=1}^{N_k} v''_{k,m} \mathcal{M}_k \quad \text{para} \quad m = 1, N_m, \quad (2.18)$$

na qual \mathcal{M}_k representa a espécie k , e $v'_{k,m}$ e $v''_{k,m}$ são os coeficientes estequiométricos do lado dos reagentes e dos produtos, respectivamente, para a espécie k e a reação m . O símbolo \Leftrightarrow indica que a reação pode ocorrer nos sentidos direto (*f - forward*) e reverso (*b - backward*).

Para um sistema homogêneo, a concentração das espécies envolvidas na mistura mudará com o tempo devido às reações. A velocidade com que mudam as concentrações dos reagentes/produtos é denominada taxa de reação. No caso de uma reação que ocorre no sentido dos reagentes para os produtos, a taxa de reação r_f é controlada pela concentração molar dos reagentes (termos entre colchetes),

$$r_f = k_f \prod_{k=1}^{N_k} [X_k]^{v'_{k,m}}, \quad (2.19)$$

onde k_f é o coeficiente da taxa de reação no seu sentido de avanço, por sua vez, comumente dado por uma forma modificada da equação de Arrhenius [Coelho e Costa, 2007, p. 96], tal que

$$k_f = A T^\beta \exp\left(-\frac{E_a}{R_u T}\right), \quad (2.20)$$

na qual E_a é a energia de ativação e A e β são constantes da reação, sendo a primeira um fator pré-exponencial e a segunda a que leva em conta o efeito da temperatura. Estes três últimos parâmetros devem ser encontrados empiricamente, através de procedimentos de ajuste e resultados experimentais.

A taxa de reação líquida de cada reação, r_m , por sua vez, é definida através da diferença entre a taxa de reação de avanço e reversa:

$$r_m = r_{f,m} - r_{b,m} = k_{f,m} \prod_{k=1}^{N_k} [X_k]^{v'_{k,m}} - k_{b,m} \prod_{k=1}^{N_k} [X_k]^{v''_{k,m}}. \quad (2.21)$$

O coeficiente da taxa de reação reversa, k_b , pode ser obtido da constante de equilíbrio K , dada por

$$K(p, T) = k_f/k_b, \quad (2.22)$$

que é definida e tabulada através das propriedades termodinâmicas das espécies envolvidas na reação.

Finalmente, a taxa de reação de uma espécie k , em um mecanismo com N_m reações, é dada por

$$\dot{\omega}_k = \frac{d[X_k]}{dt} = \sum_{m=1}^{N_m} v_{k,m} \left(k_{f,m} \prod_{k=1}^{N_k} [X_k]^{v'_{k,m}} - k_{b,m} \prod_{k=1}^{N_k} [X_k]^{v''_{k,m}} \right), \quad (2.23)$$

que é a expressão geral para a taxa de reação elementar. O coeficiente estequiométrico $v_{k,m} = v'_{k,m} - v''_{k,m}$, por sua vez, indica quantas moléculas da espécie k participam da m -ésima reação.

2.3 Modelagem da Radiação Térmica

A radiação térmica desempenha um papel muito importante nos processos de combustão, uma vez que é a ela devida uma parte significativa da troca do calor para o ambiente e/ou as paredes que circundam a chama, sobretudo quando há a presença da formação de partículas sólidas, ou seja, de fuligem. Quando incluída em uma simulação numérica a contribuição de um modelo para a radiação térmica, a tendência é a de diminuir os valores da temperatura da chama, sobretudo nas regiões de pico de temperatura, uma vez que a radiação térmica possui um efeito volumétrico sobre o domínio, redistribuindo os fluxos de calor na chama, sendo que a transferência de calor por radiação tem uma dependência de quarta ordem em relação à temperatura [Modest, 2013, p. 2].

São diversos os modelos de radiação térmica disponíveis na literatura, com diferentes níveis de detalhamento do fenômeno físico, ficando por conta do pesquisador determinar o balanço desejado entre refinamento dos resultados e disponibilidade de tempo e recursos computacionais. Quando consideradas a emissão e a absorção radiativa do meio participante, uma equação de transferência radiativa (RTE - *Radiative Transfer Equation*) deverá ser resolvida no espectro e no espaço para que possa ser determinada a taxa de transferência de calor devida à radiação térmica, S_{rad} . A RTE é uma equação de balanço que descreve os fenômenos de interação entre um fóton e uma molécula de gás através da variação da intensidade de radiação ao longo de um caminho. O fóton pode ser absorvido pela molécula (aumentando o nível de energia da molécula), espalhado (mudando a trajetória do fóton) ou, ainda, espontaneamente emitido pela molécula (reduzindo o nível de energia da molécula). Desconsiderando o efeito de espalhamento, a RTE pode ser escrita como

$$\frac{dI_\eta}{ds} = -\kappa_\eta I_\eta + \kappa_\eta I_{b,\eta}, \quad (2.24)$$

onde I_η é a intensidade radiativa espectral, $I_{b,\eta}$ é a intensidade radiativa espectral correspondente à emissão de um corpo negro e κ_η é o coeficiente espectral de absorção radiativa. O primeiro termo no lado direito da equação corresponde a uma redução na intensidade de radiação devida à absorção, enquanto que o segundo, um aumento devido à

emissão.

Dentre os modelos que adotam a solução da RTE, o modelo de soma-ponderada-de-gases-cinzas (WSGGM - *Weighted-Sum-of-Gray-Gases Model*) oferece um bom compromisso entre os modelos mais simplistas, como o modelo de gás cinza (GGM - *Gray Gas Model*), e as formulações mais sofisticadas e completas, como o método de integração linha-por-linha (LBL - *Line-by-Line*). Neste último, a RTE é resolvida para cada comprimento de onda, o que acaba sendo excessivamente dispendioso para a maioria dos casos práticos.

Para a solução espectral, foi utilizado o WSGGM, introduzido por Hottel e Sarofim, 1967, no qual é substituída a integração das propriedades no espectro pelo somatório de um pequeno número de gases cinzas, aproximados de forma a reproduzir o comportamento altamente irregular e complexo dos gases reais, resultando na divisão do espectro em regiões onde os coeficientes de absorção podem ser considerados constantes. Sendo assim, a hipótese básica do WSGGM é a de que a emissividade total, ϵ , de um gás isotérmico e homogêneo ao longo de um caminho s pode ser aproximada por

$$\epsilon = \sum_{g=0}^{N_g} a_g [1 - \exp(-\kappa_{p,g} p s)], \quad (2.25)$$

onde a_g é o fator de ponderação para o g -ésimo gás cinza, $\kappa_{p,g}$ é seu coeficiente de absorção por unidade de pressão e p é a soma das pressões parciais de todos os gases participantes na mistura. Os valores para a_g e $\kappa_{p,g}$ dependem da composição do gás, e além da dependência em função da composição, a_g também varia em função da temperatura. Smith et al., 1982, propuseram descrever este último como um polinômio, dado por

$$a_g = \sum_{i=1}^{N_i} b_{g,i} T^{i-1}, \quad (2.26)$$

onde $b_{g,i}$ são os coeficientes polinomiais para os gases cinzas e N_i é a quantidade de coeficientes utilizados.

Os coeficientes $b_{g,i}$ e $\kappa_{p,g}$ são estimados de forma a recuperar a Equação 2.25 para os valores obtidos experimentalmente para a emissividade total. No código CFD empregado são utilizados os valores dados por Smith et al., 1982, e Coppalle e Vervisch, 1983, obtidos considerando três gases cinzas, tendo H_2O e CO_2 como os gases participantes (os quais costumam ser adequados para a combustão de hidrocarbonetos, sobretudo se não for significativa a formação de fuligem, como a chama estudada no presente trabalho) e para razões de pressões parciais (ou frações molares), p_{H_2O}/p_{CO_2} , iguais a 1 e 2.

Esses coeficientes foram obtidos para a faixa de pressão-comprimento entre 0,001 e 10 atm m e para a faixa de temperatura entre 600 e 3000 K. É sabida a existência de correlações mais recentes (a exemplo do trabalho de Dorigon et al., 2013), obtidas a partir de banco de dados espectrais atualizados, como o HITEMP2010 [Rothman et al., 2010] ou o HITRAN2012 [Rothman et al., 2013]. Contudo, no presente estudo se optou por não avançar

a modelagem da radiação térmica a tal nível.

O coeficiente de absorção para $g = 0$, $\kappa_{p,0}$, é assumido como sendo nulo. De forma a dar conta das janelas espectrais presentes entre as regiões de alta absorção ($\sum_{g=1}^{N_g} a_g < 1$) e garantir o balanço de energia, o fator de ponderação para $g = 0$, a_0 , é avaliado como sendo

$$a_0 = 1 - \sum_{g=1}^{N_g} a_g. \quad (2.27)$$

Para a solução espacial, foi utilizado o modelo de radiação de transferência discreta (DTRM - *Discrete Transfer Radiation Model*), no qual, quando em conjunto com o WSGGM, a RTE é dada por

$$\frac{dI_g}{ds} = \kappa_g(-I_g + a_g I_b) = \kappa_g \left(-I_g + a_g \frac{\sigma T^4}{\pi} \right), \quad (2.28)$$

na qual $\kappa_g = \kappa_{p,g}(p_{H_2O} + p_{CO_2})$, I_g é a intensidade radiativa do i -ésimo gás cinza, I_b é a intensidade radiativa correspondente à emissão de um corpo negro e σ é a constante de Stefan-Boltzmann. Nesta formulação da RTE não há mais a dependência espectral, como havia na Equação 2.24.

Sendo assim, os fluxos de calor devidos à radiação térmica são computados através do DTRM, no qual a mudança da intensidade radiativa de cada gás participante é integrada ao longo de cada caminho s e para direções diversas, isto é, para ângulos sólidos diversos, de forma a cobrir todo o domínio computacional. Devido a sua formulação relativamente simples, o DTRM é um dos modelos mais populares na modelagem da radiação térmica, sendo empregado em uma grande variedade de sistemas de combustão [Bressloff, 1996, p. 50].

Uma vez resolvida a RTE, o termo fonte de transferência de calor devido à radiação térmica, igual ao negativo do divergente do fluxo radiativo, \mathbf{q}_r , pode ser calculado como uma integração da intensidade radiativa de todos os raios que cruzam o volume de controle, tal que

$$S_{rad} = -\nabla \cdot \mathbf{q}_r \equiv \int_{\Omega} \sum_g \kappa_g (I_g - a_g I_b) d\Omega, \quad (2.29)$$

onde Ω é o ângulo sólido.

Neste estudo, a radiação térmica é a única forma de transferência de calor para o meio considerada, portanto, $S_h = S_{rad}$.

2.4 Modelagem da Turbulência

O fenômeno da turbulência se caracteriza pela presença de flutuações rápidas e aleatórias nas propriedades do escoamento, como a velocidade, a temperatura e a massa específica. Permanece ainda um dos problemas mais desafiadores da física clássica, e que se

complica com a inclusão das reações químicas.

Apesar da complexidade teórica introduzida pela turbulência, sua participação em conjunto com as reações químicas costuma ser bastante vantajosa, tendo em conta que ela beneficia a mistura dos reagentes e o transporte de calor. Por outro lado, vórtices muito intensos podem causar extinções locais da chama, o que prejudica a eficiência da combustão [Law, 2006, p. 477].

Ao se lidar com escoamentos turbulentos existem diferentes vias matemáticas e computacionais pelas quais pode ser abordado o fenômeno. Essas metodologias variam na forma como as equações governantes são ajustadas e implementadas computacionalmente. Para a combustão turbulenta, e para escoamentos turbulentos em geral, três métodos têm sido os mais usuais:

- i. Simulação Numérica Direta (DNS - *Direct Numerical Simulation*): É a forma mais intuitiva de se simular um escoamento turbulento, na qual as equações de Navier-Stokes são resolvidas na sua forma original, sem a necessidade de um modelo de fechamento. Contudo, necessita de uma discretização espacial e temporal altamente refinada, a fim de capturar corretamente todas as escalas do fenômeno físico, o que torna a solução numérica excessivamente custosa para os recursos computacionais atuais, se restringindo apenas a casos de escoamentos muito simples. Entretanto, não sendo utilizadas aproximações quaisquer, é a metodologia que melhor reproduz o fenômeno físico, o que faz o método permanecer como uma ferramenta poderosa na compreensão da interação entre turbulência e cinética química e ajudar na formulação de modelos de fechamento utilizados em outras metodologias.
- ii. Equações de Navier-Stokes em Médias de Reynolds (RANS - *Reynolds-Averaged Navier-Stokes equations*): Baseia-se nas equações de Navier-Stokes decompostas pela proposta de Reynolds, ou seja, na qual as quantidades instantâneas do escoamento são separadas em uma parte média, não dependente do tempo, mais uma flutuação no tempo. Desta forma, o método resolve apenas a média estatística e a variância das variáveis. O método RANS precisa, assim, de modelos de fechamento para dar conta das novas variáveis que surgem nas equações de Navier-Stokes durante sua decomposição. Trata-se de uma metodologia de custo computacional muito menor do que a DNS, o que permite sua utilização em problemas mais complexos, e com a qual, se escolhido o modelo de fechamento adequado ao problema, pode trazer resultados satisfatórios. É a técnica mais difundida na simulação de escoamentos complexos e de elevado número de Reynolds, Re , sobretudo nas que tratam da combustão turbulenta.
- iii. Simulação de Grandes Escalas (LES - *Large-Eddy Simulation*): Trata-se de uma variação da metodologia RANS, na qual ao invés de decompor as variáveis das equações governantes em uma parte média estatística temporal e outra de variação instantânea, a elas é aplicada uma filtragem espacial, em que as grandes e pequenas escalas de energia cinética do escoamento são separadas nas equações de Navier-

Stokes. As grandes escalas, que contêm as grandes estruturas do escoamento, são resolvidas diretamente das equações, enquanto que para as menores, responsáveis pela dissipação viscosa, é empregado algum modelo físico para sua aproximação. O método LES foi introduzido para superar as limitações da abordagem RANS, resolvendo exatamente o campo transiente e tridimensional do escoamento até uma escala de comprimento que seja viável à capacidade computacional, e modelando o que estiver contido em uma escala menor. Apesar de exigir um menor esforço computacional do que o método DNS, ainda é praticamente proibitivo para problemas de combustão mais complexos, uma vez que a cinética química ocorre em escalas menores que a menor escala do campo do escoamento e não há como separá-la em escalas de magnitudes distintas. Em termos de fidelidade dos resultados e custo computacional, trata-se de uma alternativa intermediária entre os métodos DNS e RANS, este último sendo adotado no presente trabalho e apresentado a seguir.

2.4.1 Modelagem RANS

À semelhança das expressões anteriormente apresentadas, as equações governantes para escoamentos turbulentos também podem ser encontradas em textos clássicos diversos, de onde podem ser obtidas informações mais detalhadas sobre sua derivação.

Como já mencionado, a abordagem RANS se baseia na decomposição das variáveis em uma parte média estatística temporal, $\bar{\phi}$, e uma parte instantânea dependente do tempo, ϕ' , dada por

$$\phi(t) = \bar{\phi} + \phi'(t) \quad \text{com} \quad \bar{\phi}' = 0. \quad (2.30)$$

Foi assim que a técnica primeiramente se desenvolveu para escoamentos incompressíveis. Para escoamentos com variação da massa específica, mesmo que não seja decorrente da variação de pressão, a decomposição de Reynolds introduz termos não resolvidos do tipo $\overline{\rho'\phi'}$, que precisam de modelagem. Estes termos atuam como um termo fonte de massa para o campo médio do escoamento, que é de difícil manipulação em códigos CFD. Para lidar com esta dificuldade são preferidas as médias ponderadas na massa, denominadas médias de Favre.

A decomposição de Favre exprime o valor instantâneo de um escalar em um valor médio e uma flutuação, na qual esse valor médio é definido através da ponderação do valor instantâneo pela massa específica do fluido. Sua utilização não compromete o conceito geral do método RANS, e conduz a equações mais simples para os campos médios das variáveis dependentes, se adaptando melhor às técnicas estatísticas desenvolvidas para a combustão turbulenta.

A média de Favre para um escalar qualquer ϕ é definida por

$$\tilde{\phi} = \frac{\overline{\rho \phi}}{\bar{\rho}}, \quad (2.31)$$

onde o til denota os termos nos quais é aplicada a média de Favre e a barra denota os termos nos quais é aplicada uma média temporal simples.

Qualquer quantidade ϕ pode ser separada em uma parte média estatística e uma parte flutuante (decomposição de Favre), tal que

$$\phi(t) = \tilde{\phi} + \phi''(t) \quad \text{com} \quad \widetilde{\phi''} = 0, \quad (2.32)$$

onde as aspas duplas são utilizadas para que não ocorra confusão com as aspas simples da decomposição de Reynolds.

Para fins práticos, de uma forma geral costuma haver uma concordância muito boa entre os resultados experimentais obtidos de técnicas de medição tidas como baseadas em médias ponderadas na massa (de Favre), a exemplo da anemometria Doppler a laser, e aquelas baseadas em médias temporais simples (de Reynolds), a exemplo da velocimetria por imagem de partículas [Zhou et al., 2013]. As maiores diferenças são esperadas na zona de reação da chama, onde ocorrem variações abruptas da massa específica do fluido, devido à expansão repentina dos gases. Contudo, na maioria dos casos a espessura da chama é muito pequena, com espessuras típicas inferiores a 0,5 mm em condições atmosféricas, uma espessura menor que a resolução espacial das técnicas usualmente empregadas. E, como mostrado por Kamal et al., 2015, mesmo assim é muito pequena a diferença dos resultados entre as técnicas de medição na região da frente de chama para o caso de chamas finas.

Utilizando o formalismo da média de Favre, as equações de conservação de massa total, de massa das espécies químicas, de quantidade de movimento e de energia para escoamentos turbulentos resultam em

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}}) = 0, \quad (2.33)$$

$$\frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{Y}_k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}} \tilde{Y}_k) = \nabla \cdot (\bar{\rho} \bar{\mathcal{D}}_k \nabla \tilde{Y}_k - \bar{\rho} \widetilde{\mathbf{u}'' Y_k''}) + \bar{\omega}_k \quad \text{para} \quad k = 1, N_k - 1, \quad (2.34)$$

$$\frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}})}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}} \tilde{\mathbf{u}}) = -\nabla \bar{p} + \nabla \cdot (\tilde{\boldsymbol{\tau}} - \bar{\rho} \widetilde{\mathbf{u}'' \mathbf{u}''}) + \bar{\rho} \mathbf{g} \quad \text{e} \quad (2.35)$$

$$\frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{h})}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}} \tilde{h}) = \nabla \cdot \left(\frac{\lambda}{C_p} \nabla h - \bar{\rho} \widetilde{\mathbf{u}'' h''} \right) - \nabla \cdot \left[\sum_{k=1}^{N_k} \left(1 - \frac{1}{Le_k} \right) \frac{\lambda}{C_p} h_k \nabla Y_k \right] + \bar{S}_h. \quad (2.36)$$

onde o tensor deviatório das tensões turbulentas, $\tilde{\boldsymbol{\tau}}$, é agora definido por

$$\tilde{\boldsymbol{\tau}} = \mu \left[\nabla \tilde{\mathbf{u}} + (\nabla \tilde{\mathbf{u}})^T - \frac{2}{3} \nabla \tilde{\mathbf{u}} \mathbf{I} \right]. \quad (2.37)$$

Como pode ser notado, surgem termos adicionais nas Equações 2.34 a 2.36, que

precisam ser modelados, uma vez que a quantidade de equações não dá conta da quantidade de variáveis envolvidas. Eles são devidos a correlações das flutuações turbulentas e são dados por valores médios dos produtos das flutuações instantâneas. E apesar de serem usualmente dispostos no lado direito das equações de transporte, juntamente com os termos difusivos, surgiram, na verdade, ao ser realizada a decomposição de Favre dos termos advectivos, do lado esquerdo. Estes termos adicionais não resolvidos são brevemente tratados a seguir.

Tensões de Reynolds ($\widetilde{\mathbf{u}''\mathbf{u}''}$):

Essas tensões adicionais são aparentes, isto é, fundamentalmente, não são tensões. Sua modelagem pode ser feita diretamente ou por derivação de equações de transporte. A maioria dos trabalhos relativos à combustão se baseia nos modelos de turbulência clássicos, desenvolvidos para escoamentos não reativos, ou seja, modelando-os diretamente.

Assumindo a hipótese de Boussinesq, ou seja, de que as tensões turbulentas podem ser tratadas de forma análoga às tensões presentes em escoamentos laminares [Wilcox, 1998], as tensões de Reynolds são dadas por

$$-\bar{\rho} \widetilde{\mathbf{u}''\mathbf{u}''} = \mu_t [\nabla \tilde{\mathbf{u}} + (\nabla \tilde{\mathbf{u}})^T] - \frac{2}{3} \bar{\rho} \tilde{k} \mathbf{I}, \quad (2.38)$$

onde μ_t é a viscosidade turbulenta e k é a energia cinética turbulenta. O último termo à direita na Equação 2.38, também conhecido como pressão modificada, representa a contribuição dada pela intensidade da energia cinética turbulenta, que, porém, costuma ser de pouca relevância. A determinação de μ_t e k , por sua vez, dependerá do modelo de turbulência adotado.

A hipótese de Boussinesq está na base dos modelos de turbulência clássicos, especialmente aqueles baseados em duas equações diferenciais parciais. Esta abordagem considera que a turbulência é isotrópica, ou seja, de que a intensidade da turbulência é igual nas direções ortogonais do escoamento.

Fluxos turbulentos de massa das espécies ($\widetilde{\mathbf{u}''Y_k''}$) e de energia ($\widetilde{\mathbf{u}''h''}$):

Estes fluxos são geralmente modelados utilizando a suposição de um gradiente clássico, tal que

$$\bar{\rho} \widetilde{\mathbf{u}''Y_k''} = -\frac{\mu_t}{Sc_t} \nabla \tilde{Y}_k \quad e \quad \bar{\rho} \widetilde{\mathbf{u}''h''} = -\frac{\mu_t}{Pr_t} \nabla \tilde{h}, \quad (2.39)$$

onde Sc_t e Pr_t são, respectivamente, os números de Schmidt e de Prandtl turbulentos.

Fluxos difusivos laminares:

Estes termos moleculares são geralmente negligenciados em face ao transporte turbulento se assumido um nível suficientemente grande de turbulência, ou seja, em regimes

com elevados números de Reynolds. Quando mantidos, os fluxos de difusão de calor laminar são simplificados como

$$\overline{\frac{\lambda}{C_p} \nabla h} = \left(\overline{\frac{\lambda}{C_p}} \right) \nabla \tilde{h}. \quad (2.40)$$

2.4.2 Modelos de Fechamento para as Equações Médias de Reynolds

Uma vez que o objetivo aqui proposto é definir o modelo de fechamento mais adequado para os casos escolhidos (jato livre isotérmico e jato livre reativo), diferentes modelos são testados, todos baseados em duas equações diferenciais parciais para o fechamento da turbulência, uma delas para a energia cinética turbulenta, k , e uma segunda para sua taxa de dissipação, ε , ou sua taxa de dissipação específica, ω .

Sendo assim, para comparação foram escolhidos quatro modelos de fechamento distintos, sendo que para um deles são adotadas duas propostas de ajuste para suas constantes, além dos valores padrões, totalizando, dessa forma, seis abordagens diferentes, a saber:

- i. Modelo k - ε Padrão sem ajuste em suas constantes;
- ii. Modelo k - ε Padrão com ajuste de acordo com Morse, 1977, e Pope, 1978;
- iii. Modelo k - ε Padrão com ajuste de acordo com Kumar e Goel, 2010;
- iv. Modelo k - ε *Realizable*;
- v. Modelo k - ω Padrão;
- vi. Modelo k - ω *Shear-Stress Transport* (SST).

2.4.2.1 Modelo k - ε Padrão

O modelo k - ε Padrão, proposto por Launder e Spalding, 1972, é o mais amplamente utilizado, devido principalmente ao seu baixo custo computacional e estabilidade numérica na convergência da solução. Suas constantes foram originadas de experimentos com água e ar para escoamentos planos fundamentalmente cisalhantes, com turbulência homogênea e isotrópica. Sua restrição mais forte é a de ser válido apenas para escoamentos plenamente turbulentos, ou seja, para elevados números de Reynolds, longe da faixa de transição. Além disso, não é recomendado para escoamentos complexos, que envolvam separação, curvaturas e gradientes de pressão severos ou com elevada anisotropia na turbulência.

Para o modelo k - ε Padrão, k e ε são obtidos das equações

$$\frac{\partial(\bar{\rho} \tilde{k})}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}} \tilde{k}) = \nabla \cdot \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \nabla \tilde{k} \right] + G_k + G_b - \bar{\rho} \tilde{\varepsilon} \quad \text{e} \quad (2.41)$$

$$\frac{\partial(\bar{\rho} \tilde{\varepsilon})}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}} \tilde{\varepsilon}) = \nabla \cdot \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \nabla \tilde{\varepsilon} \right] + C_{\varepsilon 1} \frac{\tilde{\varepsilon}}{k} (G_k + C_{\varepsilon 3} G_b) - C_{\varepsilon 2} \bar{\rho} \frac{\tilde{\varepsilon}^2}{k}, \quad (2.42)$$

nas quais G_k é o termo que controla a geração de energia cinética turbulenta devida aos gradientes da velocidade média, e G_b devido aos efeitos de empuxo, $C_{\varepsilon 1}$ e $C_{\varepsilon 2}$ são as constantes que controlam a produção e a destruição da taxa de dissipação da energia cinética turbulenta, respectivamente, enquanto que $C_{\varepsilon 3}$ controla os efeitos devidos ao empuxo, e σ_k e σ_ε correspondem aos números de Prandtl turbulentos para k e ε , respectivamente.

O termo G_k é modelado de acordo com a hipótese de Boussinesq, como

$$G_k = -\bar{\rho} \widetilde{\mathbf{u}''\mathbf{v}''} \cdot \nabla \tilde{\mathbf{u}} = \mu_t \tilde{\mathbf{S}}^2, \quad (2.43)$$

onde $\tilde{\mathbf{S}}$ é o módulo do tensor da taxa de deformação média, tal que

$$\tilde{\mathbf{S}} \equiv \sqrt{2 \tilde{\mathbf{S}}_{ij} \tilde{\mathbf{S}}_{ij}} \quad \text{e} \quad \tilde{\mathbf{S}}_{ij} = \frac{1}{2} [\nabla \tilde{\mathbf{u}} + (\nabla \tilde{\mathbf{u}})^T]. \quad (2.44)$$

O termo G_b , em escoamentos nos quais estão presentes simultaneamente um campo gravitacional e gradientes de temperatura e/ou de massa específica, é modelado como

$$G_b = -\mathbf{g} \frac{\mu_t}{\bar{\rho} Pr_t} \nabla \bar{\rho}. \quad (2.45)$$

A viscosidade turbulenta, μ_t , por sua vez, é calculada através de uma expressão algébrica secundária, combinando k e ε , dada por

$$\mu_t = \bar{\rho} C_\mu \frac{\tilde{k}^2}{\tilde{\varepsilon}}, \quad (2.46)$$

onde C_μ também é uma constante do modelo.

O que diferencia o modelo k - ε Padrão [Launder e Spalding, 1972] das modificações propostas por Morse, 1977, e Pope, 1978, e de Kumar e Goel, 2010, se restringe aos valores adotados para as constantes $C_{\varepsilon 1}$ e $C_{\varepsilon 2}$, conforme a Tabela 2.1.

Tabela 2.1 – Constantes do modelo k - ε Padrão

Modelo	$C_{\varepsilon 1}$	$C_{\varepsilon 2}$	$C_{\varepsilon 3}$	C_μ	σ_k	σ_ε
Launder e Spalding, 1972	1,44	1,92				
Morse, 1977, e Pope, 1978	1,60	1,92	$\tanh \left \frac{\tilde{v}}{\tilde{u}} \right $	0,09	1,0	1,3
Kumar e Goel, 2010	1,44	1,80				

O que originou essas modificações nas constantes do modelo k - ε Padrão foi a observação de que o modelo original, apesar de prever relativamente bem o campo de velocidades para jatos planos bidimensionais, seus resultados para jatos circulares ficavam significativamente longe do esperado. Conforme Pope, 1978, esse desvio ocorre devido a uma

superestimação da taxa de decaimento da energia cinética turbulenta, em até 40%. Este fenômeno foi por ele nomeado como “*round-jet plane-jet anomaly*” no modelo k - ε Padrão. Conseqüentemente, através de uma série de dados experimentais e de computações numéricas, muitos pesquisadores propuseram aperfeiçoamentos no modelo, de forma a deixá-lo mais preciso na solução de jatos circulares [Morse, 1977; Pope, 1978; McGuirk e Rodi, 1979].

A alternativa mais simples e mais bem sucedida foi proposta, independentemente, por Morse, 1977, e Pope, 1978, resultando na modificação da constante $C_{\varepsilon 1}$ de 1,44 para 1,60 [Dally et al., 1998]. Essa modificação é bastante popular e amplamente empregada na simulação de jatos livres, com ou sem combustão, como pode ser visto em Pitsch, 2000, Smith et al., 2003 e 2004, Emami e Fard, 2012, Zakrzewski e Ziólkowski, 2013, Ziani et al., 2013, e Deon et al., 2014.

A segunda, de Kumar e Goel, 2010, contudo, é menos conhecida, mas tem o mesmo objetivo. Nela, é ajustada a constante $C_{\varepsilon 2}$, ao invés de $C_{\varepsilon 1}$, que é modificada de 1,92 para 1,80. Sendo recente, ainda não há uma quantidade tão significativa de trabalhos com a sua utilização, mas alguns exemplos são os estudos Amami e Nobari, 2010, e de Roy et al., 2014.

Apesar de distintas, essas duas modificações apresentadas são em seu fundamento praticamente equivalentes, uma vez que ambas resultam em um aumento da razão $C_{\varepsilon 1}/C_{\varepsilon 2}$, conforme a Tabela 2.2, fazendo com que seja diminuída a taxa de decaimento da energia cinética turbulenta.

Tabela 2.2 – Razão $C_{\varepsilon 1}/C_{\varepsilon 2}$ no modelo k - ε Padrão

Modelo	$C_{\varepsilon 1}$	$C_{\varepsilon 2}$	$C_{\varepsilon 1}/C_{\varepsilon 2}$
Launder e Spalding, 1972	1,44	1,92	0,75
Morse, 1977, e Pope, 1978	1,60	1,92	0,83
Kumar e Goel, 2010	1,44	1,80	0,80

2.4.2.2 Modelo k - ε *Realizable*

O modelo k - ε *Realizable*, apresentado por Shih et al., 1995, difere significativamente do modelo k - ε Padrão, com a supressão e modificação de termos nas equações de transporte para k e ε , e devido a uma nova formulação para a viscosidade turbulenta. O termo *realizable* se refere à habilidade do modelo em satisfazer restrições matemáticas nas tensões normais e se manter consistente com a física do fenômeno.

A equação para a energia cinética turbulenta no modelo k - ε *Realizable* é a mesma do k - ε Padrão, mas difere na equação para a sua taxa de dissipação, dada por

$$\frac{\partial(\bar{\rho} \tilde{\varepsilon})}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}} \tilde{\varepsilon}) = \nabla \cdot \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \nabla \tilde{\varepsilon} \right] - C_2 \bar{\rho} \frac{\tilde{\varepsilon}^2}{k + \sqrt{\nu \tilde{\varepsilon}}} + C_{\varepsilon 1} \frac{\tilde{\varepsilon}}{k} C_{\varepsilon 3} G_b, \quad (2.47)$$

onde ν é a viscosidade cinemática do fluido, $\nu = \mu/\rho$, e $C_{\varepsilon 1}$ e C_2 são constantes do modelo, conforme a Tabela 2.3.

Tabela 2.3 – Constantes do modelo $k-\varepsilon$ *Realizable*

$C_{\varepsilon 1}$	C_2	σ_k	σ_ε
1,44	1,9	1,0	1,2

Os termos G_k e G_b e a viscosidade turbulenta são modelados como no modelo $k-\varepsilon$ Padrão. Contudo, C_μ não é mais uma constante, sendo agora dada por

$$C_\mu = A_0 + A_S \frac{\tilde{k} U^*}{\tilde{\varepsilon}}, \quad (2.48)$$

onde

$$U^* \equiv \sqrt{S_{ij} S_{ij} + \tilde{\Omega}_{ij} \tilde{\Omega}_{ij}} \quad , \quad \tilde{\Omega}_{ij} = \bar{\Omega}_{ij} - \tilde{\varepsilon}_{ijk} \tilde{w}_k \quad (2.49)$$

e $\bar{\Omega}_{ij}$ é o tensor da taxa de rotação média vista de um referencial que se move com a velocidade angular, \tilde{w}_k , tal que

$$\bar{\Omega}_{ij} = \frac{1}{2} [\nabla \tilde{u} - (\nabla \tilde{u})^T] \quad \text{e} \quad \tilde{w}_k = \frac{d\tilde{\theta}}{dt}. \quad (2.50)$$

As constantes A_0 e A_S são dadas por

$$A_0 = 4,04 \quad , \quad A_S = \sqrt{6} \cos \varphi \quad , \quad \varphi = \frac{1}{3} \cos^{-1}(\sqrt{6} \tilde{W}) \quad \text{e} \quad \tilde{W} = \frac{\tilde{S}_{ij} \tilde{S}_{jk} \tilde{S}_{ki}}{\tilde{S}^3}. \quad (2.51)$$

2.4.2.3 Modelo $k-\omega$ Padrão

O modelo $k-\omega$ Padrão, revisado por Wilcox, 1998, permite um tratamento mais preciso para as regiões próximas às paredes, com uma transição automática entre as regiões de baixos e elevados número de Reynolds. Em relação aos modelos $k-\varepsilon$, o modelo $k-\omega$ Padrão mostra desempenho superior para escoamentos confinados, com baixos números de Reynolds, sob separação e gradientes de pressão adversos. Porém, exige elevada resolução da malha próximo às paredes, caso contrário, pode antecipar e sobrepredizer a posição e intensidade da separação do escoamento.

Para o modelo $k-\omega$ Padrão, k e ω são obtidos das equações

$$\frac{\partial(\bar{\rho} \tilde{k})}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{u} \tilde{k}) = \nabla \cdot (\Gamma_k \nabla \tilde{k}) + G_k - Y_k \quad \text{e} \quad (2.52)$$

$$\frac{\partial(\bar{\rho} \tilde{\omega})}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}} \tilde{\omega}) = \nabla \cdot (\Gamma_{\omega} \nabla \tilde{\omega}) + G_{\omega} - Y_{\omega}, \quad (2.53)$$

nas quais os termos Γ_k e Γ_{ω} representam a difusividade efetiva de k e ω , respectivamente, G_k e G_{ω} representam os termos de produção de energia cinética turbulenta e de sua taxa de dissipação específica, respectivamente, e Y_k e Y_{ω} representam a dissipação de k e ω devida à turbulência.

A viscosidade turbulenta é determinada através de uma combinação de k e ω , tal que

$$\mu_t = \alpha^* \frac{\bar{\rho} \tilde{k}}{\tilde{\omega}}, \quad (2.54)$$

na qual α^* é determinado através de uma função de amortecimento para correção do comportamento da viscosidade turbulenta de acordo com o número de Reynolds, dada por

$$\alpha^* = \alpha_{\infty}^* \left(\frac{\alpha_0^* + Re_t/R_k}{1 + Re_t/R_k} \right), \quad (2.55)$$

onde

$$Re_t = \frac{\bar{\rho} \tilde{k}}{\mu \tilde{\omega}}. \quad (2.56)$$

As difusividades efetivas, Γ_k e Γ_{ω} , são dadas por

$$\Gamma_k = \mu + \mu_t/\sigma_k \quad \text{e} \quad \Gamma_{\omega} = \mu + \mu_t/\sigma_{\omega}, \quad (2.57)$$

onde σ_k e σ_{ω} correspondem aos números de Prandtl turbulentos para k e ω , respectivamente.

O termo G_k é modelado como nos modelos k - ε . O termo G_{ω} , por sua vez, é dado por

$$G_{\omega} = \alpha G_k \frac{\tilde{\omega}}{\tilde{k}}, \quad (2.58)$$

onde o coeficiente α também é determinado através de uma função de amortecimento para o número de Reynolds, tal que

$$\alpha = \frac{\alpha_{\infty}}{\alpha^*} \left(\frac{\alpha_0 + Re_t/R_{\omega}}{1 + Re_t/R_{\omega}} \right). \quad (2.59)$$

O termo de dissipação Y_k é dado por

$$Y_k = \bar{\rho} \beta^* f_{\beta^*} \tilde{k} \tilde{\omega}, \quad (2.60)$$

onde

$$f_{\beta^*} = \begin{cases} 1 & \text{para } \delta_k \leq 0 \\ \frac{1 + 680 \delta_k^2}{1 + 400 \delta_k^2} & \text{para } \delta_k > 0 \end{cases}, \quad \delta_k \equiv \frac{1}{\tilde{\omega}^3} \nabla \tilde{k} \cdot \nabla \tilde{\omega} \quad \text{e} \quad \beta^* = \beta_\infty^* \left[\frac{4/15 + (Re_t/R_\beta)^4}{1 + (Re_t/R_\beta)^4} \right]. \quad (2.61)$$

E o termo de dissipação Y_ω é dado por

$$Y_\omega = \bar{\rho} \beta f_\beta \tilde{\omega}^2, \quad (2.62)$$

onde

$$f_\beta = \frac{1 + 70 \delta_\omega}{1 + 80 \delta_\omega}, \quad \delta_\omega = \left| \frac{\tilde{\Omega}_{ij} \tilde{\Omega}_{ij} \tilde{S}_{ki}}{(\beta_\infty^* \tilde{\omega})^3} \right| \quad \text{e} \quad \tilde{\Omega}_{ij} = \frac{1}{2} [(\nabla \tilde{\mathbf{u}})^T - \nabla \tilde{\mathbf{u}}]. \quad (2.63)$$

As constantes do modelo são apresentadas na Tabela 2.4.

Tabela 2.4 – Constantes do modelo k - ω Padrão

α_∞	α_∞^*	α_0^*	α_0	R_k	R_ω	R_β	σ_k	σ_ω	β_∞^*	β
0,52	1	0,024	1/9	6	2,95	8	2,0	2,0	0,09	0,072

2.4.2.4 Modelo k - ω *Shear-Stress Transport*

O modelo k - ω *Shear-Stress Transport* (SST), desenvolvido por Menter, 1994, é uma variação do modelo k - ω Padrão. Combina o modelo k - ω Padrão para o uso próximo às paredes, e o modelo k - ε Padrão para regiões afastadas das paredes, o que é feito através de uma função de harmonização entre as duas regiões. Além disso, é modificada a definição da viscosidade turbulenta, para contabilizar efeitos de transporte das tensões cisalhantes, e contém um termo difusivo cruzado adicional na equação de transporte para ω . O modelo contém termos modificados para trabalhar bem com escoamentos de baixos e elevados números de Reynolds, sem a necessidade de funções de amortecimento adicionais.

Seus benefícios são semelhantes aos oferecidos pelo modelo k - ω Padrão, sobretudo em escoamentos com gradientes de pressão adversos e com separação ou parcialmente separados, e é recomendado quando se deseja uma precisão elevada na simulação da camada limite. Contudo, também exige um grande refinamento da malha próximo às paredes, assim como o modelo k - ω Padrão. Além disso, o modelo k - ω SST resulta em elevados níveis de turbulência em regiões com deformação normal elevada, como regiões de estagnação e de grande aceleração, mas esta tendência ainda é menos pronunciada do que com um modelo k - ε tradicional. Em relação ao k - ω Padrão, o modelo k - ω SST não é recomendado para escoamentos livres, em função de sua dependência com a distância da parede.

A equação para a energia cinética turbulenta no modelo k - ω SST é a mesma do k - ω Padrão, mas difere na equação para a sua taxa de dissipação específica, pelo acréscimo de um termo difusivo cruzado, D_ω , sendo dada por

$$\frac{\partial(\bar{\rho} \tilde{\omega})}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}} \tilde{\omega}) = \nabla \cdot (\Gamma_\omega \nabla \tilde{\omega}) + G_\omega - Y_\omega + D_\omega. \quad (2.64)$$

As difusividades efetivas, Γ_k e Γ_ω , são modeladas como no modelo k - ω Padrão. Contudo, os números de Prandtl turbulentos para k e ω , respectivamente σ_k e σ_ω , não são mais constantes, sendo agora dados por

$$\sigma_k = \left[\frac{F_1}{\sigma_{k,1}} + \frac{(1-F_1)}{\sigma_{k,2}} \right]^{-1} \quad \text{e} \quad \sigma_\omega = \left[\frac{F_1}{\sigma_{\omega,1}} + \frac{(1-F_1)}{\sigma_{\omega,2}} \right]^{-1}, \quad (2.65)$$

onde $\sigma_{k,1}$, $\sigma_{k,2}$, $\sigma_{\omega,1}$ e $\sigma_{\omega,2}$ são constantes do modelo e F_1 é uma função de harmonização.

A viscosidade turbulenta é determinada através de

$$\mu_t = \frac{\bar{\rho} \tilde{k}}{\tilde{\omega}} \left[\text{máx} \left(\frac{1}{\alpha^*}, \frac{\tilde{S} F_2}{a_1 \tilde{\omega}} \right) \right]^{-1}, \quad (2.66)$$

onde F_2 é uma função de harmonização e a_1 é uma constante do modelo.

As funções de harmonização F_1 e F_2 são dadas por

$$F_1 = \tanh \varphi_1^4 \quad , \quad \varphi_1 = \text{mín} \left[\text{máx} \left(\frac{\sqrt{\tilde{k}}}{0,09 \tilde{\omega} y}, \frac{500 \mu}{\bar{\rho} \tilde{\omega} y^2} \right), \frac{4 \bar{\rho} \tilde{k}}{\sigma_{\omega,2} D_\omega^+ y^2} \right] \quad \text{e} \quad (2.67)$$

$$F_2 = \tanh \varphi_2^2 \quad , \quad \varphi_2 = \text{máx} \left(2 \frac{\sqrt{\tilde{k}}}{0,09 \tilde{\omega} y}, \frac{500 \mu}{\bar{\rho} \tilde{\omega} y^2} \right), \quad (2.68)$$

onde y é a distância da parede e D_ω^+ é a parte positiva do termo difusivo cruzado, D_ω , tal que

$$D_\omega^+ = \text{máx} \left(2 \bar{\rho} \frac{1}{\sigma_{\omega,2}} \frac{1}{\tilde{\omega}} \nabla \tilde{k} \cdot \nabla \tilde{\omega}, 10^{-10} \right). \quad (2.69)$$

O termo G_k é modelado como nos demais modelos. Já o termo G_ω , por sua vez, é dado por

$$G_\omega = \frac{\alpha \bar{\rho}}{\mu_t} G_k, \quad (2.70)$$

onde α é determinado através da mesma função de amortecimento do modelo k - ω Padrão. Porém, α_∞ não é mais uma constante, sendo agora dada por

$$\alpha_\infty = \alpha_{\infty,1} F_1 + \alpha_{\infty,2} (1 - F_1), \quad (2.71)$$

onde

$$\alpha_{\infty,1} = \frac{\beta_1}{\beta_\infty^*} - \frac{\kappa^2}{\sigma_{\omega,1} \sqrt{\beta_\infty^*}} \quad \text{e} \quad \alpha_{\infty,2} = \frac{\beta_1}{\beta_\infty^*} - \frac{\kappa^2}{\sigma_{\omega,2} \sqrt{\beta_\infty^*}}, \quad (2.72)$$

onde κ é uma constante do modelo.

Os termos de dissipação Y_k e Y_ω são modelados como no modelo $k-\omega$ Padrão. Contudo, no modelo $k-\omega$ SST os termos f_{β^*} e f_β são constantes, iguais a 1. O termo β , presente na equação do termo de dissipação de ω , é agora dado por

$$\beta = \beta_1 F_1 + \beta_2(1 - F_1). \quad (2.73)$$

O termo difusivo cruzado, D_ω , é expresso pela equação

$$D_\omega = 2(1 - F_1)\bar{\rho} \frac{1}{\tilde{\omega} \sigma_{\omega,2}} \nabla \tilde{k} \nabla \tilde{\omega}. \quad (2.74)$$

As constantes do modelo são apresentadas na Tabela 2.5.

Tabela 2.5 – Constantes do modelo $k-\omega$ SST

\mathbf{a}_1	$\sigma_{k,1}$	$\sigma_{\omega,1}$	$\sigma_{k,2}$	$\sigma_{\omega,2}$	β_1	β_2	f_{β^*}	f_β	κ
0,31	1,176	2,0	1,0	1,168	0,075	0,0828	1	1	0,41

As demais constantes do modelo (α_∞^* , α_0^* , α_0 , R_k , R_ω e R_β) são as mesmas que as do modelo $k-\omega$ Padrão, conforme a Tabela 2.4.

2.4.2.5 Tratamento para as Regiões Próximas às Paredes

Escoamentos turbulentos são afetados significativamente pela presença das paredes. O campo de velocidade média é afetado através da condição de não deslizamento, obviamente, que deve ser satisfeita na parede. O comportamento da turbulência também é alterado pela presença da parede, contudo, de uma forma não tão trivial. Muito perto da parede, a dissipação viscosa reduz as flutuações da velocidade perpendicular a ela, reduzindo, conseqüentemente, também as flutuações normais. Para a parte exterior da zona próxima da parede, no entanto, a turbulência é rapidamente aumentada pela geração da energia cinética turbulenta devida aos elevados gradientes da velocidade média.

Dessa forma, a modelagem próxima da parede impacta significativamente a fidelidade das soluções numéricas, na medida em que as paredes são uma fonte relevante da vorticidade e da turbulência. Afinal, é na região próxima da parede onde são encontrados os maiores gradientes das propriedades do escoamento e onde a quantidade de movimento e o transporte de outros escalares ocorrem de forma bastante intensa. Portanto, a representação do escoamento na região próxima da parede pode ser determinante na qualidade dos resultados obtidos em uma simulação numérica.

As equações supracitadas são válidas somente para a parte central do escoamento, ou seja, longe das paredes, onde $\mu_t \gg \mu$. Próximo às paredes, na região viscosa, a lei da parede é empregada, conforme Launder e Spalding, 1974. Sendo assim, em termos da simulação

numérica, isso significa dizer que ela é aplicada ao primeiro volume de controle adjacente à parede. Sendo assim, à camada interior da região viscosa, mais próxima da parede, em $y^+ \leq 11,225$, é aplicado um perfil linear da velocidade longitudinal, enquanto que para a região mais externa, em $y^+ > 11,225$, já plenamente turbulenta, é aplicado um perfil logarítmico, o que é expresso matematicamente através de

$$y^+ \leq 11,225 \quad \rightarrow \quad u^+ = y^+ \quad \text{e} \quad (2.75)$$

$$y^+ > 11,225 \quad \rightarrow \quad u^+ = \mathcal{K}^{-1} \ln(E y^+), \quad (2.76)$$

onde a distância adimensional da parede, y^+ , e a velocidade adimensional, u^+ , são modelados como

$$y^+ = \frac{y \bar{\rho} C_\mu^{1/4} \tilde{k}^{1/2}}{\mu} \quad \text{e} \quad u^+ = \frac{\tilde{u} \bar{\rho} C_\mu^{1/4} \tilde{k}^{1/2}}{u^*}, \quad (2.77)$$

onde $u^* = \sqrt{\tau_w / \bar{\rho}}$ é a velocidade de cisalhamento, na qual τ_w é a tensão cisalhante na parede. No perfil logarítmico, a constante de von Kármán, \mathcal{K} , é igual a 0,4187, e a constante empírica E é igual a 9,793, conforme o código CFD empregado [ANSYS Inc., 2013a, p. 115].

A modelagem dos termos que controlam a turbulência (\tilde{k} , G_k , $\tilde{\varepsilon}$ e $\tilde{\omega}$) também sofre alteração na região próxima da parede. A condição de equilíbrio entre produção e destruição da energia cinética turbulenta, juntamente com a consideração de tensão cisalhante constante na região viscosa, leva a um gradiente nulo de \tilde{k} na parede, ou seja, $\partial \tilde{k} / \partial y = 0$. O termo que controla a produção da energia cinética turbulenta é nessa região modelado como

$$G_k = \frac{\tau_w^2}{\mathcal{K} y \bar{\rho} C_\mu^{1/4} \tilde{k}^{1/2}}, \quad (2.78)$$

enquanto que $\tilde{\varepsilon}$ e $\tilde{\omega}$ são obtidos através das relações

$$\tilde{\varepsilon} = \frac{C_\mu^{3/4} \tilde{k}^{3/2}}{\mathcal{K} y} \quad \text{e} \quad \tilde{\omega} = \omega^+ \frac{\bar{\rho} (u^+)^2}{\mu}, \quad (2.79)$$

onde a determinação de ω^+ depende do valor de y^+ , através da mesma relação considerada para a velocidade, ou seja,

$$y^+ \leq 11,225 \quad \rightarrow \quad \omega^+ = \frac{6}{\beta (y^+)^2} \quad \text{e} \quad (2.80)$$

$$y^+ > 11,225 \quad \rightarrow \quad \omega^+ = \frac{6}{\sqrt{\beta_\infty^*}} \frac{du^+}{dy^+}, \quad (2.81)$$

sendo que os termos β e β_∞^* já foram apresentados anteriormente para os modelos k - ω Padrão e k - ω SST.

2.4.2.6 Limitadores para a Produção da Energia Cinética Turbulenta

Uma das deficiências dos modelos RANS de duas equações é a excessiva produção da energia cinética turbulenta, k , controlada pelo termo G_k , na vizinhança de pontos de estagnação. De forma a evitar tal amplificação excessiva, o termo G_k pode ser limitado através de duas formulações distintas, ou com ambas, de forma simultânea.

A primeira dessas formulações foi proposta por Menter, 1994, sendo definida por

$$G_k = \text{mín}(G_k, 10 \bar{\rho} \tilde{\varepsilon}). \quad (2.82)$$

A segunda formulação foi proposta por Kato e Launder, 1993, que notaram que o nível excessivo de produção de energia cinética turbulenta é causado por uma elevada taxa de deformação, \tilde{S} , nessas regiões de estagnação, uma vez que o campo do escoamento próximo a um ponto de estagnação é praticamente irrotacional, com uma taxa de vorticidade, $\tilde{\Omega}$, muito baixa. A formulação por eles proposta é dada por

$$G_k = \text{mín}(G_k, \mu_t \tilde{S} \tilde{\Omega}). \quad (2.83)$$

Estas formulações, disponíveis nos modelos apresentados, foram empregadas concomitantemente nas simulações realizadas, ou seja,

$$G_k = \text{mín}(G_k, 10 \bar{\rho} \tilde{\varepsilon}, \mu_t \tilde{S} \tilde{\Omega}). \quad (2.84)$$

2.5 Modelos Baseados no Conceito de *Flamelets*

Os modelos baseados no conceito de *flamelets* partem da ideia de que uma chama multidimensional pode ser modelada como uma série de elementos de chama quase unidimensionais, denominados *flamelets* [Peters, 1984 e 1986], como ilustrado pela Figura 2.1.

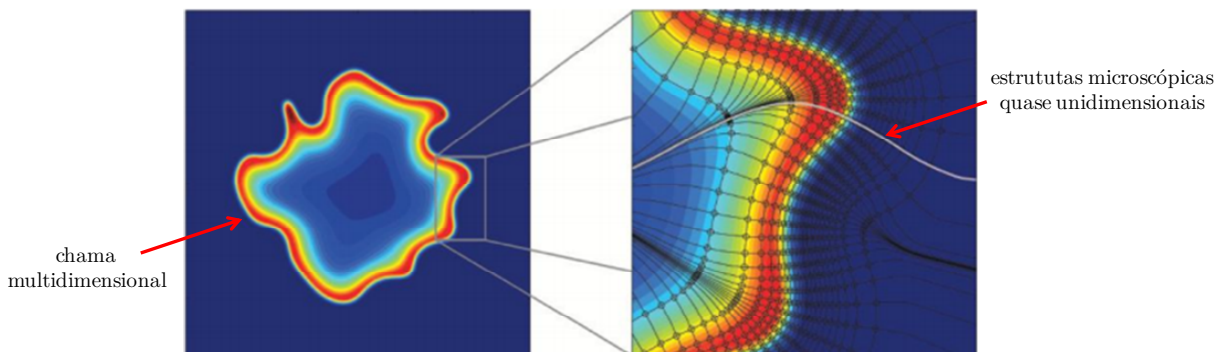


Figura 2.1 – Ilustração das estruturas microscópicas em uma chama multidimensional
[adaptada de van Oijen, 2014, p. 7]

Se a espessura destes elementos de chama for menor que o tamanho dos vórtices de

Kolmogorov, ou seja, o tamanho das menores escalas da turbulência do escoamento, eles acabam por ter sua estrutura laminar interna preservada, apesar de transportados e deformados pelas condições locais do escoamento, mas sem perda de suas características fundamentais, como ilustrado pela Figura 2.2.

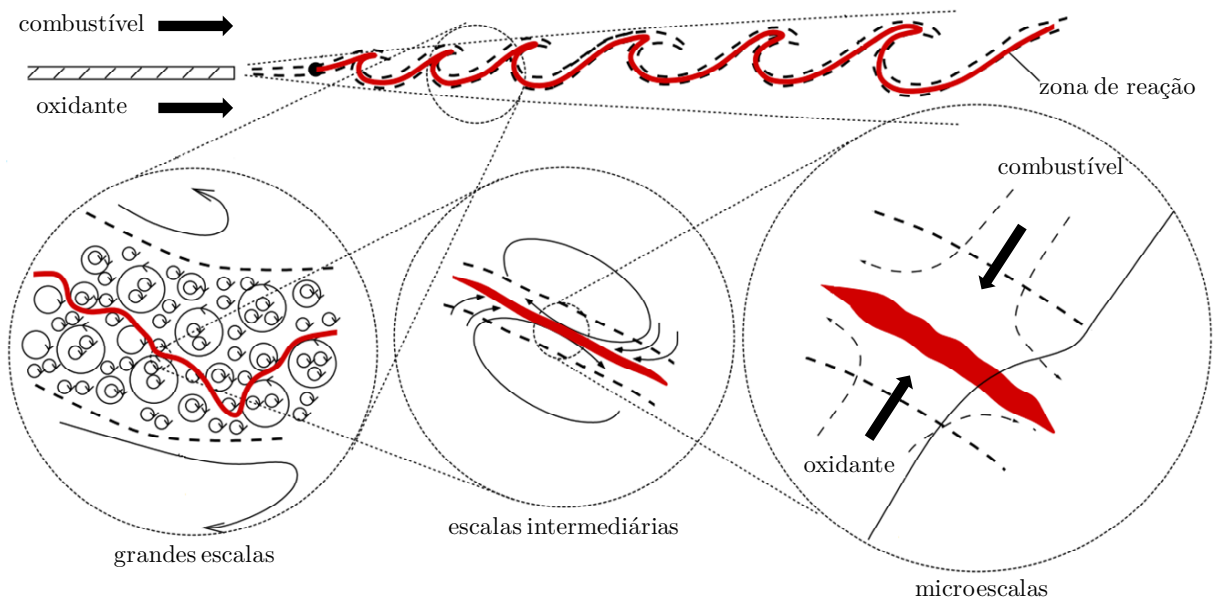


Figura 2.2 – Grandeza das escalas em um escoamento reativo turbulento
[adaptada de Uzray et al., 2012, p. 18]

Por outro lado, se a turbulência for tão intensa a ponto de os vórtices de Kolmogorov se tornarem menores que a espessura da zona da chama, tais vórtices poderão penetrar a chama, destruindo sua estrutura interna, podendo até mesmo extingui-la por completo. Nesse caso, os elementos de chama não são mais identificáveis, e a modelagem baseada em *flamelets* falha.

Esta abordagem permite a dissociação das partes convectiva e reativa do escoamento, mesmo ele sendo turbulento. Cada *flamelet* é submetido a condições locais do campo do escoamento, resultando na sua convecção e alongamento, mas sem destruição de sua estrutura interna laminar. Portanto, a estrutura local da chama pode ser descrita através de algumas poucas variáveis apenas. A estrutura laminar dos *flamelets* pode ser pré-calculada, resolvendo os principais escalares reativos (temperatura, massa específica da mistura e frações mássicas das espécies químicas), que são subsequentemente tabulados no espaço composicional, parametrizados em função de um pequeno número de variáveis de controle e armazenados em um banco de dados. Uma vez conhecidos os valores destas variáveis de controle a partir do campo do escoamento, é possível recuperar as quantidades termoquímicas armazenadas na biblioteca gerada a partir dos *flamelets*.

A solução dos *flamelets* é realizada com o auxílio de códigos especializados em chamas unidimensionais, a exemplo do Chem1D e do ChemKin, empregando mecanismos de cinética química robustos, como aqueles da série GRI-Mech.

Dessa forma, durante a simulação numérica apenas as equações de transporte para as variáveis de controle têm de ser resolvidas, enquanto que as demais informações são recuperadas da tabela.

Nas subseções seguintes são abordados os aspectos relativos aos modelos baseados no conceito de *flamelets* empregados neste trabalho, ou seja, o *Steady Laminar Diffusion Flamelet* (SLDF) e o *Flamelet-Generated Manifold* (FGM).

2.5.1 Flamelets Difusivos Laminares

De uma forma geral, a combustão não pré-misturada é associada aos *flamelets* difusivos de contracorrente, configuração na qual o combustível e o oxidante, inicialmente separados, são impelidos um contra o outro através de bicos injetores axissimétricos dispostos opostamente, como mostrado na Figura 2.3.

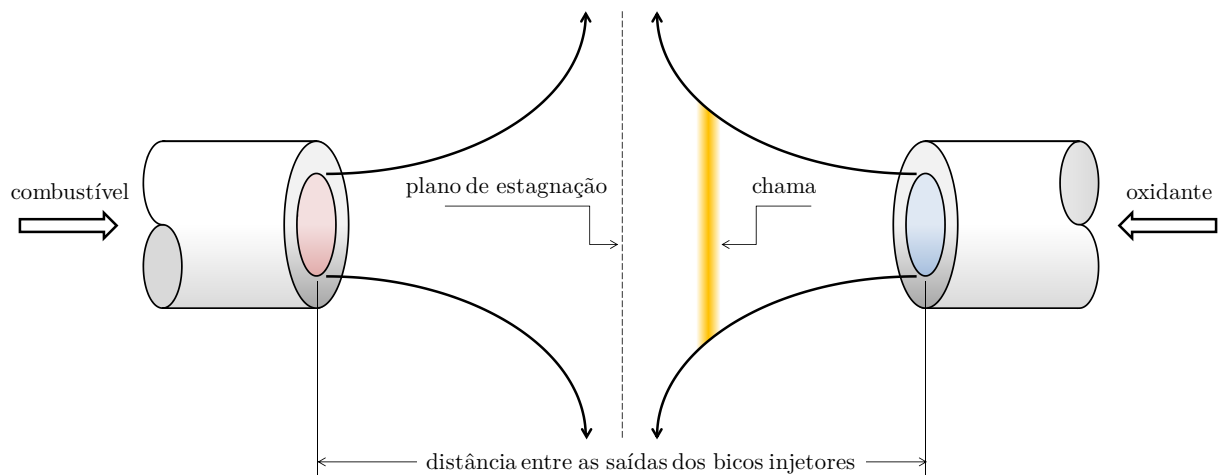


Figura 2.3 – Configuração de chama laminar do tipo contracorrente
[adaptada de Peters, 2004, p. 181]

À medida que a distância entre as saídas dos bicos injetores é diminuída, ou aumentada a vazão dos jatos, a chama é deformada de maneira a comprimi-la longitudinalmente e estirá-la na direção transversal. Enquanto é baixo o estiramento da chama (baixa vazão dos jatos e/ou grande distância entre os bicos injetores), é grande o tempo de residência química, permitindo que os reagentes tenham tempo suficiente para interagir de forma a realizar uma combustão mais completa, ou seja, próxima do equilíbrio químico. Por outro lado, à medida que é aumentado o estiramento da chama (alta vazão dos jatos e/ou pequena distância entre os bicos injetores), é diminuído o tempo de residência química dos reagentes, que passam muito rapidamente pela zona de reação, resultando em combustão incompleta, distanciando a chama da condição de equilíbrio químico. Se o grau de estiramento da chama for muito elevado, ela será extinta por completo.

Os campos das principais propriedades podem ser obtidos de uma chama de

contracorrente, através de medições experimentais ou, o que é mais comum, calculados numericamente.

As equações para descrever a estrutura dos *flamelets* em uma configuração de chama de contracorrente foram descritas pela primeira vez por Peters, 1984. Sua determinação é baseada na fração de mistura, Z , escalar conservado que representa a fração mássica do material originado do combustível, sendo igual a 0 na saída do oxidante e igual a 1 na do combustível. De posse deste conceito, a equação de transporte da fração de mistura pode ser deduzida tanto da conservação dos elementos químicos (ver Apêndice A) quanto do princípio de escalar conservado (ver Apêndice B).

Se todas as difusividades das espécies químicas forem assumidas iguais, isto é, assumindo número de Lewis unitário para todas elas, a equação de transporte da fração de mistura pode ser simplificada a

$$\frac{\partial(\rho Z)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} Z) = \nabla \cdot (\rho \mathcal{D}_Z \nabla Z). \quad (2.85)$$

onde \mathcal{D}_Z é o coeficiente de difusão da fração de mistura.

A estrutura de chamas não pré-misturadas pode ser descrita em termos da fração de mistura, sendo que o seu resultado pode ser dado pela solução de sua equação de transporte juntamente com a solução do campo do escoamento. Se assumida uma taxa de reação infinita, teríamos que a frente de chama se restringiria à posição na qual a fração de mistura é estequiométrica, Z_{st} , o que é ilustrado para uma chama turbulenta não pré-misturada do tipo jato livre na Figura 2.4. Contudo, mesmo considerando taxas de reação finitas, a fração de mistura continua sendo um bom parâmetro para mapear a estrutura da chama, uma vez que a zona de reação costuma ser bastante delgada.

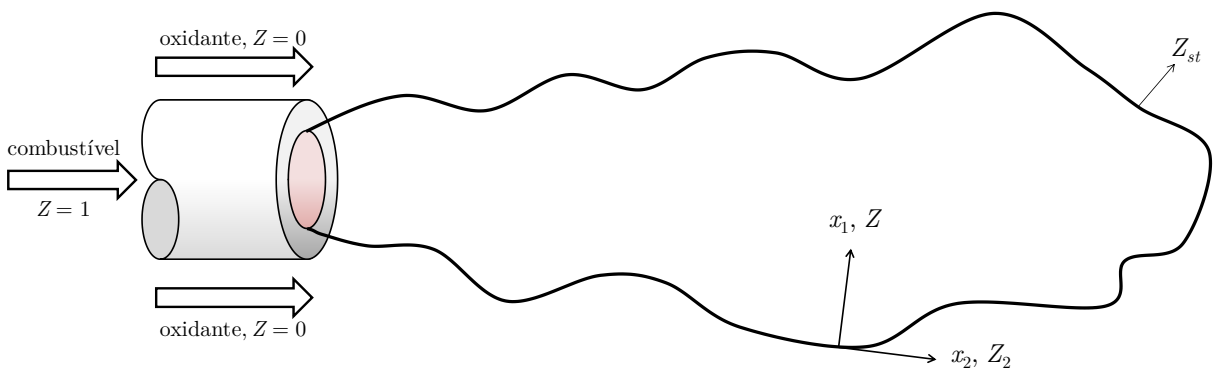


Figura 2.4 – Representação esquemática de uma chama não pré-misturada turbulenta [adaptada de Peters, 2004, p. 44]

A partir da representação esquemática apresentada na Figura 2.4 podem ser derivadas as equações para os *flamelets*. Esta derivação é feita de acordo com as etapas seguintes:

- i. Reescrever as equações para conservação das espécies químicas (Equação 2.3) e da energia (Equação 2.16) em termos do sistema de coordenadas atrelado à superfície da

- frente de chama;
- ii. Introduzir as transformações do sistema de coordenadas atrelado à superfície da frente de chama para um novo sistema de coordenadas independente, ortogonal à superfície da frente de chama;
 - iii. Com base nas ordens de magnitude, eliminar os termos relativos às direções tangenciais à superfície da chama;
 - iv. Introduzir o parâmetro que quantifica a influência dos efeitos multidimensionais do campo do escoamento, denominado taxa de dissipação do escalar, χ .

A derivação das equações para descrever a estrutura dos *flamelets* é apresentada com detalhes no Apêndice C, sendo que a seguir é dada apenas a formulação final presente no código CFD empregado, já considerando regime estacionário:

$$0 = \frac{1}{2} \rho \chi \frac{\partial^2 Y_k}{\partial Z^2} + \dot{\omega}_k \quad \text{para} \quad k = 1, N_k - 1 \quad \text{e} \quad (2.86)$$

$$0 = \frac{1}{2} \rho \chi \frac{\partial^2 T}{\partial Z^2} - \frac{1}{C_p} \sum_{k=1}^{N_k} h_k \dot{\omega}_k + \frac{1}{2} \frac{\rho \chi}{C_p} \left(\frac{\partial C_p}{\partial Z} + \sum_{k=1}^{N_k} C_{p,k} \frac{\partial Y_k}{\partial Z} \right) \frac{\partial T}{\partial Z}. \quad (2.87)$$

A taxa de dissipação do escalar, χ , varia ao longo do *flamelet*, e são diversas as propostas para sua modelagem, obtidas comumente de soluções assintóticas analíticas. Para a configuração de chama do tipo contracorrente é comum a formulação de Kim e Williams, 1997, como no código numérico empregado, dada por

$$\chi = \frac{a_s}{4 \pi} \frac{3(\sqrt{\rho_\infty/\rho} + 1)^2}{2\sqrt{\rho_\infty/\rho} + 1} \exp\{-2[erfc^{-1}(2 Z)]^2\}, \quad (2.88)$$

na qual $erfc^{-1}$ é o inverso da função erro complementar, ρ_∞ é a massa específica da corrente no oxidante puro e a_s é a taxa de estiramento característica do *flamelet*, utilizada como uma condição de fronteira para a solução das equações, tal que

$$a_s = \frac{V}{2 d}, \quad (2.89)$$

onde V é a velocidade relativa entre os jatos de combustível e de oxidante e d é a distância entre os bicos de saída dos jatos.

2.5.2 Construção da Tabela Termoquímica Laminar

A construção da tabela termoquímica com os resultados para os *flamelets* se dá através da solução das Equações 2.86 a 2.88, para as quais devem ser definidas como condições de contorno a temperatura e as frações mássicas das espécies químicas presentes

nas correntes de combustível (em $Z = 1$) e oxidante (em $Z = 0$).

O conjunto de equações deve ser resolvido para diversas condições de deformação da chama, controlada através da taxa de estiramento a_s , partindo da situação próxima ao equilíbrio químico, de menores taxas de estiramento, e aumentando-a até que ocorra a extinção completa da chama. As taxas de produção/destruição de massa, $\dot{\omega}_k$, são resolvidas de acordo com algum mecanismo para a cinética química e em conjunto com um código numérico especializado.

Estas diversas soluções para temperatura, massa específica da mistura e frações mássicas das espécies são então armazenadas em função de algumas variáveis de controle, formando curvas no espaço composicional. No modelo SLDF, os resultados são parametrizados através da fração de mistura e de alguma taxa de dissipação do escalar característica.

A fração de mistura está na base da modelagem de chamas não pré-misturadas e, sob certas considerações simplificadoras, pode-se dizer que o estado termoquímico do fluido está relacionado a ela. São diversas as alternativas para a sua formulação, dependendo da composição do combustível e das características do fenômeno que se deseja capturar. Contudo, em qualquer que seja a definição, ela deverá obedecer a premissa de ser igual a 0 na fronteira do oxidante e igual a 1 na do combustível e a de apresentar um comportamento monotônico ao longo da solução espacial do *flamelet*, a fim de evitar um mapeamento ambíguo das soluções em função da variável de controle. Para combustíveis compostos por hidrocarbonetos é usual a utilização da fração de mistura definida por Bilger, 1988, p. 483, dada por

$$Z = \frac{2(Y_C - Y_{C,2})/W_C + 0,5(Y_H - Y_{H,2})/W_H - (Y_O - Y_{O,2})/W_O}{2(Y_{C,1} - Y_{C,2})/W_C + 0,5(Y_{H,1} - Y_{H,2})/W_H - (Y_{O,1} - Y_{O,2})/W_O}, \quad (2.90)$$

onde Y_a e W_a são, respectivamente, as frações mássicas e massas atômicas correspondentes aos átomos de carbono (C), hidrogênio (H) e oxigênio (O) presentes na mistura, e os subíndices 1 e 2 se referem às condições das correntes de combustível e de oxidante, respectivamente. Já os coeficientes para a contribuição dos diferentes elementos têm a finalidade de manter seu valor estequiométrico, Z_{st} , idêntico ao obtido com a definição clássica para a fração de mistura baseada apenas na fração mássica originada da corrente de combustível.

Para a taxa de dissipação do escalar característica as escolhas mais usuais se restringem ao seu valor obtido na condição estequiométrica ou na de temperatura máxima do *flamelet*. Contudo, como verificado por Liu et al., 2006, p. 609, na investigação numérica de uma chama não pré-misturada laminar de etileno e ar, é esperado que as diferenças encontradas entre estas duas escolhas não sejam significativas sobre os resultados, uma vez observado que a temperatura máxima de uma chama ocorre justamente muito próxima à condição estequiométrica. Mas a escolha mais usual é certamente a primeira, baseada na

condição estequiométrica, χ_{st} , e é esta a adotada no código CFD empregado.

Sendo assim, definidas as condições de contorno apropriadas ao problema, ou seja, a temperatura, a pressão e as frações mássicas das espécies na saída das correntes do combustível e do oxidante, as equações são resolvidas considerando uma chama de contracorrente laminar, inicialmente com taxas de estiramento desde valores muito baixos, e, conseqüentemente, próximo da condição de equilíbrio químico, no limite em $\chi_{st} \rightarrow 0$, aumentando-a até ser atingida a extinção da chama, em χ_{ex} . Todas essas soluções são então armazenadas em função das variáveis de controle Z e χ_{st} , formando uma tabela bidimensional.

O procedimento de solução dos *flamelets* laminares e subsequente parametrização e armazenamento dos escalares reativos em função de Z e χ_{st} é ilustrado através da Figura 2.5.

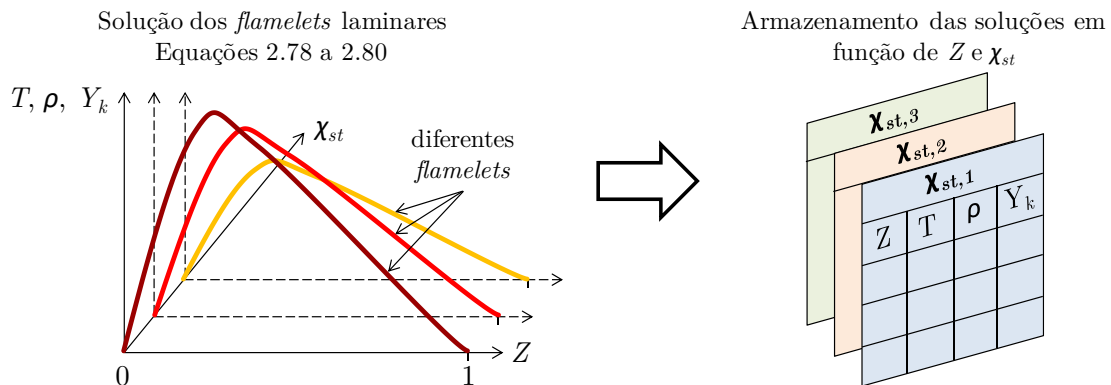


Figura 2.5 – Procedimento de solução dos *flamelets* laminares e armazenamento dos escalares reativos

2.5.3 Incorporação dos Efeitos da Turbulência

Em escoamentos reativos, além de muito onerosa computacionalmente, não é satisfatória a determinação de taxas de reação médias a partir do campo médio dos escalares do escoamento, sendo assim, são necessários modelos que deem conta também do efeito de suas flutuações. Uma das técnicas propostas para possibilitar a simulação de tais problemas e fornecer resultados confiáveis com baixo custo computacional é o método da função de densidade de probabilidade (PDF - *Probability Density Function*), que se tornou popular na combustão.

A função de densidade de probabilidade, $P(\xi)$, pode ser interpretada como a fração de tempo na qual uma porção do fluido, em determinada coordenada espacial, passa na vizinhança do estado ξ [Tennekes e Lumley, 1972, p. 198]. Para ilustrar o conceito, na Figura 2.6 é apresentada a variação aleatória ao longo do tempo da propriedade genérica ξ .

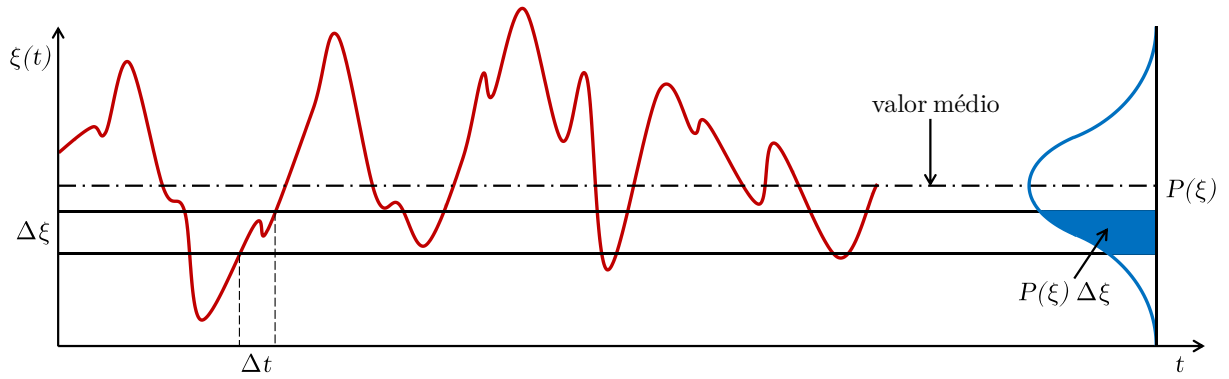


Figura 2.6 – Descrição gráfica da função de densidade de probabilidade [adaptada de Tennekes e Lumley, 1972, p. 198]

A variável ξ passa uma determinada fração de tempo na faixa denotada por $P(\xi) \Delta\xi$, apresentada no lado direito da figura, sendo que seu valor corresponde à área sob a curva denotada por aquela faixa, ou seja,

$$P(\xi) \Delta\xi = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \sum_n (\Delta t)_n, \quad (2.91)$$

onde T é a escala de tempo total avaliado, Δt é a quantidade de tempo de cada passagem de ξ na faixa $\Delta\xi$ e n é a quantidade de vezes que ξ passa por essa faixa. Em outras palavras, $P(\xi)$ determina que a probabilidade de encontrar $\xi(t)$ entre ξ e $\xi + \Delta\xi$ é igual à proporção de tempo lá ocupado.

A forma da função $P(\xi)$ depende da natureza das flutuações de ξ . Na prática, $P(\xi)$ é desconhecida e é modelada como uma função que aproxime os formatos reais das PDFs que têm sido observadas experimentalmente. Na combustão turbulenta, entre as diversas possibilidades para modelar a forma hipotética das PDFs, a mais comum delas, e que faz parte do código CFD empregado, é a função de distribuição beta, primeiramente introduzida na literatura da combustão por Janicka e Kollman, 1979, dada por

$$P(\xi) = \frac{\xi^{\alpha-1} (1-\xi)^{\beta-1}}{\int_0^1 \xi^{\alpha-1} (1-\xi)^{\beta-1} d\xi}, \quad (2.92)$$

onde os parâmetros de ajuste α e β são

$$\alpha = \bar{\xi} \left[\frac{\bar{\xi}(1-\bar{\xi})}{\xi'^2} - 1 \right] \quad \text{e} \quad \beta = (1-\bar{\xi}) \left[\frac{\bar{\xi}(1-\bar{\xi})}{\xi'^2} - 1 \right], \quad (2.93)$$

nos quais $\bar{\xi}$ e ξ'^2 são, respectivamente, a média e a variância da variável $\xi(t)$, ou seja, seu primeiro e segundo momentos estatísticos centrais.

A função beta é amplamente utilizada porque pode tomar múltiplos formatos, contabilizando informações não apenas dos valores médios das variáveis (primeiro momento estatístico central), mas também de sua variância (segundo momento estatístico central) e de

outros momentos estatísticos centrais de maior ordem. Mas apesar de sua relativa simplicidade, é observada uma concordância muito satisfatória entre a função de distribuição beta e as PDFs medidas experimentalmente, como mostrado por Lockwood e Moneib, 1980 [apud Janicka e Peters, 1982, p. 370], para um jato circular aquecido. A Figura 2.7 ilustra como a função beta pode mudar de forma de acordo com diferentes valores de $\bar{\xi}$ e $\overline{\xi'^2}$, e os respectivos parâmetros α e β .

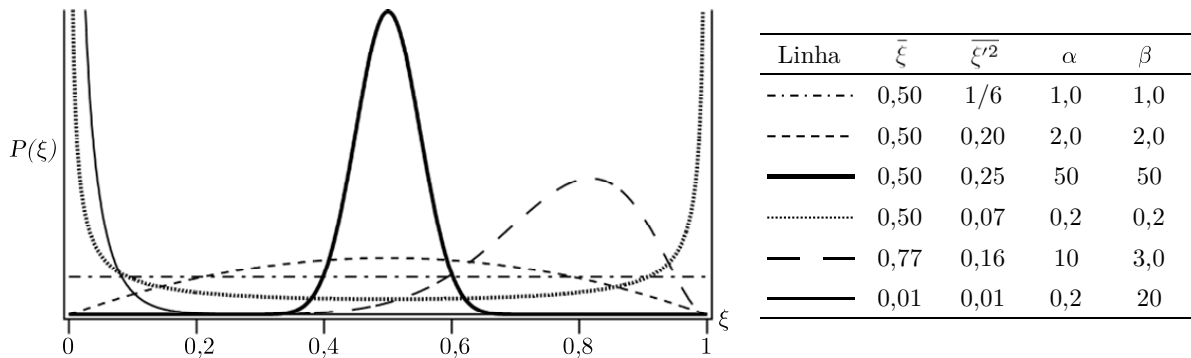


Figura 2.7 – Exemplos de diferentes formas hipotéticas para a função beta [adaptada de Poinsot e Veynante, 2005, p. 235]

Mas se assumido desprezível o efeito das flutuações de ξ , a sua PDF se resume a uma distribuição do tipo delta de Dirac, δ , tal que

$$P(\xi) = \delta(\xi - \bar{\xi}). \quad (2.94)$$

No limite, a função delta de Dirac $\delta(\xi - \bar{\xi})$ obedece às propriedades dadas por

$$\delta(\xi - \bar{\xi}) = \begin{cases} 0 & \text{para } \xi \neq \bar{\xi} \\ \infty & \text{para } \xi = \bar{\xi} \end{cases}, \quad (2.95)$$

o que, em outras palavras, significa dizer que, se desprezadas as flutuações de ξ , toda a sua distribuição de probabilidades se concentrará no seu valor médio, $\bar{\xi}$.

Apesar das diferentes formas possíveis que as PDFs podem tomar, por definição, elas são normalizadas de forma que a área sob suas curvas seja unitária, ou seja,

$$\int_0^1 P(\xi) d\xi = 1, \quad (2.96)$$

tanto para a função beta quanto para a função delta de Dirac.

Os valores de $\bar{\xi}$ e $\overline{\xi'^2}$ foram descritos até aqui como uma média temporal simples, como se obtidas da decomposição de Reynolds, contudo, conforme Tennekes e Lumley, 1972, p. 199, elas podem ser matematicamente expressas por

$$\bar{\xi} = \int_{-\infty}^{\infty} \xi(t) P(\xi) d\xi = \frac{1}{T} \int_0^T \xi(t) dt \equiv \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \xi_n \quad \text{e} \quad (2.97)$$

$$\overline{\xi'^2} = \int_{-\infty}^{\infty} \xi'^2(t) P(\xi) d\xi = \frac{1}{T} \int_0^T \xi'^2(t) dt \equiv \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \xi_n'^2, \quad (2.98)$$

em que a última equivalência no lado direito das equações corresponde ao caso em que a variável $\xi(t)$ é dada na forma de uma série discreta temporal, obtida, por exemplo, da digitalização de um sinal contínuo (analógico), na forma de uma sequência de valores a intervalos de tempo Δt constantes, sendo T o tempo total da medição e N o tamanho da amostragem.

Entretanto, na combustão é muito comum empregar a média e a variância na forma ponderada pela massa, ou seja, novamente através da decomposição de Favre. Assim, ao invés da função $P(\xi)$, passa-se a utilizar a função $\tilde{P}(\xi)$, conforme Huang e Lipatnikov, 2012, p. 2, sendo esta última definida por

$$\tilde{P}(\xi) \equiv \frac{\overline{\rho P(\xi)}}{\bar{\rho}}. \quad (2.99)$$

Esta última conversão é desnecessária, porém, se nas Equações 2.91 a 2.98 simplesmente forem substituídos os valores $\bar{\xi}$ e $\overline{\xi'^2}$ por $\tilde{\xi}$ e $\widetilde{\xi'^2}$, o que não compromete em nada o método.

A determinação dos valores médios de uma variável escalar qualquer φ , dependente de ξ , é feita através de um processo de integração no qual as PDFs são então utilizadas, tal que

$$\tilde{\varphi}(\tilde{\xi}, \widetilde{\xi'^2}) = \int_0^1 \varphi(\xi) \tilde{P}(\xi, \tilde{\xi}, \widetilde{\xi'^2}) d\xi. \quad (2.100)$$

Assumindo que em um escoamento reativo turbulento, complexo macroscopicamente, as escalas da turbulência costumam ser muito maiores que as da cinética química, o conceito de *flamelets* é aplicável, o que permite considerar que as suas soluções são suficientemente representativas na caracterização de chamas em geral. Dessa forma, aos resultados para a temperatura, a massa específica da mistura e as frações mássicas das espécies, obtidos para a solução dos *flamelets* laminares, são então incorporados os efeitos causados pela turbulência e pelo nível de entalpia do sistema através das PDFs, conforme a expressão

$$\tilde{T}, \tilde{\rho}, \tilde{Y}_k = \int_{h_{min}}^{h_{max}} \int_0^{\chi_{ex}} \int_0^1 T, \rho, Y_k(Z, \chi_{st}) \tilde{P}(Z, \tilde{Z}, \widetilde{Z'^2}, \chi_{st}, \widetilde{\chi_{st}}, \widetilde{\chi_{st}'^2}, h, \tilde{h}, \widetilde{h'^2}) dZ d\chi_{st} dh, \quad (2.101)$$

onde h é a entalpia da mistura, que deve ser levada em conta no modelo quando há perdas de calor.

A função $\tilde{P}(Z, \chi_{st}, h)$, contudo, na qual mais de uma variável é empregada na sua definição, trata-se de uma função de densidade de probabilidade conjunta (JPDF - *Joint Probability Density Function*), para a qual se torna muito dispendioso o cálculo na maioria das aplicações de engenharia, o que faz com que algumas simplificações sejam necessárias. A

primeira delas é assumir independência estatística entre as variáveis que a compõem, permitindo simplificá-la como sendo equivalente ao produto das probabilidades individuais, ou seja,

$$\tilde{P}(Z, \tilde{Z}, \widetilde{Z''^2}, \chi_{st}, \widetilde{\chi_{st}}, \widetilde{\chi_{st}''^2}, h, \tilde{h}, \widetilde{h''^2}) = \tilde{P}_Z(Z, \tilde{Z}, \widetilde{Z''^2}) \tilde{P}_{\chi_{st}}(\chi_{st}, \widetilde{\chi_{st}}, \widetilde{\chi_{st}''^2}) \tilde{P}_h(h, \tilde{h}, \widetilde{h''^2}). \quad (2.102)$$

A segunda simplificação é assumir desprezível o efeito das flutuações de χ_{st} e h no cálculo dos valores médios dos escalares reativos, resumindo as suas PDFs a funções delta de Dirac, o que resulta em

$$\tilde{T}, \tilde{\rho}, \tilde{Y}_k = \int_{h_{\min}}^{h_{\max}} \int_0^{\chi_{ex}} \int_0^1 T, \rho, Y_k(Z, \chi_{st}) \tilde{P}_Z(Z, \tilde{Z}, \widetilde{Z''^2}) \delta(\chi_{st} - \widetilde{\chi_{st}}) \delta(h - \tilde{h}) dZ d\chi_{st} dh. \quad (2.103)$$

Por fim, a última simplificação consiste em assumir como desprezível o efeito do ganho ou perda de entalpia sobre as frações mássicas médias das espécies, sendo, assim, sempre empregadas as frações mássicas obtidas da solução adiabática, evitando um pré-processamento que seria muito oneroso na geração de *flamelets* não adiabáticos. Já a temperatura, para os casos não adiabáticos ela é recuperada a partir da Equação 2.17 [Müller et al., 1994, p. 1103], na qual a entalpia da mistura é obtida como a soma da entalpia de formação e da entalpia sensível, para uma extensão de ganho/perda da entalpia média, $\Delta\bar{h}$. A massa específica da mistura, por sua vez, é recalculada a partir da equação de estado para os gases ideais (Equação 2.2).

Na solução do escoamento multidimensional, apesar de ser possível empregar uma equação de transporte completa [Peters, 2004, p. 195], a taxa de dissipação do escalar média costuma ser obtida através de uma equação algébrica, na qual são relacionadas as flutuações da fração de mistura e as escalas de turbulência do escoamento. No caso dos modelos de turbulência baseados em duas equações diferenciais parciais, é utilizada a expressão proposta por Janicka e Peters, 1982, p. 369, dada por

$$\widetilde{\chi_{st}} = C_\chi \frac{\tilde{\epsilon}}{\tilde{k}} \widetilde{Z''^2}, \quad (2.104)$$

onde C_χ é uma constante, para a qual Jones e Whitelaw, 1982, observaram que sendo igual a 2 é bem reproduzido um jato reativo axissimétrico de metano-ar.

A entalpia média, por sua vez, é determinada através de uma versão simplificada para a Equação 2.36, sob a consideração de número de Lewis unitário, conforme Jones e Whitelaw, 1982, p. 3, dada por

$$\frac{\partial(\tilde{\rho} \tilde{h})}{\partial t} + \nabla \cdot (\tilde{\rho} \tilde{\mathbf{u}} \tilde{h}) = \nabla \cdot \left(\frac{\mu_t}{Pr_t} \nabla \tilde{h} \right) + \overline{S_h}, \quad (2.105)$$

onde o número de Prandtl turbulento, Pr_t , é modelado com base na condutibilidade térmica

turbulenta, λ_t , através da relação

$$Pr_t = \frac{C_p \mu_t}{\lambda_t}. \quad (2.106)$$

Sendo assim, somente para a fração de mistura se fazem necessárias duas equações de transporte adicionais, para sua média e variância [Jones e Whitelaw, 1982, p. 10], dadas respectivamente por

$$\frac{\partial(\bar{\rho} \tilde{Z})}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}} \tilde{Z}) = \nabla \cdot \left[\left(\frac{\mu}{Sc} + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right) \nabla \tilde{Z} \right] \quad e \quad (2.107)$$

$$\frac{\partial(\bar{\rho} \widetilde{Z''^2})}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}} \widetilde{Z''^2}) = \nabla \cdot \left[\left(\frac{\mu}{Sc} + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right) \nabla \widetilde{Z''^2} \right] + C_g \mu_t (\nabla \tilde{Z})^2 - \bar{\rho} C_\chi, \quad (2.108)$$

onde C_g é uma constante, igual a 2,86, enquanto que a constante C_χ é a mesma da Equação 2.104. Os números de Schmidt laminar e turbulento são assumidos iguais a 0,7 e 0,85, respectivamente, valores esses que, conforme Tominaga e Stathopoulos, 2007, p. 8092, compreendem a faixa entre 0,7 e 0,9 já consagrada por diversos estudos e utilizados na maioria dos códigos CFD comerciais.

A partir das Equações 2.104 a 2.108 são então recuperados os valores locais das variáveis dependentes armazenadas na tabela termoquímica com a incorporação da turbulência. Ademais, a qualidade dos resultados recuperados poderá depender da qualidade de refinamento das tabelas, dada em função da quantidade e concentração dos pontos utilizados na sua parametrização, o que, por sua vez, afeta também o custo computacional e a memória requerida para armazenamento dos dados. A construção de uma boa tabela termoquímica é usualmente atingida através de tentativas e erros.

2.5.4 Modelo *Flamelet-Generated Manifold*

Mais recente, o modelo conhecido como *Flamelet-Generated Manifold* (FGM), também baseado no conceito de *flamelets*, foi desenvolvido com a finalidade de superar parte das deficiências do SLDF, como a possibilidade de obter soluções para ignição ou extinção de uma chama, o que não acontece com o SLDF (uma vez que este não contém variável que controle o estado da reação), e para melhor determinar alturas de levantamento das chamas.

A técnica trouxe aperfeiçoamento, sobretudo, na solução de regiões de temperaturas baixas, onde a difusão e a convecção são dominantes, em detrimento dos termos reativos. Pesquisas têm apontado para melhorias significativas nos resultados obtidos com o FGM sobre aqueles do ILDM [van Oijen, 2002] e do SLDF [Pierce, 2001; Zhouqin, et al., 2010; Jha e Groth, 2011], sobretudo na predição do levantamento das chamas.

No FGM a solução dos *flamelets* é igual à do SLDF. Contudo, na parametrização da

tabela termoquímica a partir das soluções laminares, a taxa de dissipação do escalar estequiométrica, χ_{st} , é substituída como variável de parametrização das soluções por uma variável de progresso da reação, c , formada por uma combinação das frações mássicas de algumas espécies químicas presentes nos produtos, que no caso do código CFD empregado neste estudo, é expressa por

$$c = \frac{\sum_{k=1}^{N_c} \alpha_k Y_k}{\sum_{k=1}^{N_c} \alpha_k Y_k^{eq}} = \frac{Y_c}{Y_c^{eq}}, \quad (2.109)$$

onde N_c é a quantidade de espécies utilizadas na composição de c , α_k são os seus fatores de ponderação e o índice eq indica a quantidade de cada espécie presente na condição de equilíbrio químico, ou seja, para $\chi_{st} = 0$, sendo assim, função apenas da fração de mistura.

Nos modelos baseados no conceito de *flamelets* e que utilizam Z e c como variáveis de controle, esta última talvez seja o parâmetro que mais difira entre os modelos. A sua normalização através dos valores para o equilíbrio químico, Y_c^{eq} , é pouco usual. Um exemplo de trabalho que emprega esta normalização na condição de equilíbrio químico, mas estequiométrica, é o de van Oijen e de Goey, 2004, p. 146, na investigação de chamas triplas laminares. Na maioria dos trabalhos c é composta apenas pela parte do numerador da Equação 2.109.

As espécies químicas escolhidas para a definição da variável de progresso também variam bastante entre os modelos. Uma revisão de alguns dos arranjos empregados em trabalhos diversos é apresentada por Ihme et al., 2012, p. 7716. Ela é tipicamente formada pela combinação de algumas espécies presentes nos produtos. No caso da combustão de hidrocarbonetos, melhores resultados têm sido observados quando empregadas as espécies da reação de deslocamento gás-água (WGSR - *Water-Gas Shift Reaction*) [Ihme et al., 2012, p. 7719], dada por



No código CFD empregado, por padrão as espécies que compõe c são CO_2 e CO e com fatores de ponderação, α_k , unitários, mas é possível escolher outras combinações de espécies e outros valores para α_k .

A variável de progresso da reação, c , advém de modelos comumente idealizados para a combustão pré-misturada. Contudo, esta substituição na variável de controle secundária da solução dos *flamelets* laminares, de χ_{st} por c , tem se mostrado vantajosa ao possibilitar ao FGM obter soluções para ignição ou extinção de uma chama, o que não acontece com o SLDF.

Os efeitos causados pela turbulência continuam sendo incorporados através de PDFs e pelo nível de entalpia, tal que

$$\tilde{T}, \bar{\rho}, \tilde{Y}_k = \int_{h_{\min}}^{h_{\max}} \int_0^1 \int_0^1 T, \rho, Y_k(Z, c) \tilde{P}_Z(Z, \tilde{Z}, \widetilde{Z''^2}) \tilde{P}_c(c, \tilde{c}, \widetilde{c''^2}) \delta(h - \tilde{h}) dZ dc dh. \quad (2.111)$$

Sendo assim, além das equações de transporte adicionais para a média e a variância da fração de mistura, no FGM, é necessário também resolver a média e a variância da variável de progresso da reação. Contudo, para a solução do escoamento multidimensional, no código CFD empregado estas equações de transporte são escritas para a variável de progresso não normalizada, ou seja, para Y_c , conforme Fiorina et al., 2005, p. 869, dadas por

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\widetilde{Y}_c)}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho}\widetilde{u}Y_c) = \nabla \cdot \left[\left(\frac{\mu}{S_c} + \frac{\mu_t}{S_{c_t}} \right) \nabla \widetilde{Y}_c \right] + \bar{\rho} \widetilde{S}_c \quad e \quad (2.112)$$

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\widetilde{Y}_c''^2)}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho}\widetilde{u}Y_c''^2) = \nabla \cdot \left[\left(\frac{\mu}{S_c} + \frac{\mu_t}{S_{c_t}} \right) \nabla \widetilde{Y}_c''^2 \right] + C_\varphi \left(\frac{\mu}{S_c} + \frac{\mu_t}{S_{c_t}} \right) |\nabla \widetilde{Y}_c|^2 - \bar{\rho} \frac{C_\varphi}{\tau_t} \widetilde{Y}_c''^2, \quad (2.113)$$

onde \widetilde{S}_c é o termo fonte médio da variável de progresso não normalizada, C_φ é uma constante do modelo e τ_t é a escala de tempo característica da turbulência, definida por

$$\tau_t = \frac{l_t}{u_{rms}} \quad e \quad l_t = C_d \frac{u_{rms}^3}{\tilde{\epsilon}}, \quad (2.114)$$

na qual a constante C_d é igual a 0,37.

Utilizar Y_c ao invés de c nas equações de transporte costuma ser vantajoso, uma vez que, por não ser comum a presença de produtos da combustão na corrente não queimada do oxidante, Y_c^{eq} torna-se nula e c acaba ficando indefinida nessas regiões, o que pode levar a dificuldades na especificação de sua condição de contorno na fronteira do oxidante. Outra vantagem de escrever equações de transporte para \widetilde{Y}_c e $\widetilde{Y}_c''^2$ se deve a uma redução significativa na quantidade de derivadas e derivadas cruzadas adicionais envolvendo a fração de mistura média [Bray et al., 2005, p. 433].

O termo fonte médio não normalizado da variável de progresso c , \widetilde{S}_c , é obtido da integração do termo fonte da solução laminar dos *flamelets*, S_c , tal que

$$\widetilde{S}_c = \int_0^1 \int_0^1 S_c(Z, c) \tilde{P}_Z(Z, \tilde{Z}, \widetilde{Z''^2}) \tilde{P}_c(c, \tilde{c}, \widetilde{c''^2}) dZ dc. \quad (2.115)$$

O termo fonte da variável de progresso para a solução laminar, S_c , por sua vez, é definido como uma combinação das taxas de produção/destruição de massa das mesmas espécies utilizadas na composição de c , ou seja,

$$S_c = \sum_{k=1}^{N_c} \alpha_k \dot{\omega}_k, \quad (2.116)$$

cujos termos são obtidos do mecanismo detalhado de cinética química utilizado na solução

dos *flamelets*.

Como já comentado na Seção 1.2.2, existe certa confusão na designação dada a modelos muito similares entre si, desenvolvidos todos em um intervalo de poucos anos. Além desta dificuldade com as nomenclaturas, é comum haver também variabilidade em suas formulações, tendo cada modelo suas peculiaridades, apesar de todos partirem de um mesmo conceito. Por exemplo, os modelos podem diferir na forma como são resolvidas as equações para os *flamelets*, escritas ora para o campo espacial (em função de x), ora para o campo composicional (em função de Z). Também há variação na forma como são escritas as equações de transporte para a variável de progresso da reação (ou da sua versão não normalizada), contendo constantes e termos de fechamento variados. Mas, como já comentado, é na definição da variável de progresso da reação onde reside a maior variação entre os modelos, diferindo até mesmo entre os trabalhos de um mesmo grupo de pesquisa. Esta última é escrita de formas diversas, ora não normalizada, ora normalizada pelos valores da condição de equilíbrio químico, pelos de estequiometria, pelos valores máximos ou ainda outros, e isso sem levar em conta as espécies químicas escolhidas na sua composição e os seus respectivos fatores de ponderação. Não há como explorar aqui cada uma dessas variações, o que levou a ser dado foco apenas à formulação disponível no código CFD empregado no presente trabalho.

Para finalizar, na Figura 2.8 é ilustrado esquematicamente o procedimento completo empregado pelos modelos SLDF e FGM.

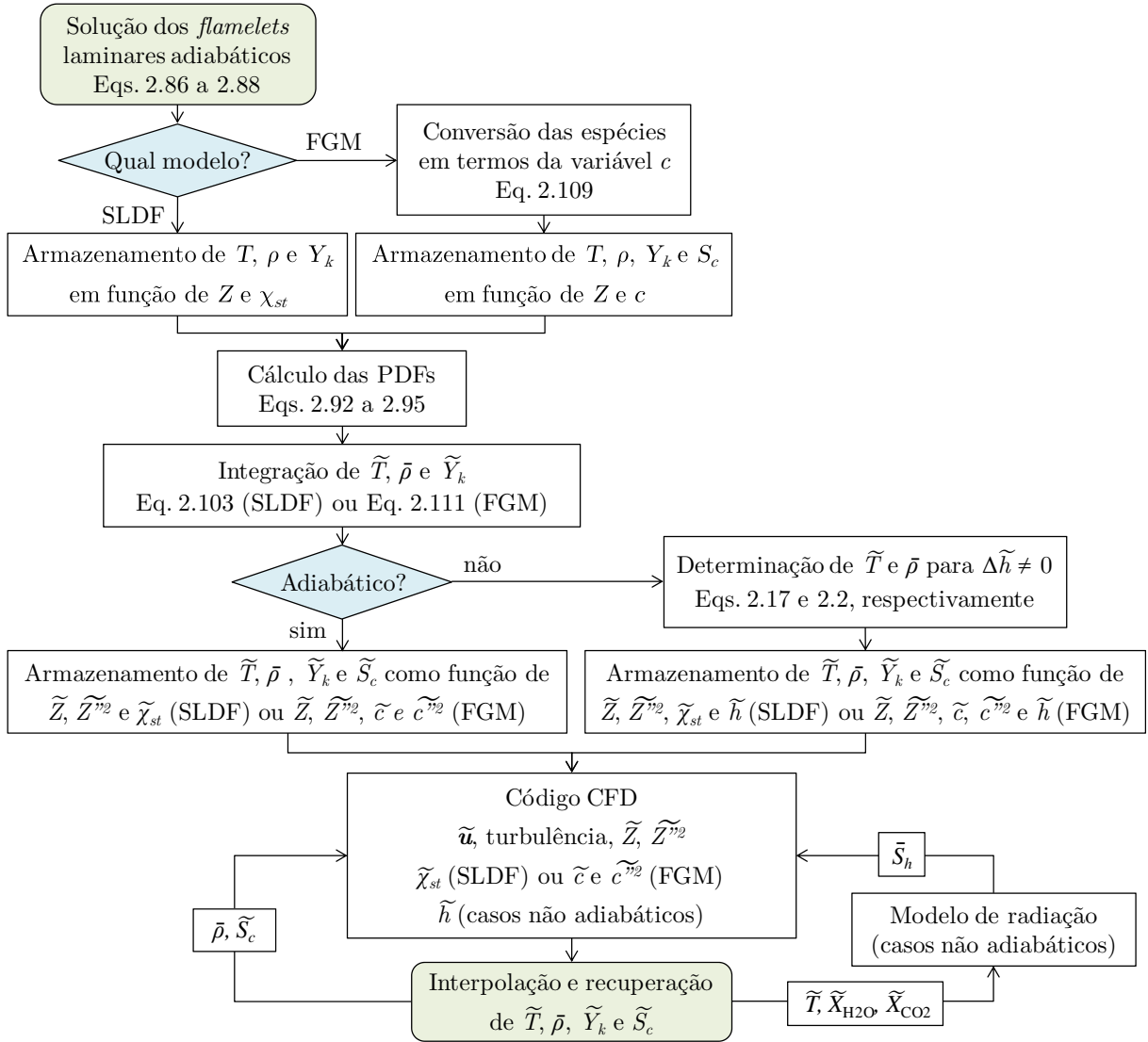


Figura 2.8 – Fluxograma de etapas empregadas pelos modelos SLDF e FGM

2.6 Estudo de Refinamento da Malha

O estudo de independência dos resultados em função do nível de refinamento da malha seguiu as orientações de Celik et al., 2008. Para cada estudo foram adotadas quatro malhas diferentes, com nível de refinamento entre elas de no mínimo 1,3, conforme recomendação dos autores. O fator de refinamento entre as malhas, r , é expresso por

$$r = \frac{h_{\text{menos refinada}}}{h_{\text{mais refinada}}}, \quad (2.117)$$

onde h corresponde a um tamanho representativo médio dos elementos da malha, dado por

$$h = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n A_i}, \quad (2.118)$$

no qual A_i é a área de cada elemento n .

Ainda seguindo Celik et al., 2008, foram determinados os índices de convergência entre as malhas (GCI - *Grid Convergence Index*) ao passo que elas foram refinadas para algumas das propriedades mais relevantes, tal que

$$GCI = \frac{1,25 e}{r^p - 1}, \quad (2.119)$$

onde p é a ordem formal de discretização espacial do método, igual a 2 neste estudo, uma vez que as discretizações são todas de segunda ordem, e e é o erro relativo entre a solução de uma malha e outra, dado por

$$e = \left| \frac{\phi_{mais\ refinada} - \phi_{menos\ refinada}}{\phi_{mais\ refinada}} \right|. \quad (2.120)$$

Apesar de não ser o único método disponível, com o GCI é possível determinar de uma forma quantitativa e consistente a contribuição de refinamentos consecutivos empregados à malha sobre os resultados numéricos obtidos, ao invés de somente reportar o erro relativo entre os valores obtidos com cada malha [Roache, 1994]. Contudo, os autores não citam qual seria um nível aceitável para o GCI, até mesmo porque tal dependeria de fatores como a natureza do problema investigado, precisão desejada para os resultados e disponibilidade de tempo e recursos computacionais. Sendo assim, determinar um limite adequado para o GCI acaba ficando por conta da experiência do pesquisador.

Com base nos mesmos trabalhos, foi possível determinar também a convergência da solução para a faixa assintótica, ou seja, o resultado que seria obtido com uma malha de resolução infinitesimal ($h \rightarrow 0$), obtido através da expressão dada por

$$\phi_{extrapolação\ assintótica} = \frac{r^p \phi_{mais\ refinada} - \phi_{menos\ refinada}}{r^p - 1}. \quad (2.121)$$

A proximidade das soluções de cada malha com o resultado da solução assintótica também pode ser um bom indicador da qualidade da independência dos resultados.

3 COMPARAÇÃO DOS MODELOS DE TURBULÊNCIA

A simulação numérica de chamas turbulentas ainda é um desafio à mecânica dos fluidos computacional, sendo frequentemente encontradas discrepâncias entre resultados numéricos e experimentais. Conseqüentemente, a escolha dos melhores modelos e submodelos físicos e práticas numéricas representa uma etapa importante no estudo da combustão. Ademais, na análise dos resultados numéricos da combustão turbulenta, é difícil determinar a contribuição de cada modelo físico nos resultados obtidos, uma vez que os fenômenos de transporte estão acoplados entre si de uma forma bastante complexa. Sendo assim, é muito importante uma validação por partes desses submodelos, isolando o quanto possível a interação entre os diferentes fenômenos.

Dessa forma, esta seção é dedicada à comparação de diferentes modelos RANS de fechamento da turbulência, todos baseados em duas equações diferenciais parciais, na simulação de um jato livre não reativo e isotérmico de propano (C_3H_8) circundado por um escoamento coaxial de ar [Schefer et al., 1986 e 1987; Schefer e Dibble, 1986 e 2001; Dibble et al., 1987].

O referido jato faz parte como um dos casos de referência para o *International Workshop on Measurement and Computation of Turbulent Nonpremixed Flames* [Sandia National Laboratories], sendo que ele foi escolhido por: 1) tratar-se de um escoamento isotérmico, não havendo, portanto, a interferência de fenômenos devidos à transferência de calor, sejam eles entre os fluidos participantes ou para as paredes; 2) ser plenamente turbulento, com número de Reynolds baseado no diâmetro de saída do jato de propano de aproximadamente $6,8 \cdot 10^4$, possibilitando uma avaliação segura dos modelos de fechamento RANS; 3) pela relativamente elevada razão entre as massas específicas dos fluidos do jato e do escoamento circundante, $R_\rho \cong 1,52$, caracterizando-o como um jato de massa específica variável, propriedade essa que reproduz, de forma simplificada, a variação de massa específica encontrada em escoamentos reativos devida à liberação de calor e expansão térmica [Schefer e Dibble, 2001, p. 64]; e 4) já ter sido estudado por pesquisadores diversos, sendo que tais trabalhos já foram tratados na Seção 1.2.1.

Neste estudo é avaliada a consistência das informações experimentais disponíveis e uma discrepância relevante é identificada, sendo que não foi encontrado na literatura acessível outro trabalho que explicitasse qualquer inconsistência nos dados experimentais. Na sequência, uma série de modelos RANS baseados em duas equações diferenciais parciais é empregada na solução do escoamento descrito, sendo seus resultados avaliados sob a luz das dificuldades encontradas nos dados experimentais. Também não foi encontrado trabalho que apresentasse uma comparação ampla, sistemática e quantitativa dos modelos de fechamento para este problema. Ademais, este estudo tem como objetivo cobrir diversas das quantidades medidas experimentalmente, uma vez que os trabalhos revisados apresentam apenas algumas delas, e na maioria deles para poucas posições.

A descrição completa do caso é feita na Seção 3.1. Na Seção 3.2 são apresentadas as abordagens numéricas, as equações governantes e as principais considerações adotadas para resolver numericamente o problema descrito. Na Seção 3.3 são apresentados e discutidos os resultados obtidos. As conclusões são apresentadas na Seção 3.4.

3.1 Caracterização do Problema

O problema sob investigação consiste de um jato não pré-misturado e não reativo de propano (C_3H_8) circundado por um escoamento coaxial de ar, que foi conduzido em um túnel de vento vertical de escoamento forçado, com o bico injetor de propano centralizado na extremidade a montante de sua seção de testes.

A seção de testes, totalmente envidraçada, possuía geometria quadrada, de lados com 30 cm na largura e 200 cm no comprimento. O bico do tubo injetor de propano possuía um diâmetro interno, D , de 5,26 mm e um diâmetro externo de 9 mm, com uma seção reta com 200 cm de comprimento antes de atingir sua saída, assegurando que o escoamento fosse plenamente desenvolvido no seu interior. A vazão de propano foi controlada através de medidores de vazão, com uma incerteza informada de 2%.

O escoamento coaxial de ar, por sua vez, foi fornecido por um ventilador centrífugo do tipo soprador, localizado a montante da seção de testes. Antes de atingir a seção de testes, contudo, o ar passou através de uma colmeia, para mitigação das componentes laterais do escoamento, e um cone de contração com razão de áreas igual a 9:1, fornecendo um nível de turbulência igual a 0,4%, conforme medições obtidas através de anemometria de fio quente.

A Figura 3.1 ilustra o aparato experimental utilizado. Uma descrição completa pode ser encontrada em Dibble et al., 1984, e nos demais trabalhos citados na seção anterior.

Conforme descrito pelos pesquisadores que conduziram o experimento, ele foi ajustado para que a vazão mássica de propano fosse igual a 2,3 g/s, correspondendo a um número de Reynolds igual a 68.168, baseado no diâmetro interno do bico injetor. O escoamento coaxial de ar seco, por sua vez, era igual a 9,2 m/s ($\pm 0,1$ m/s), com a formação de uma delgada camada-limite medida no plano de saída do escoamento ao redor do diâmetro externo do bico injetor de propano, com espessura de aproximadamente 0,3 vezes o diâmetro do jato. As correntes de propano e ar eram isotérmicas, a 294 K (± 2 K), e os autores indicaram um gradiente de pressão axial de 6 Pa/m ao longo da seção de testes.

Contudo, certa incerteza recai sobre os valores de velocidade informados para a saída do bico injetor. Os autores indicaram que a velocidade média, $\tilde{u}_{méd}$, do escoamento de propano na saída do bico injetor seria igual a 53 m/s, enquanto que a velocidade máxima na linha de centro do jato, $\tilde{u}_{máx}$, medida a partir de anemometria de fio quente, seria igual a 69 m/s, correspondendo a uma razão $\tilde{u}_{máx}/\tilde{u}_{méd} = 1,30$, significativamente maior do que seria de se esperar de um escoamento plenamente desenvolvido no interior de um duto circular. Se adotado como referência um perfil de velocidade do tipo *power-law*, é possível

determinar que a razão $\tilde{u}_{m\acute{a}x}/\tilde{u}_{m\acute{e}d}$ deveria ser pr3xima de 1,23, uma vez que ele depende do n3mero de Reynolds, conforme a Tabela 3.1, onde n 3 o expoente utilizado para determinar o perfil de velocidades.

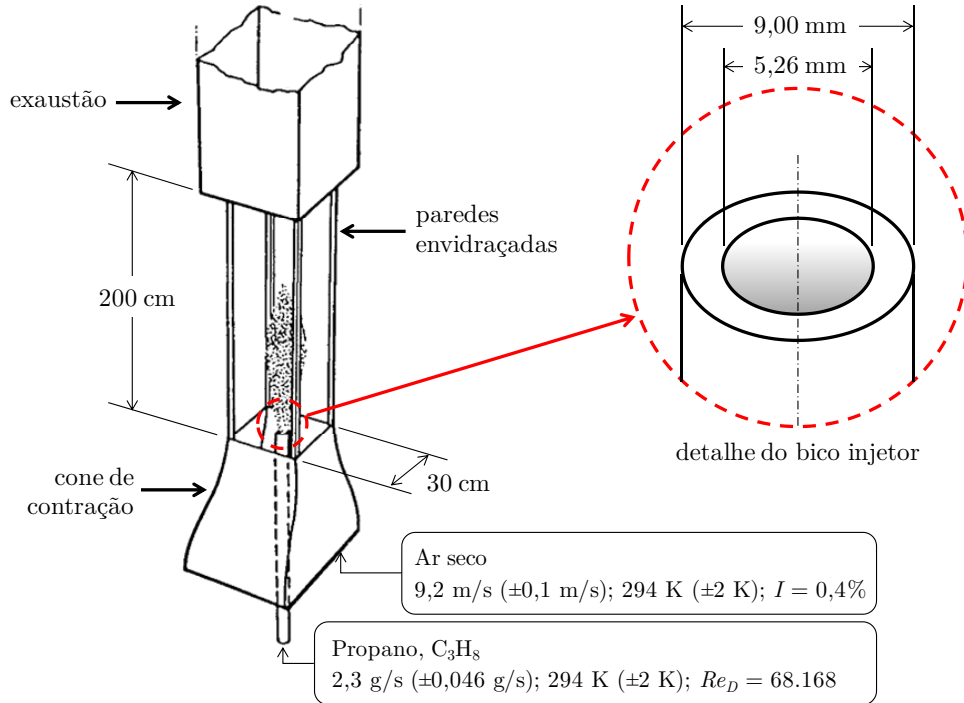


Figura 3.1 – Ilustra33o do aparato experimental
[adaptada de Schefer et al., 1987, p. 1319]

Tabela 3.1 – Propriedades de perfis de velocidade do tipo *power-law*

N3mero de Reynolds, Re	Expoente n	Raz3o $\tilde{u}_{m\acute{a}x}/\tilde{u}_{m\acute{e}d}$
$4,0 \cdot 10^3$	6	1,26
$2,3 \cdot 10^4$	6,6	1,24
$1,1 \cdot 10^5$	7	1,22
$1,1 \cdot 10^6$	8,8	1,18
$2,0 \cdot 10^6$	10	1,16
$3,2 \cdot 10^6$	10	1,16

Fonte: adaptada de Schlichting, 1968, p. 563

Na Tabela 3.1 as raz3es $\tilde{u}_{m\acute{a}x}/\tilde{u}_{m\acute{e}d}$ foram calculadas atrav3s do inverso da express3o apresentada por Schlichting, 1968, p. 563, para a raz3o entre as velocidades m3xima e m3dia para um escoamento plenamente desenvolvido no interior de um duto, dada por

$$\frac{\tilde{u}_{m\acute{e}d}}{\tilde{u}_{m\acute{a}x}} = \frac{2 n^2}{(n + 1)(2 n + 1)}. \quad (3.1)$$

Ademais, o valor informado para a velocidade m3dia para o jato de propano, de 53 m/s, n3o 3 condizente com o n3mero de Reynolds nem com a vaz3o informados nas

condições nas quais foi realizado o experimento. Além disso, a massa específica da mistura obtida na saída do bico injetor, igual a $2,06 \text{ kg/m}^3$, é maior que a massa específica do propano, de $1,86 \text{ kg/m}^3$ (10,8% maior), nas condições informadas de temperatura e pressão. Essas discrepâncias levam a crer que o valor informado para a velocidade média do jato de propano na sua saída deva ser maior, igual a $56,86 \text{ m/s}$ (7,3% maior). Infelizmente, já se passaram quase três décadas desde a publicação dos estudos experimentais, e não há mais como identificar a fonte do erro, conforme verificado através de comunicação privada com os autores do experimento [Dibble e Barlow, 2015]. A influência destas incertezas é investigada na Seção 3.3.3.

A quantidade de resultados experimentais é extensa, incluindo os valores médios e as flutuações *rms* para as velocidades longitudinal e transversal, fração mássica de propano e massa específica da mistura, além de uma série de resultados muito úteis para análises estatísticas, como funções de densidade de probabilidade e momentos estatísticos centrais de maior ordem. Todos esses dados estão disponíveis de forma digital, podendo ser acessados no *site* dos Laboratórios da Sandia [Sandia National Laboratories], sendo bastante adequados para a comparação com resultados numéricos.

Os resultados estão disponíveis na forma de perfis axiais, medidos na linha de centro da seção de testes, e transversais, para quatro posições medidas a jusante da saída do bico injetor de propano, em $x/D = 4, 15, 30$ e 50 . A Tabela 3.2 sumariza as principais propriedades medidas, os respectivos métodos dos quais foram obtidas e as incertezas estimadas correspondentes.

Tabela 3.2 – Propriedades medidas experimentalmente

Propriedade	Incerteza	Método de diagnóstico
velocidade média longitudinal, \tilde{u}	$\pm 1\%$	velocimetria Doppler a laser (LDV)
velocidade média transversal, \tilde{v}	$\pm 1,5\%$	
velocidade rms longitudinal, u_{rms}	$\pm 2\%$	
velocidade rms transversal, v_{rms}	$\pm 2,5\%$	
correlação entre as flutuações das velocidades longitudinal e transversal, $u''v''$	$\pm 5\%$	
fração mássica média de propano, $\tilde{Y}_{C_3H_8}$	$\pm 2\%$	dispersão de Rayleigh
fração mássica rms de propano, $Y_{C_3H_8,rms}$	$\pm 3\%$	
massa específica média, $\bar{\rho}$	$\pm 2\%$	obtida da fração de propano
massa específica rms, ρ_{rms}	$\pm 3\%$	

3.2 Modelagem Numérica

Esta seção é dedicada a apresentar as abordagens empregadas na simulação do caso descrito, assim como os modelos adotados e suas respectivas equações governantes.

3.2.1 Equações Governantes

O problema foi resolvido numericamente empregando as equações RANS na condição de regime estacionário para a conservação de massa total (Equação 2.33), de massa das espécies (Equação 2.34) e de quantidade de movimento (Equação 2.35). Contudo, uma vez que o escoamento é não reativo, não se fez presente o termo fonte para produção/destruição de massa na equação para conservação de massa das espécies, e, por ser isotérmico, não foi necessária a equação para conservação de energia (Equação 2.36).

Além das equações de transporte acima descritas, devem também ser resolvidas aquelas relativas aos modelos de fechamento da turbulência.

3.2.2 Condições de Contorno e Propriedades Físicas

O problema foi reduzido a uma geometria bidimensional e de simetria radial, com 15 cm na largura e 200 cm no comprimento, ou seja, compreendendo radialmente desde o eixo de simetria até a parede envidraçada, e, longitudinalmente, da saída das correntes de ar e propano até a exaustão da seção de testes.

Apesar de a seção de testes ser quadrada no experimento, esta simplificação do domínio computacional para uma geometria radial se mostrou satisfatória em uma avaliação preliminar, na qual foi observada uma concordância muito boa entre as soluções numéricas obtidas com as malhas bi e tridimensionais [Deon et al., 2014]. Ademais, todos os demais estudos numéricos para este caso assumiram esta mesma simplificação.

Condições de contorno usuais foram atribuídas às fronteiras, de acordo com as informações apresentadas na Seção 3.1. Sendo assim, às paredes foram assumidas as condições de não deslizamento e de impermeabilidade; à saída da seção de testes foi atribuída a pressão ambiente de 1 atm, com um gradiente de pressão axial de 6 Pa/m; a velocidade transversal foi assumida nula na linha de simetria e na fronteira aberta para o ambiente; na linha de simetria foram impostos gradientes nulos para todas as propriedades; e perfis de velocidade bem definidos às fronteiras de entrada das correntes de ar e propano.

O perfil do escoamento coaxial de ar foi obtido através de anemometria de fio quente, e está disponível entre os resultados experimentais. Já o perfil de velocidade do jato de propano foi aproximado através de uma distribuição do tipo *power-law* para escoamentos turbulentos plenamente desenvolvidos em dutos circulares [Schlichting, 1968, p. 563], a partir da velocidade central do jato e de forma a corresponder ao valor informado para a vazão de propano, igual a 2,3 g/s, tal que

$$\frac{\tilde{u}}{\tilde{u}_{m\acute{a}x}} = \left(1 - \frac{r}{R}\right)^{1/n}, \quad (3.2)$$

na qual o expoente $n = 6,8$ foi determinado a partir do número de Reynolds do jato,

conforme a Tabela 3.1.

As condições da turbulência nas fronteiras das entradas de ar e propano foram parametrizadas através de seus diâmetros hidráulicos e intensidades da turbulência, I , de 0,4% para a corrente de ar, obtida de anemometria de fio quente, e de 3,98% para o jato de propano, estimada através de uma correlação empírica para escoamentos em dutos plenamente desenvolvidos como função do número de Reynolds baseado no diâmetro hidráulico, D_h , do duto [ANSYS Inc., 2013b, p. 258], valor que corresponde a uma turbulência de intensidade média, ou seja, entre 1 e 5%. A expressão para I é dada por

$$I = u_{rms}/\tilde{u}_{méd} \equiv 0,16 Re_{D_h}^{-1/8}. \quad (3.3)$$

Nas entradas de ar e propano a energia cinética turbulenta foi obtida através da relação $\tilde{k} = 3/2 (\tilde{u}_{in} I)^2$, onde \tilde{u}_{in} é a velocidade do escoamento na fronteira correspondente. No caso dos modelos k - ε , a taxa de dissipação de \tilde{k} foi obtida através de $\tilde{\varepsilon} = (C_\mu^{3/4} \tilde{k}^{3/2})/l_t$, onde l_t é a escala de comprimento característica da turbulência na fronteira, aproximada através da relação $l_t = 0,07 D_h$. Nos modelos k - ω , por sua vez, a taxa de dissipação específica de \tilde{k} foi obtida através de $\tilde{\omega} = \tilde{k}^{1/2}/(C_\mu^{1/4} l_t)$.

As espécies químicas participantes foram modeladas como sendo apenas duas, ar e propano. Suas propriedades físicas, resumidas na Tabela 3.3, foram determinadas de acordo com as condições ambientes do experimento.

Tabela 3.3 – Propriedades físicas das espécies químicas participantes

Espécie k	$\bar{\rho}_k$ [kg/m ³]	μ_k [kg/m · s]	W_k [kg/kmol]
ar	1,22	1,8247 10 ⁻⁵	28,9586
propano	1,86	8,1362 10 ⁻⁶	44,0956

Sendo apenas duas as espécies, foi resolvida numericamente somente a fração mássica do propano, enquanto que a do ar foi obtida da diferença da soma unitária que deve resultar da mistura (Equação 2.5). Já a massa específica da mistura foi obtida da fração mássica de propano e das massas específicas das espécies, sendo dada por

$$\bar{\rho} = \left(\sum_{k=1}^{N_k} \frac{\tilde{Y}_k}{\bar{\rho}_k} \right)^{-1}. \quad (3.4)$$

A viscosidade dinâmica molecular da mistura foi determinada de acordo com Wilke, 1950, considerando-a como uma mistura de dois gases ideais, k e l , tal que

$$\mu = \sum_k \frac{X_k \mu_k}{\sum_l X_l \varphi_l}, \quad (3.5)$$

onde φ_l é determinado através da teoria cinética dos gases, sendo dado por

$$\varphi_l = \frac{[1 + (\mu_k/\mu_l)^{1/2}(W_l/W_k)^{1/4}]^2}{[8(1 + W_k/W_l)]^{1/2}}. \quad (3.6)$$

Devido às incertezas presentes nos dados experimentais, como já mencionado, esta seção objetivou uma apresentação detalhada das condições de contorno e propriedades físicas adotadas de forma a deixar o mais claro quanto possível as condições empregadas nas simulações do presente trabalho. Entre os estudos numéricos encontrados para este caso, nenhum deles aponta de forma explícita a deficiência na publicação do experimento, além de a maioria deles apresentar apenas as condições de contorno muito brevemente ou sequer mencioná-las. Entre eles, um único pareceu estar ciente de tal inconsistência [Morgans et al., 1999], no qual foi empregado um perfil de distribuição de velocidade do tipo *power-law* para o jato de propano, resultando em uma velocidade média igual a 56,7 m/s, e de 70 m/s na linha central do jato.

3.2.3 Comparação dos Resultados

Todas as simulações foram realizadas empregando o código CFD comercial ANSYS Fluent, versão 15.0.0, adotando discretizações espaciais com o esquema *upwind* de segunda ordem e o esquema SIMPLE (*Semi-Implicit Method for Pressure Linked Equations*) para o acoplamento entre o campo de pressão e o de velocidades, algoritmo esse que emprega correções para a velocidade de forma a assegurar a conservação de massa e obter o campo de pressões. Os critérios de convergência de todas as equações foram estabelecidos para resíduos inferiores a 10^{-12} , que foi o melhor nível de convergência obtido nas simulações.

Os resultados de cada modelo utilizado foram comparados aos dados experimentais através do coeficiente de determinação R-quadrado (R^2), que indica o quanto fiel é um conjunto de dados em relação a valores referenciais [Draper e Smith, 1998, p. 33; Rawlings et al., 1998, p. 9], sendo definido por

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_i (\phi_i - \phi_{ref,i})^2}{\sum_i (\phi_{ref,i} - \overline{\phi_{ref}})^2}, \quad (3.7)$$

onde ϕ_i representa a variável avaliada em relação ao valores referenciais, ϕ_{ref} , e a sobre-barra corresponde a uma média simples das amostras analisadas, ou seja,

$$\overline{\phi_{ref}} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \phi_{ref,i}, \quad (3.8)$$

onde n é o tamanho da amostragem.

O coeficiente R-quadrado varia de 0 a 1. Quanto maior for seu valor, maior é a concordância entre a série numérica analisada e os valores de referência.

3.2.4 Estudo de Refinamento da Malha

Quatro malhas diferentes foram adotadas, com fator de refinamento, r , entre elas igual a 1,5. As malhas, bidimensionais e axissimétricas, foram compostas de elementos retangulares e de tamanho não uniforme, com refinamento concentrado na região de saída do jato de propano e também próximo à parede da seção de testes, apesar de esta última ter pouca influência sobre a região central do jato.

Para o teste das malhas foi escolhido o modelo $k-\varepsilon$ Padrão com a modificação proposta por Morse, 1977, e Pope, 1978. Para cada malha foram determinados os valores médios da velocidade longitudinal, da fração mássica de propano e da massa específica da mistura ao longo da linha de simetria axial. A evolução dos resultados à medida que foram refinadas as malhas e seus índices de convergência são apresentados nas Figuras 3.2 a 3.4, juntamente com o resultado obtido através de extrapolação para a faixa assintótica, conforme a Equação 2.121.

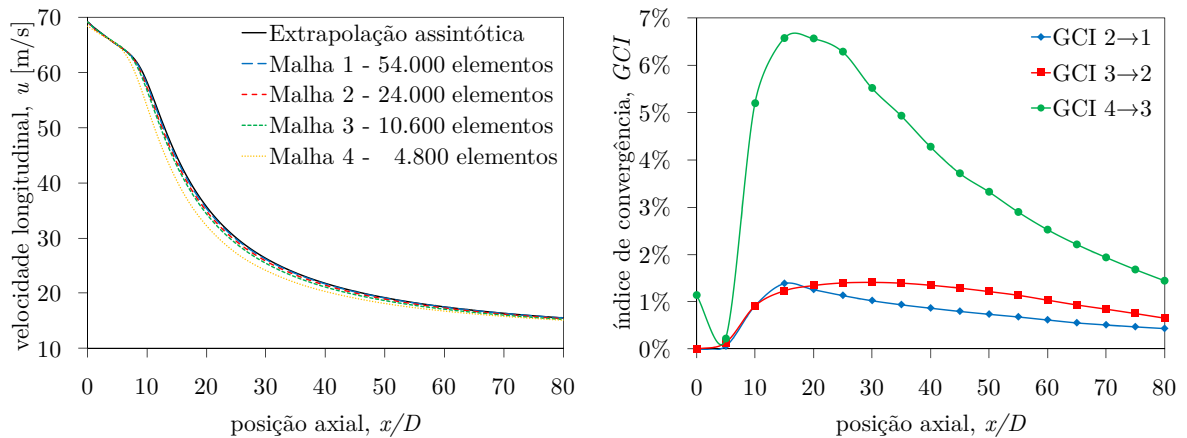


Figura 3.2 – Velocidade média longitudinal para cada malha e GCI entre elas

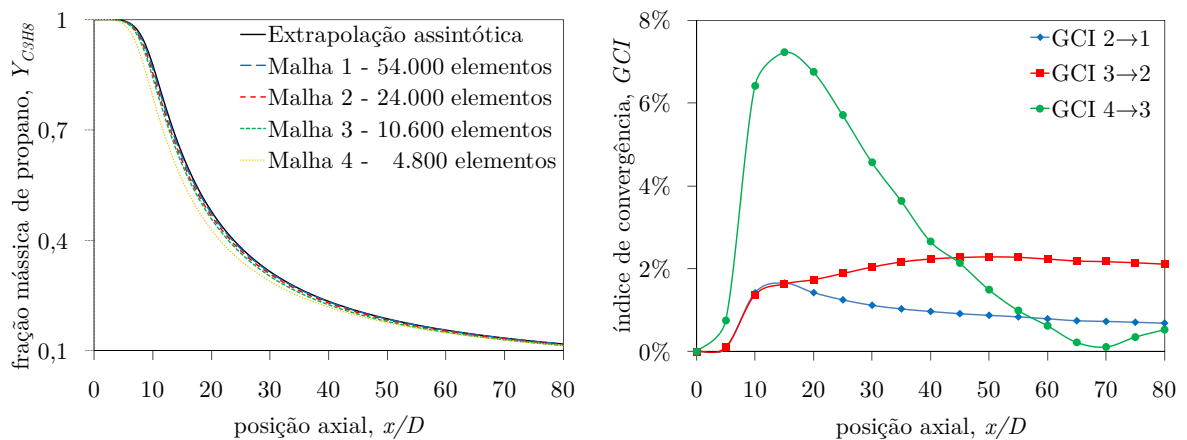


Figura 3.3 – Fração mássica média de propano para cada malha e GCI entre elas

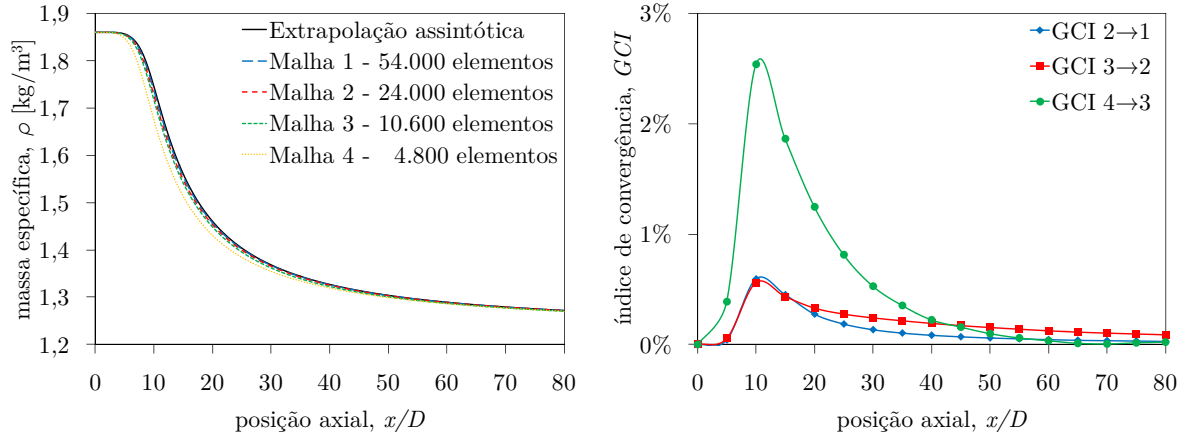


Figura 3.4 – Massa específica média para cada malha e GCI entre elas

Pode ser observado nestas figuras que os resultados obtidos para as três malhas mais refinadas (com 10.600, 24.000 e 54.000 elementos) praticamente colapsam uns sobre os outros nos gráficos para a velocidade média longitudinal, a fração mássica de propano e a massa específica. Os resultados para a malha mais grosseira, com 4.800 elementos, contudo, são significativamente distintos daqueles obtidos com as demais malhas, especialmente na região que compreende de $x/D = 5$ a 40. Esse efeito é melhor observado através dos gráficos para os índices de convergência das malhas, nos quais é notado um pico no GCI quando comparados resultados das malhas nº 4 (4.800 elementos) e nº 3 (10.600 elementos), conforme a linha verde nos gráficos. Já quando comparadas as malhas nº 2 (24.000 elementos) e nº 1 (54.000 elementos), o GCI entre elas é significativamente menor.

Conforme a Tabela 3.4, foi registrada a quantidade de iterações e o tempo necessário para atingir a convergência para cada uma das malhas avaliadas, em um computador com processador Intel Core i7-4500U de 2,40 GHz e 16 GB de memória RAM. Também foi avaliada a vazão mássica computada na fronteira da saída do bico injetor de propano, de forma a verificar a concordância com o valor experimental informado, de 2,3 g/s.

Tabela 3.4 – Iterações e tempo para obtenção da convergência dos resultados

Descrição	nº 1 - 54.000	nº 2 - 24.000	nº 3 - 10.600	nº 4 - 4.800
iteraões	15.460	7.710	4.380	1.680
tempo [minutos]	28,9	6,4	1,5	0,3
vazão de propano [g/s]	2,302	2,305	2,310	2,313

A malha escolhida para a realização das demais soluções numéricas foi a malha nº 1, com 54.000 volumes de controle, que se mostrou suficientemente refinada de forma a garantir que os resultados estejam independentes do seu nível de refinamento. Através das Figuras 3.2 a 3.4 é possível observar que o GCI entre as malhas nº 2 e nº 1 não ultrapassa o patamar de 2% nas três variáveis avaliadas. Ademais, é muito boa sua concordância com a solução assintótica, sendo praticamente indistinguível nos perfis apresentados, com um erro relativo

médio de 0,6% na velocidade longitudinal, de 0,7% na fração de mistura e de 0,1% na massa específica.

3.3 Resultados

Nas duas subseções seguintes são apresentados os resultados obtidos para cada um dos modelos de turbulência adotados. Os resultados numéricos e experimentais — para os valores médios das velocidades longitudinal e transversal, da fração mássica de propano e da massa específica — são apresentados na forma de gráficos para os perfis axiais na linha de simetria do problema, em $r/D = 0$, e para os perfis radiais para quatro posições medidas a partir da saída do bico injetor, em $x/D = 4, 15, 30$ e 50 .

No caso das velocidades longitudinal e transversal estão presentes duas linhas representando os resultados experimentais para uma mesma posição, cada uma delas correspondendo às medições obtidas com a adição das partículas rastreadoras, necessárias à técnica de velocimetria empregada, ora à corrente de propano ora à corrente de ar, sendo que há certa separação entre elas, como exemplificado na Figura 3.5.

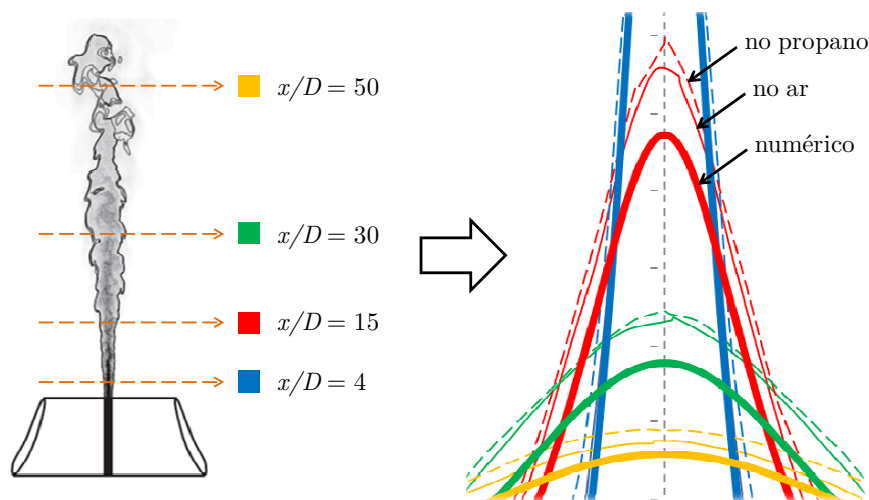


Figura 3.5 – Exemplo da representação dos resultados experimentais e numéricos

Contudo, de acordo com Gouldin et al., 1986, p. 275, esse tipo de erro é comumente encontrado nas medições da técnica LDV (*Laser Doppler Velocimetry*) quando utilizada a adição de partículas de forma desigual nas correntes. Sendo radialmente mais abrangentes os resultados obtidos através da adição de partículas ao escoamento coaxial de ar, foram esses os escolhidos para comparação com os resultados numéricos. Os resultados experimentais para a fração mássica de propano e a massa específica da mistura, porém, não apresentam este tipo de desvio, uma vez que foram obtidos através da dispersão de Rayleigh, na qual as partículas rastreadoras são desnecessárias.

Por fim, juntamente com os resultados são apresentados também os valores de R-quadrado de cada um dos modelos para cada uma das propriedades computadas, mostrando

o quanto fiéis são esses modelos na tentativa de reproduzir o escoamento real. Nas tabelas foram ressaltados os melhores valores de R-quadrado para cada uma das propriedades, ou seja, para os modelos nos quais houve a melhor concordância entre os dados numéricos e os experimentais.

3.3.1 Perfis Axiais

As Figuras 3.6 a 3.8 apresentam os perfis axiais, na linha de simetria da seção de testes, em $r/D = 0$, para os valores médios da velocidade longitudinal, fração mássica de propano e massa específica, respectivamente, para cada modelo. A velocidade transversal não é apresentada, uma vez que ela é nula no eixo de simetria radial.

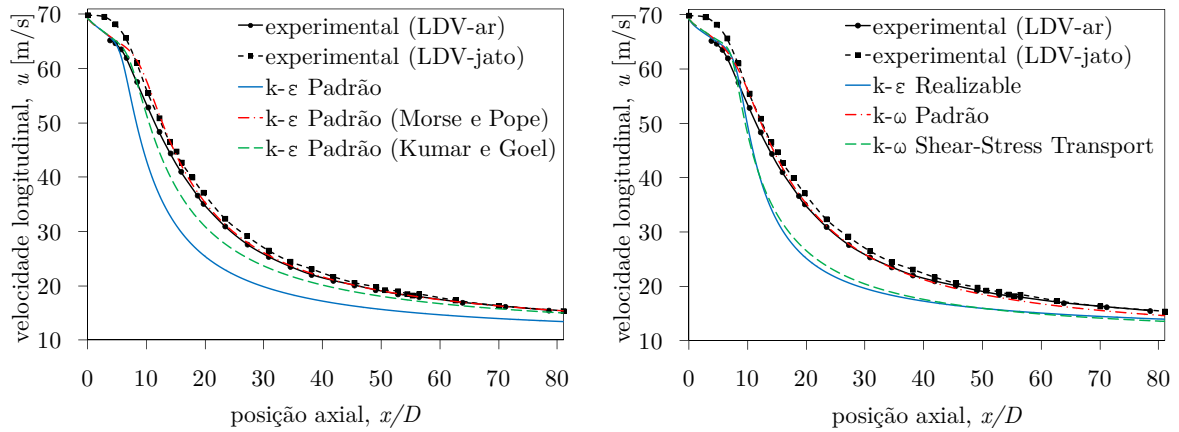


Figura 3.6 – Perfis axiais da velocidade média longitudinal em $r/D = 0$

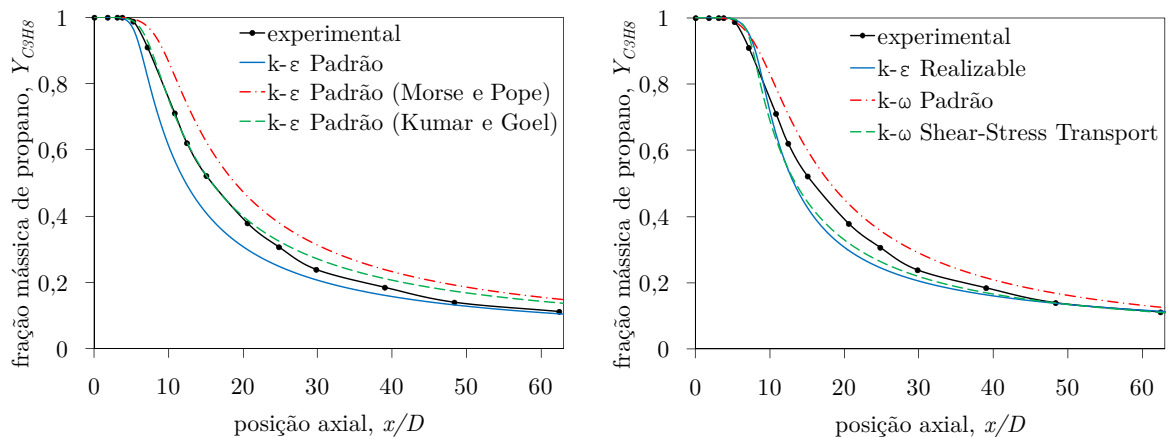


Figura 3.7 – Perfis axiais da fração mássica média de propano em $r/D = 0$

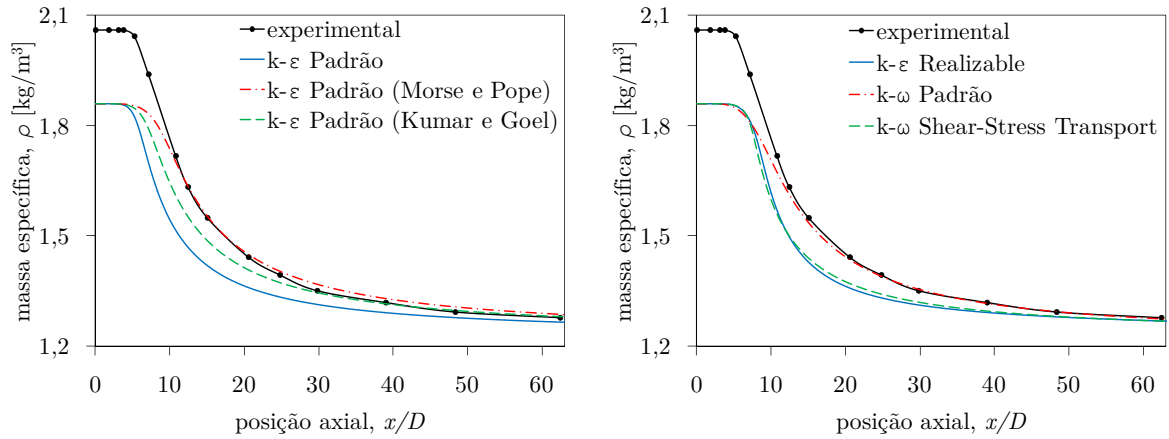


Figura 3.8 – Perfis axiais da massa específica média em $r/D = 0$

De uma forma geral, os resultados para a velocidade longitudinal e a fração de mistura resultaram em boa concordância com as medições experimentais. Por outro lado, os resultados para a massa específica apresentam a já apontada discrepância para a condição de contorno no jato de propano. A importância dessa divergência é investigada na Seção 3.3.3.

Nestas figuras é observado como é significativa a diferença dos perfis axiais obtidos com cada modelo, e como foram efetivas as propostas empregadas para o modelo $k-\varepsilon$ Padrão na modificação de suas constantes. É claramente observado que as modificações de Morse, 1977, e Pope, 1978, e de Kumar e Goel, 2010, reduziram a taxa de decaimento das propriedades do escoamento ao longo da linha central do jato quando comparadas com a versão do modelo $k-\varepsilon$ Padrão sem modificação nenhuma. Ademais, a modificação de Morse, 1977, e Pope, 1978, resultou em perfis mais suaves do que os de Kumar e Goel, 2010, o que pode ser creditado à maior razão $C_{\varepsilon 1}/C_{\varepsilon 2}$ do primeiro, ou seja, da razão entre produção e destruição da energia cinética turbulenta.

Para melhor identificar os modelos com maior concordância com os dados experimentais, na Tabela 3.5 são apresentados os valores de R-quadrado obtidos nos perfis axiais com cada um deles.

Tabela 3.5 – Valores de R^2 nos perfis axiais

ϕ_i	$k-\varepsilon$ Padrão	$k-\varepsilon$ Morse e Pope	$k-\varepsilon$ Kumar e Goel	$k-\varepsilon$ <i>Realizable</i>	$k-\omega$ Padrão	$k-\omega$ SST
\tilde{u}	0,8591	0,9920	0,9828	0,8938	0,9965	0,9119
$\tilde{Y}_{C_3H_8}$	0,9610	0,9633	0,9977	0,9813	0,9823	0,9860
\bar{p}	0,7530	0,8584	0,8339	0,8104	0,8517	0,8117
média*	0,9100	0,9777	0,9903	0,9375	0,9894	0,9489

* A média não inclui os resultados da massa específica, devido às discrepâncias na entrada do jato.

Houve uma diversificação entres os modelos que apresentaram melhor concordância de acordo com a propriedade avaliada. O modelo $k-\omega$ Padrão foi o mais eficiente na predição da velocidade longitudinal, enquanto que os modelos ajustados por Kumar e Goel, 2010, e por

Morse, 1977, e Pope, 1978, foram os mais bem sucedidos na solução da fração mássica de propano e da massa específica da mistura, respectivamente. Contudo, são suspeitos os dados experimentais desta última propriedade, em função das inconsistências encontradas no caso. Esses três modelos obtiveram concordância muito similar em relação aos resultados experimentais, mas se considerado o valor médio de R-quadrado das propriedades avaliadas, o modelo $k-\varepsilon$ Padrão com a modificação de Kumar e Goel, 2010, se mostrou aquele com o melhor desempenho.

A boa concordância do modelo $k-\omega$ Padrão vai ao encontro dos relatos de Morgans et al., 1999, os quais o compararam, para esse mesmo caso, com os modelos $k-\varepsilon$ Padrão, ora sem ajuste de constantes ora com a modificação de Morse, 1977, e Pope, 1978. No seu estudo, os autores concluíram que o desempenho do modelo $k-\omega$ Padrão foi no máximo tão bom quanto ao do modelo $k-\varepsilon$ Padrão ajustado. Entretanto, a sua conclusão se baseia nos resultados para a velocidade média longitudinal apenas. Os autores empregaram a segunda versão do modelo $k-\omega$ Padrão, conforme revisão de Wilcox, feita em 1998, com a incorporação de uma correção para baixos números de Reynolds e a inclusão de um novo parâmetro difusivo cruzado na equação de ω , a mesma versão utilizada no presente trabalho.

Nos perfis de massa específica fica claro que há uma grande disparidade entre os valores numéricos e experimentais para a região próxima à saída do bico injetor, compreendida de $x/D = 0$ a 10, para todos os modelos avaliados. Essa diferença chega a ser de 11%, em $x/D = 0$. A origem dessa discrepância não é clara, mas o problema parece estar nos métodos experimentais. Nessa posição o valor experimental para a massa específica da mistura deveria corresponder à massa específica do propano puro, ou seja, de $1,86 \text{ kg/m}^3$, considerando as condições informadas de temperatura e pressão do experimento. Contudo, os autores relatam um valor de $2,06 \text{ kg/m}^3$, significativamente superior ao esperado. Outro indício que corrobora a essa dúvida é a ausência nos dados experimentais do perfil radial em $x/D = 4$ para a massa específica, posição com dados disponíveis para todas as outras propriedades medidas.

3.3.2 Perfis Radiais

Com o objetivo de não sobrecarregar as páginas com gráficos para os perfis radiais, apenas alguns deles foram escolhidos para serem mostrados. Mais relevantes são os valores de R-quadrado, resumidos nas tabelas subsequentes.

De uma forma geral, todos os modelos foram eficazes na reprodução dos resultados para $x/D = 4$, como pode ser visto através das Figuras 3.9 a 3.11 para os valores médios da velocidade longitudinal e transversal e da fração mássica de propano. Como já comentado, não estão disponíveis para comparação os resultados de massa específica para a posição em $x/D = 4$.

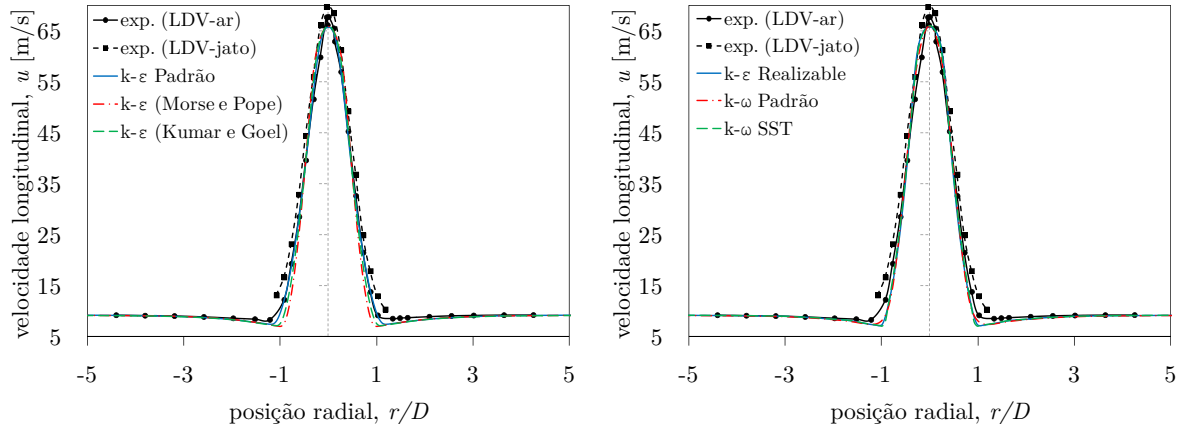


Figura 3.9 – Perfis radiais da velocidade média longitudinal em $x/D = 4$

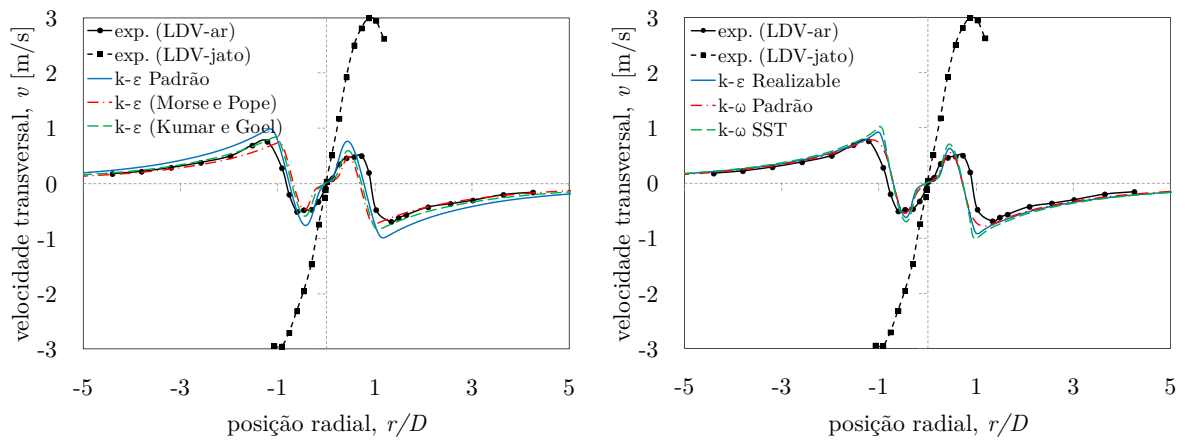


Figura 3.10 – Perfis radiais da velocidade média transversal em $x/D = 4$

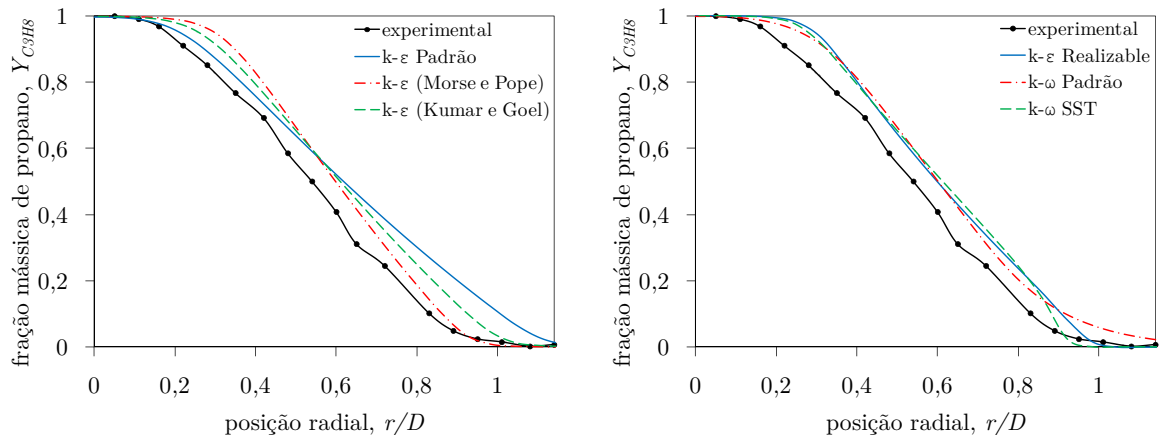


Figura 3.11 – Perfis radiais da fração mássica média de propano em $x/D = 4$

Na Figura 3.10, para a velocidade média transversal, é notado um desvio acentuado entre as medições experimentais obtidas da adição de partículas rastreadoras à corrente de ar e ao jato de propano. Esse desvio é significativamente maior que a incerteza experimental informada, de apenas $\pm 1,5\%$ para as medições LDV. Contudo, as velocidades transversais são de ordem bastante inferior às longitudinais, sendo, assim, menos representativas as comparações entre os resultados numéricos e experimentais para esta variável. Apesar disso,

todos os modelos foram bastante próximos e eficientes na solução dos valores médios da fração mássica de propano e das velocidades obtidas das medições com a adição de partículas rastreadoras à corrente paralela de ar para $x/D = 4$. Esta semelhança entre os resultados dos modelos, contudo, não é estranha, uma vez que nesta posição o escoamento está fortemente condicionado às condições de contorno de saída das correntes de ar e propano.

Por outro lado, quando avaliadas posições intermediárias, em $x/D = 15$ e 30 , os modelos deixam de mostrar resultados próximos entre si como obtido para a posição em $x/D = 4$. Nas Figuras 3.12 a 3.14 podem ser visualizados os valores médios obtidos para a posição em $x/D = 15$.

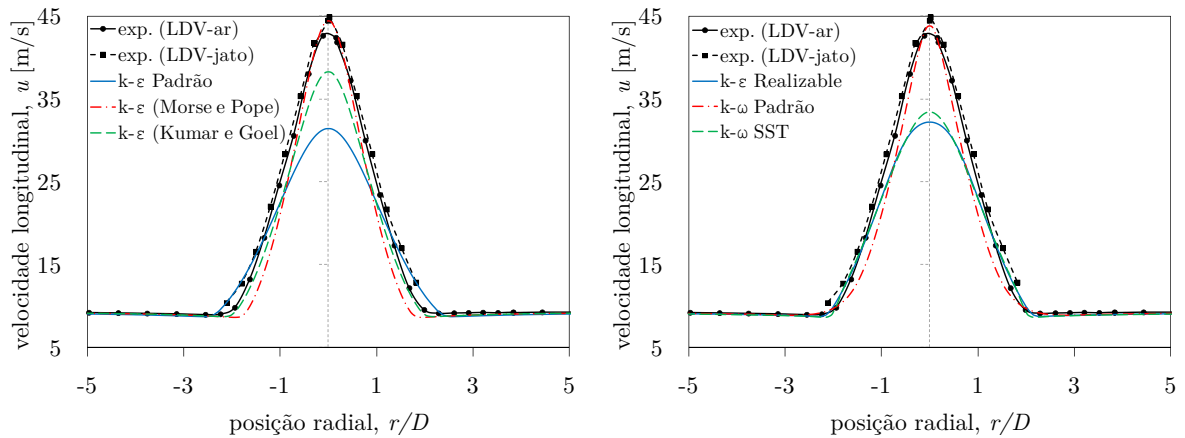


Figura 3.12 – Perfis radiais da velocidade média longitudinal em $x/D = 15$

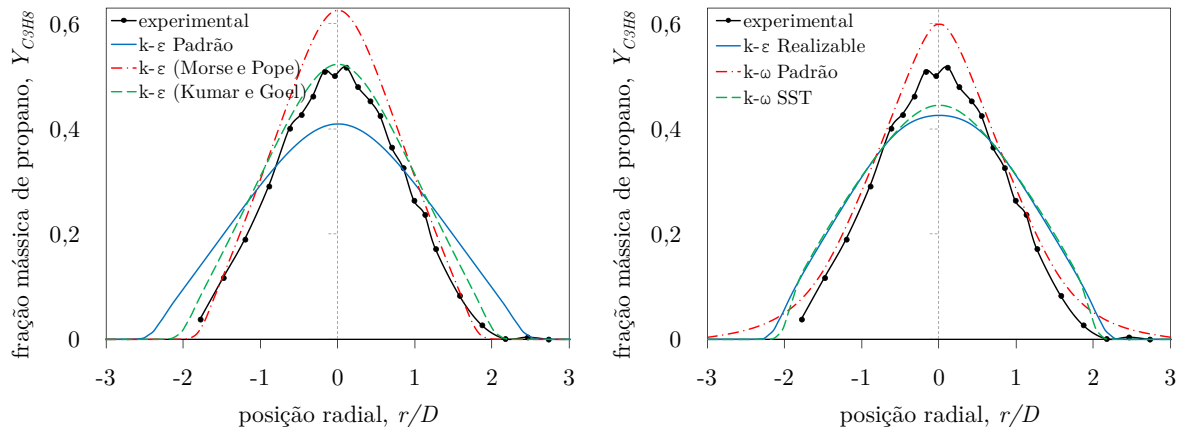


Figura 3.13 – Perfis radiais da fração mássica média de propano em $x/D = 15$

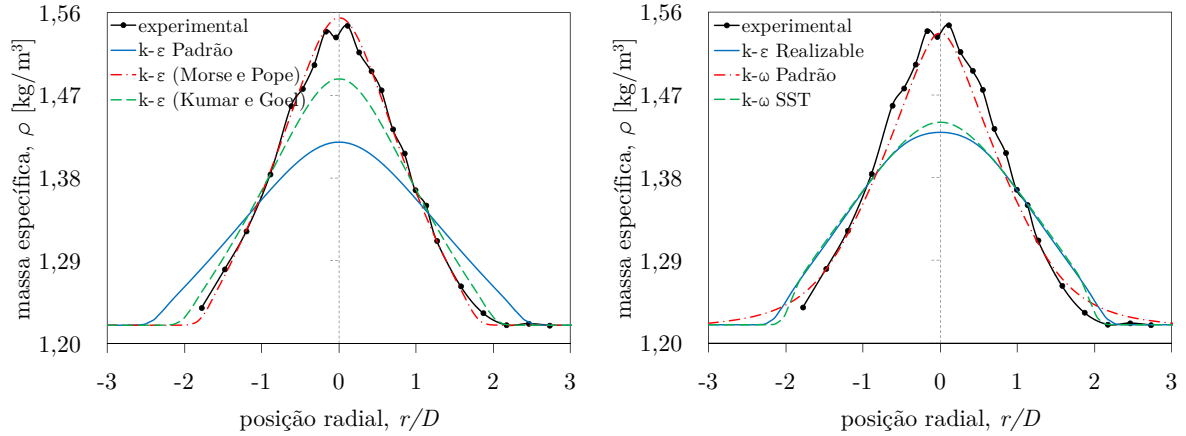


Figura 3.14 – Perfis radiais da massa específica média em $x/D = 15$

Agora, os valores preditos pelos modelos $k-\varepsilon$ ajustados e pelo modelo $k-\omega$ Padrão mostram concordância com os resultados experimentais muito superior do que os demais modelos. Para a velocidade longitudinal, o modelo $k-\varepsilon$ Padrão ajustado por Morse, 1977, e Pope, 1978, e o modelo $k-\omega$ Padrão apresentaram melhor desempenho, enquanto que para a fração mássica de propano e para a massa específica, o modelo $k-\varepsilon$ Padrão ajustado por Kumar e Goel, 2010, e o modelo $k-\omega$ Padrão foram os melhores. Nestas posições fica claro mais uma vez o efeito obtido com as modificações empregadas para o modelo $k-\varepsilon$ Padrão, as quais resultaram em um alongamento dos perfis radiais. A modificação de Morse, 1977, e Pope, 1978, por exemplo, foi a que chegou nos maiores valores das propriedades avaliadas na linha de centro do perfis, e nos menores de todos na região periférica do jato.

Os valores numéricos para a velocidade média transversal, por sua vez, tornam-se cada vez piores à medida que avaliadas posições mais distantes da saída do bico injetor, para qualquer modelo, como pode ser visto na Figura 3.15, para a posição em $x/D = 30$.

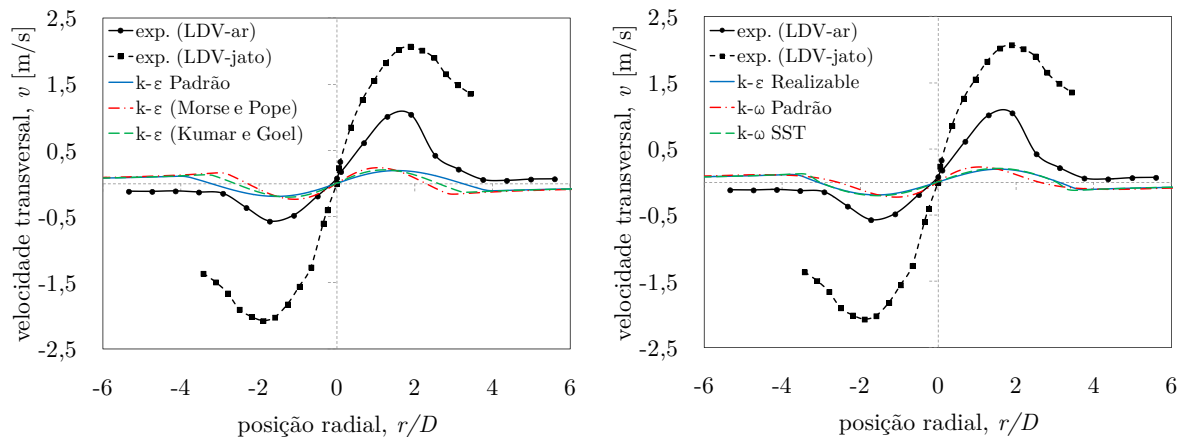


Figura 3.15 – Perfis radiais da velocidade média transversal em $x/D = 30$

Se avaliadas posições ainda mais distantes, as diferenças entre os modelos começam a diminuir, como pode ser visto na Figura 3.16, para a massa específica média em $x/D = 50$. Nesta posição o escoamento já está significativamente atenuado pela dissipação viscosa, com

suas propriedades se aproximando das condições das vizinhanças, impostas pelo ar que circunda o jato. Todavia, mesmo assim, os modelos $k-\varepsilon$ Padrão com ajustes nas constantes e o modelo $k-\omega$ Padrão ainda se mostram melhores que os demais.

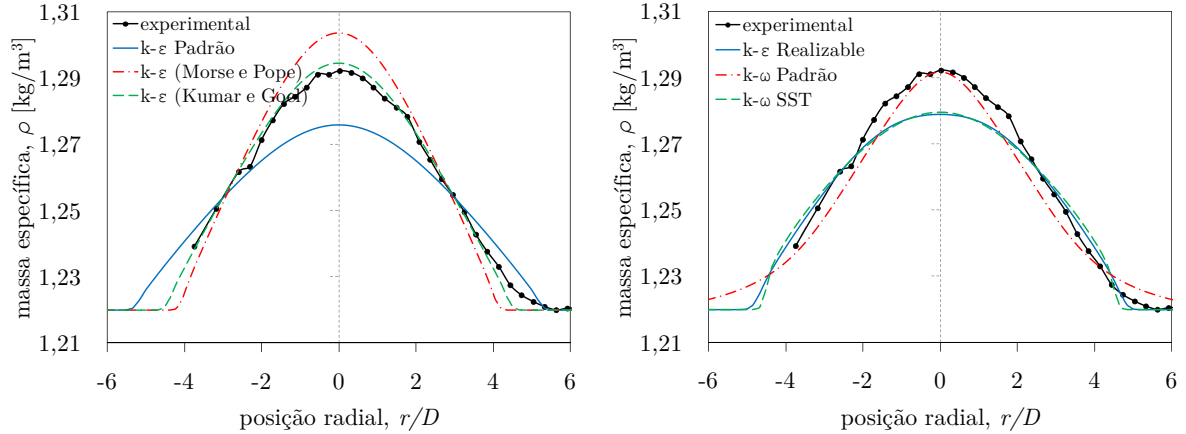


Figura 3.16 – Perfis radiais da massa específica média em $x/D = 50$

Através apenas dos perfis radiais é difícil identificar com clareza os modelos que foram mais fiéis na reprodução dos resultados experimentais. Sendo assim, seus respectivos coeficientes R-quadrado são apresentados nas Tabelas 3.6 a 3.9, para cada uma das propriedades, modelos e posições avaliadas. Nelas, são ressaltados os melhores valores de R-quadrado para cada posição, de forma a identificar o modelo que chegou à maior concordância entre resultados numéricos e experimentais.

Tabela 3.6 – Valores de R^2 para a velocidade média longitudinal nos perfis radiais

x/D	$k-\varepsilon$ Padrão	$k-\varepsilon$ Morse e Pope	$k-\varepsilon$ Kumar e Goel	$k-\varepsilon$ <i>Realizable</i>	$k-\omega$ Padrão	$k-\omega$ SST
4	0,9982	0,9876	0,9947	0,9915	0,9938	0,9935
15	0,8636	0,9767	0,9690	0,8950	0,9802	0,9087
30	0,7488	0,9567	0,9253	0,7511	0,9472	0,7942
50	0,6910	0,9474	0,9432	0,7733	0,9255	0,7517
média	0,8254	0,9671	0,9580	0,8527	0,9617	0,8620

Tabela 3.7 – Valores de R^2 para a velocidade média transversal nos perfis radiais

x/D	$k-\varepsilon$ Padrão	$k-\varepsilon$ Morse e Pope	$k-\varepsilon$ Kumar e Goel	$k-\varepsilon$ <i>Realizable</i>	$k-\omega$ Padrão	$k-\omega$ SST
4	0,7749	0,6566	0,7581	0,6757	0,7532	0,5885
15	0,5624	0,3860	0,5031	0,6510	0,4388	0,5993
30	0,2947	0,1524	0,2195	0,2794	0,2352	0,2957
50	0,1714	0,1400	0,1470	0,1430	0,1896	0,1757
média	0,4509	0,3337	0,4069	0,4372	0,4042	0,4148

Tabela 3.8 – Valores de R^2 para a fração mássica média de propano nos perfis radiais

x/D	$k-\varepsilon$ Padrão	$k-\varepsilon$ Morse e Pope	$k-\varepsilon$ Kumar e Goel	$k-\varepsilon$ <i>Realizable</i>	$k-\omega$ Padrão	$k-\omega$ SST
4	0,9520	0,9720	0,9677	0,9705	0,9716	0,9696
15	0,8601	0,8737	0,9612	0,9014	0,9415	0,9119
30	0,9124	0,8259	0,9449	0,9157	0,9463	0,9338
50	0,9556	0,6311	0,8344	0,9567	0,9401	0,9473
média	0,9200	0,8257	0,9271	0,9361	0,9499	0,9407

Tabela 3.9 – Valores de R^2 para a massa específica média nos perfis radiais

x/D	$k-\varepsilon$ Padrão	$k-\varepsilon$ Morse e Pope	$k-\varepsilon$ Kumar e Goel	$k-\varepsilon$ <i>Realizable</i>	$k-\omega$ Padrão	$k-\omega$ SST
15	0,6720	0,9948	0,9367	0,7513	0,9785	0,7805
30	0,8119	0,9784	0,9863	0,8245	0,9826	0,8702
50	0,8721	0,9272	0,9930	0,9330	0,9679	0,9277
média	0,7853	0,9668	0,9720	0,8363	0,9763	0,8595

Assim, somente na posição em $x/D = 4$ houve uma boa concordância de todos os modelos com os dados experimentais. Nas demais posições, de forma similar ao que foi observado para os perfis axiais, o melhor desempenho na reprodução dos resultados experimentais nos perfis radiais é devido aos modelos $k-\varepsilon$ Padrão ajustados e ao modelo $k-\omega$ Padrão. Uma exceção é observada nos resultados para a velocidade média transversal, propriedade para a qual, porém, todos os modelos obtiveram valores de R-quadrado relativamente baixos, variando de 0,1400 a 0,7740.

O comportamento geral dos resultados pode ser categorizado em duas classes. A primeira compreende o modelo $k-\varepsilon$ Padrão sem ajustes, o $k-\varepsilon$ *Realizable* e o $k-\omega$ SST, os quais obtiveram resultados de baixa qualidade, especialmente para a região central do jato, e para qualquer uma das quantidades medidas experimentalmente. De acordo com os perfis radiais, os melhores valores de R-quadrado para estes três modelos se resumem à distância mais próxima da saída do bico injetor de propano, em $x/D = 4$, posição na qual o escoamento está ainda fortemente condicionado às condições de contorno. À medida que avaliadas posições mais distantes, a qualidade de seus resultados diminui significativamente.

Por sua vez, os modelos $k-\varepsilon$ modificados e o modelo $k-\omega$ Padrão atingiram um nível superior de concordância com os resultados experimentais, de uma forma bastante distinta do primeiro grupo de modelos de fechamento. Seus valores de R-quadrado se mantiveram praticamente constantes e elevados para os valores médios da velocidade longitudinal e fração mássica de propano. O modelo $k-\omega$ Padrão se destaca por ter sido o único a manter valores de R-quadrado superiores a 0,9 para todos os perfis radiais, exceto para a velocidade média transversal, propriedade para a qual nenhum dos seis modelos se mostrou satisfatório.

Tendo consciência dos problemas presentes nos dados experimentais, sobretudo no que diz respeito à massa específica da mistura, foram conduzidas novas simulações numéricas sob

a luz das discrepâncias encontradas na literatura, o que é apresentado na seção seguinte.

3.3.3 Verificação das Condições de Contorno do Jato de Propano

Como notado nos perfis axiais para a massa específica média (Figura 3.8), há uma grande disparidade entre os valores numéricos e experimentais para a região próxima à saída do bico injetor, compreendida de $x/D = 0$ a 10, para todos os modelos avaliados. Nessa posição a massa específica da mistura deveria corresponder à massa específica do propano puro, ou seja, de $1,86 \text{ kg/m}^3$, mas o valor experimental reportado, igual a $2,06 \text{ kg/m}^3$, é significativamente maior do que o valor esperado para o referido fluido nas condições informadas de temperatura e pressão.

A origem dessa discrepância não é clara, mas algumas possíveis razões para tal podem ser: 1) a de que simplesmente houve um erro no cálculo da massa específica da mistura, lembrando que esta é obtida a partir da fração mássica de propano, ou 2) a de que a massa específica do fluido suprido pelo tubo do jato é realmente maior que a massa específica do propano, como se ele tivesse sido mal preparado, o que é pouco provável. Estas duas possibilidades são exploradas nesta seção, sendo que as condições do jato de propano para as referidas hipóteses são resumidas na Tabela 3.10.

Tabela 3.10 – Condições de contorno do jato de propano exploradas numericamente

Hipótese	$\bar{\rho}$ [kg/m ³]	$\tilde{u}_{méd}$ [m/s]	$\tilde{u}_{máx}$ [m/s]	Expoente n	Re	Vazão [g/s]
1	1,86	56,86	70	6,81	68,168	2,3
2	2,06	53,00		4,45		

No primeiro caso, a massa específica da mistura pode ser facilmente determinada a partir da fração mássica de propano, conforme a Equação 3.4. Se houve um erro na publicação dos seus valores experimentais, os resultados numéricos apresentados até então no presente trabalho são, portanto, ainda válidos, e somente a massa específica da mistura precisa ser reavaliada. Desta forma, ela foi recalculada assumindo agora a massa específica real do propano, sendo refeita a sua comparação com os modelos de turbulência. Os resultados para os perfis axiais são apresentados na Figura 3.17, na qual pode ser notado que neste cenário o modelo $k-\varepsilon$ Padrão ajustado de acordo com Kumar e Goel, 2010, mostra maior concordância com a massa específica média do que os demais modelos. Naturalmente, nos perfis radiais é notada a mesma diminuição nos seus valores experimentais, e os modelos que mostram melhor concordância são diferentes do que os de antes, como pode ser observado nos seus valores de R-quadrado, conforme a Tabela 3.11.

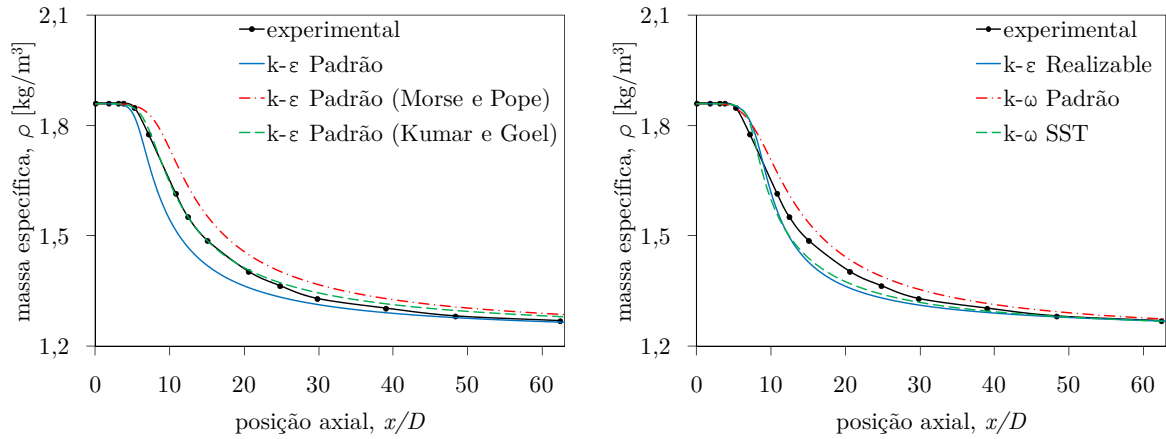


Figura 3.17 – Perfis axiais da massa específica média em $r/D = 0$ recalculada a partir da fração mássica média de propano

Tabela 3.11 – Valores de R^2 para a massa específica média recalculada a partir da fração mássica média de propano

Posição	$k-\varepsilon$ Padrão	$k-\varepsilon$ Morse e Pope	$k-\varepsilon$ Kumar e Goel	$k-\varepsilon$ <i>Realizable</i>	$k-\omega$ Padrão	$k-\omega$ SST
$r/D = 0$	0,9632	0,9654	0,9986	0,9845	0,9835	0,9874
$x/D = 15$	0,8484	0,8184	0,9621	0,8946	0,9213	0,9098
$x/D = 30$	0,9099	0,7934	0,9401	0,9125	0,9389	0,9332
$x/D = 50$	0,9560	0,5944	0,8213	0,9568	0,9360	0,9477
média	0,9194	0,7929	0,9305	0,9371	0,9449	0,9445

Nas avaliações anteriores deste trabalho, conforme a Seção 3.3.2, os melhores modelos na reprodução dos perfis radiais da massa específica média foram os modelos $k-\varepsilon$ modificados e o $k-\omega$ Padrão, para todas as posições. Agora, estes modelos atingiram as piores concordâncias com a massa específica média para a posição em $x/D = 50$, e o modelo $k-\varepsilon$ Padrão ajustado por Morse, 1977, e Pope, 1978, resultou no valor de R-quadrado mais baixo para todas as posições entre os modelos avaliados. Contudo, o modelo $k-\omega$ Padrão foi aquele que obteve a melhor média na Tabela 3.11.

A segunda hipótese, considerada a mais remota, é da que o fluido do jato central não era propano no experimento (tal massa específica seria equivalente a uma mistura, em base mássica, de 56,49% de propano e 43,51% de buteno). Assim, as simulações foram conduzidas novamente, assumindo agora que o fluido proveniente do jato central possui massa específica igual a $2,06 \text{ kg/m}^3$ e que sua velocidade média é igual a 53 m/s , conforme os dados experimentais. O seu perfil de distribuição de velocidades teve que ser reajustado, de forma a manter sua vazão em $2,3 \text{ g/s}$ e o número de Reynolds em $6,8 \cdot 10^4$, como informado na configuração experimental. Os perfis axiais para esta nova condição são apresentados nas Figuras 3.18 a 3.20.

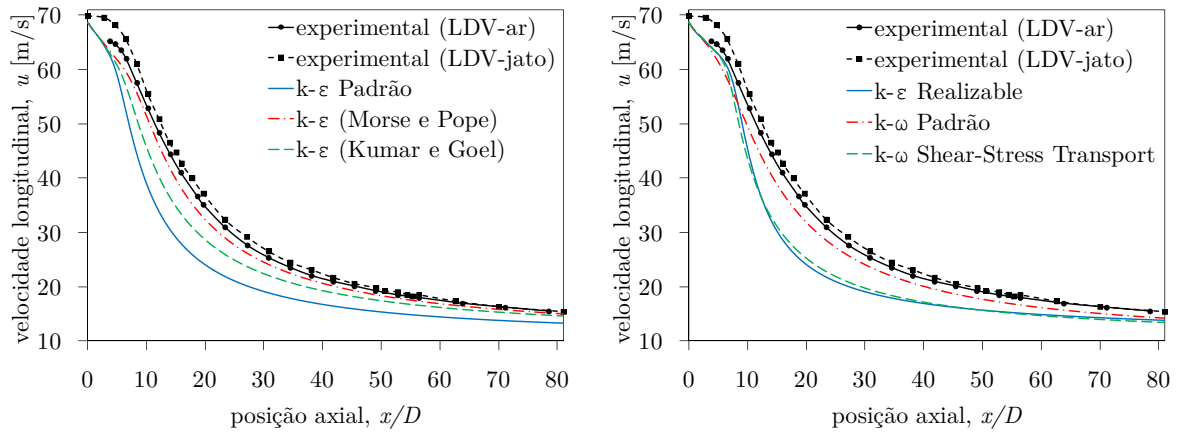


Figura 3.18 – Perfis axiais da velocidade média longitudinal em $r/D = 0$ com condições de contorno modificadas

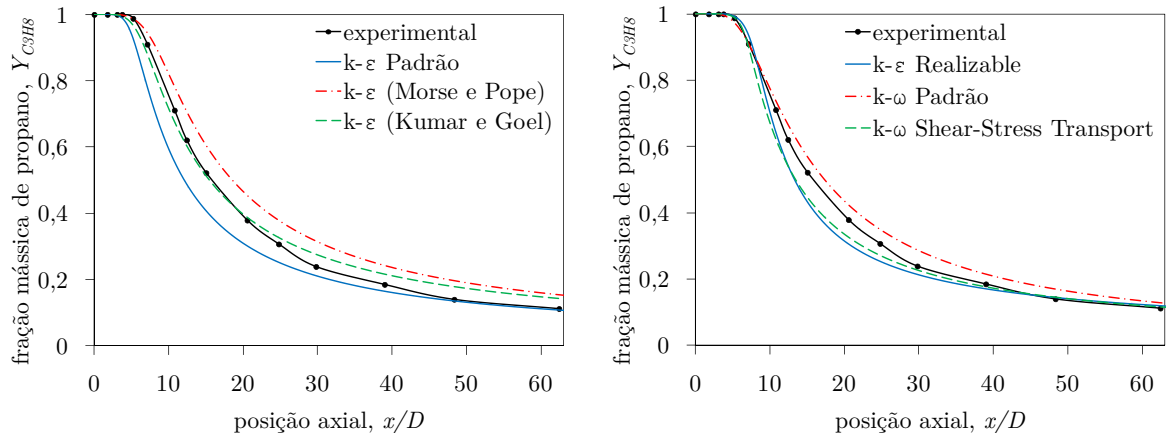


Figura 3.19 – Perfis axiais da fração mássica média de propano em $r/D = 0$ com condições de contorno modificadas

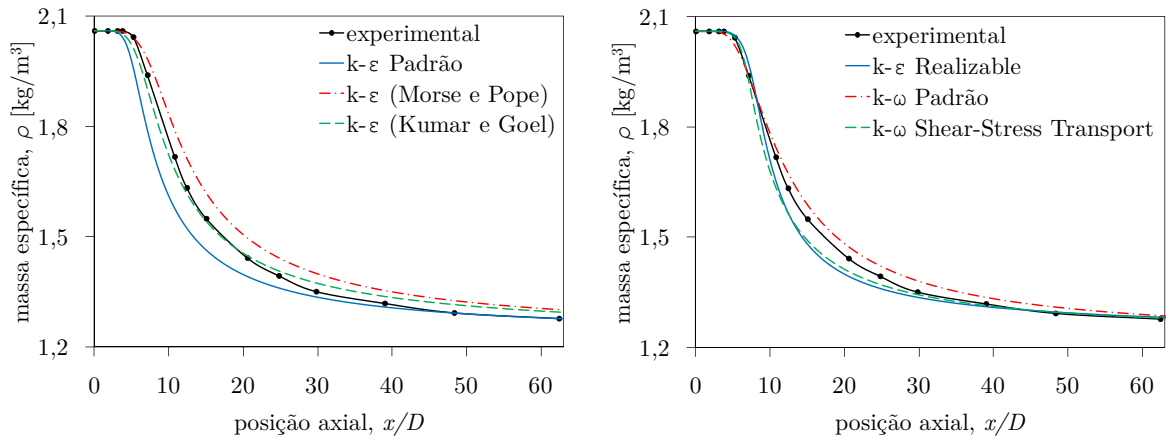


Figura 3.20 – Perfis axiais da massa específica média em $r/D = 0$ com condições de contorno modificadas

Como pode ser visto através destes perfis, foi mantido o comportamento geral dos valores previstos por cada modelo mesmo com a modificação das condições de contorno do jato de propano. Como esperado, a diferença mais notável nestes resultados em relação àqueles da Seção 3.3.2 está nos perfis para a massa específica da mistura, especialmente

próximo à saída do jato, eliminando o hiato entre os valores numéricos e experimentais nessa região. Os valores de R-quadrado para os perfis axiais nesta nova configuração são apresentados na Tabela 3.12.

Tabela 3.12 – Valores de R^2 nos perfis axiais com condições de contorno modificadas

ϕ_i	$k-\varepsilon$ Padrão	$k-\varepsilon$ Morse e Pope	$k-\varepsilon$ Kumar e Goel	$k-\varepsilon$ <i>Realizable</i>	$k-\omega$ Padrão	$k-\omega$ SST
\tilde{u}	0,7635	0,9902	0,9297	0,8501	0,9787	0,8580
\tilde{Y}_{C3HS}	0,9519	0,9746	0,9954	0,9838	0,9927	0,9863
\bar{p}	0,9502	0,9805	0,9962	0,9875	0,9949	0,9884
média*	0,8577	0,9824	0,9625	0,9170	0,9857	0,9222

* A média não inclui os resultados da massa específica, devido às discrepâncias na entrada do jato.

O mesmo comportamento foi observado nos perfis radiais, com pouca variação na classificação entre os modelos quanto à concordância com os valores experimentais. Por exemplo, na Figura 3.21 são mostrados os perfis radiais para a velocidade média longitudinal em $x/D = 15$ com as condições de contorno modificadas.

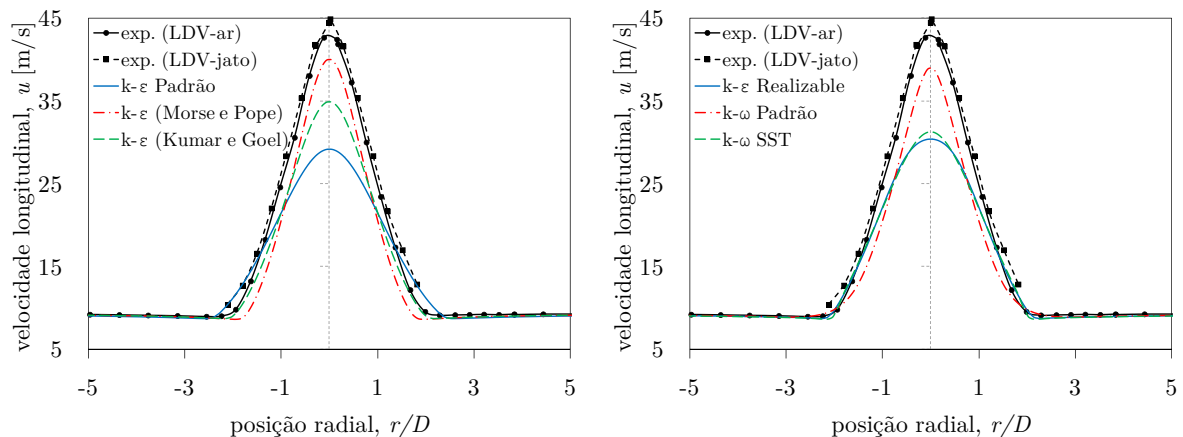


Figura 3.21 – Perfis radiais da velocidade média longitudinal em $x/D = 15$ com condições de contorno modificadas

E, por razões de simplicidade, são apresentados apenas os valores médios dos valores de R-quadrado nos perfis radiais, conforme a Tabela 3.13, na qual pode ser observado que apesar de algumas diferenças, os modelos $k-\varepsilon$ modificados e o modelo $k-\omega$ Padrão ainda assim se mostraram mais eficazes que os demais modelos, exceto, novamente, para a velocidade média transversal, comprovando que as deficiências presentes nos dados experimentais não comprometem o estudo aqui proposto. Ademais, na literatura não foi encontrado nenhum trabalho que citasse de forma explícita essa inconsistência presente no experimento ou que fizesse uma comparação sistemática de várias propriedades e empregando um parâmetro numérico na quantificação da eficácia dos modelos de turbulência, neste caso, o coeficiente de determinação R-quadrado.

Tabela 3.13 – Valores médios de R^2 nos perfis radiais com condições de contorno modificadas

ϕ_i	$k-\varepsilon$ Padrão	$k-\varepsilon$ Morse e Pope	$k-\varepsilon$ Kumar e Goel	$k-\varepsilon$ <i>Realizable</i>	$k-\omega$ Padrão	$k-\omega$ SST
\tilde{u}	0,7655	0,9480	0,9159	0,8079	0,9236	0,8122
\tilde{v}	0,4279	0,3388	0,4006	0,4207	0,4131	0,3920
$\tilde{Y}_{C_3H_8}$	0,9169	0,8036	0,9041	0,9326	0,9499	0,9332
$\bar{\rho}$	0,9033	0,6945	0,8735	0,9174	0,9360	0,9213
média*	0,7034	0,6968	0,7402	0,7204	0,7622	0,7125

* A média não inclui os resultados da massa específica, devido às discrepâncias na entrada do jato.

3.4 Conclusões do Capítulo

Neste capítulo foi avaliado o desempenho de distintos modelos de turbulência RANS na solução numérica de um escoamento real, com resultados disponíveis na literatura. Estes modelos foram o $k-\varepsilon$ Padrão, o $k-\varepsilon$ *Realizable*, o $k-\omega$ Padrão e o $k-\omega$ *Shear-Stress Transport*, todos eles baseados em duas equações de transporte diferenciais parciais, uma para a energia cinética turbulenta, k , e a outra para sua taxa de dissipação, ε , ou sua taxa de dissipação específica, ω . Ademais, para o modelo $k-\varepsilon$ Padrão foram empregadas duas propostas para modificação de suas constantes, além da utilização de seus valores originais, totalizando, assim, seis abordagens diferentes.

Os modelos foram comparados quanto a sua eficácia na predição dos valores médios de quatro propriedades importantes de um jato livre de massa específica variável, não reativo e isotérmico, circundado por um escoamento coaxial de ar. As propriedades avaliadas foram as velocidades médias longitudinal e transversal, a fração mássica média de propano e a massa específica média da mistura.

Igualmente ao que foi observado por Morgans et al., 1999, que estudaram este mesmo caso, os modelos $k-\omega$ Padrão e o $k-\varepsilon$ Padrão ajustado de acordo com Morse, 1977, e Pope, 1978, foram ambos satisfatórios, e melhores que o $k-\varepsilon$ Padrão sem modificações.

De uma forma geral, as modificações disponíveis na literatura para o modelo $k-\varepsilon$ Padrão e aqui testadas se mostraram muito efetivas, melhorando de forma significativa a qualidade dos resultados em relação àqueles obtidos com o modelo sem ajustes. Ambas modificações foram bem sucedidas, e juntamente com o modelo $k-\omega$ Padrão, podem ser consideradas as melhores escolhas disponíveis entre os modelos avaliados para a solução do caso em questão.

Com este estudo houve a reafirmação das dificuldades matemáticas presentes na modelagem de escoamentos turbulentos e as particularidades presentes nos modelos de fechamento baseados na abordagem RANS. As soluções se mostraram muito sensíveis à escolha dos modelos e, em relação ao modelo $k-\varepsilon$ Padrão, aos valores de suas constantes. Como assinalado por Pope, 1978, no que ele denominou “*round-jet plane-jet anomaly*” no

modelo $k-\varepsilon$ Padrão, melhores resultados para o escoamento de um jato livre podem ser obtidos com a modificação de suas constantes que controlam a geração/destruição da taxa de dissipação da energia cinética turbulenta, confirmando a não universalidade dos coeficientes de fechamento RANS. Estas modificações nos modelos mostram que eles não são inequívocos e precisam ser ajustados de acordo com as diferentes classes de escoamento, devido a sua dependência com dados experimentais, o que é consistente com o fato de o fenômeno da turbulência não ser universal e fortemente dependente das condições de contorno iniciais.

Por fim, no presente estudo foi identificada uma discrepância relevante nos dados experimentais quanto às condições de saída do jato de propano, mas que, conforme verificado, não compromete a comparação dos modelos aqui realizada e não muda as conclusões obtidas.

4 COMPARAÇÃO DOS MODELOS SLDF E FGM

O sucesso da aplicação do conceito de *flamelets* na solução numérica da combustão fez com que essa metodologia se tornasse bastante popular entre os pesquisadores na área da combustão, o que, juntamente a desenvolvimentos subsequentes, fez com que surgisse uma série de variações nos modelos numéricos. Sendo assim, esta seção é então dedicada à comparação de dois deles, o *Steady Laminar Diffusion Flamelet* (SLDF) e o *Flamelet-Generated Manifold* (FGM), na solução de uma chama turbulenta não pré-misturada de metano enriquecido com hidrogênio e diluído com nitrogênio, circundada por um escoamento coaxial de ar de baixa velocidade.

O caso sob investigação é denominado *Chama DLR-A*, em função do laboratório que conduziu o experimento, o *DLR Institute of Combustion Technology* de Stuttgart [Bergmann, 1998]. Desde que disponibilizados seus resultados, esta chama foi amplamente explorada, servindo como referência para diversos estudos numéricos, já tratados na Seção 1.2.2.1. Contudo, nenhum deles empregou o modelo FGM ou realizou uma comparação entre modelos de combustão baseados no conceito de *flamelets*.

Além da comparação entre os modelos na solução do referido caso, é também avaliada a contribuição da radiação térmica, através do WSGGM e do DTRM, na solução do campo espectral e espacial, respectivamente. Ademais, alguns dos resultados de outros trabalhos também são utilizados para efeito de comparação.

A descrição completa do caso é feita na Seção 4.1. Na Seção 4.2 são apresentadas as abordagens numéricas, as equações governantes e as principais considerações adotadas para resolver numericamente o problema descrito. Nas Seções 4.3 e 4.4 são apresentados e discutidos os resultados obtidos. As conclusões são apresentadas na Seção 4.5.

4.1 Caracterização do Problema

No terceiro *International Workshop on Measurement and Computation of Turbulent Nonpremixed Flames*, realizado em 1998, um dos casos escolhidos como alvo do evento foi uma chama não pré-misturada de metano (CH_4), hidrogênio (H_2) e nitrogênio (N_2), circundada por um escoamento coaxial de ar de baixa velocidade [TNF Workshop, 1998], proposta pelo *DLR Institute of Combustion Technology*, de Stuttgart [Bergmann, 1998], sendo posteriormente também conduzida experimentalmente por outros dois laboratórios, o *Sandia National Laboratory* [Meier et al., 2000], de Livermore, e a *Technische Universität*, de Darmstadt [Schneider et al., 2003]. Para cada um destes laboratórios devem ser observadas algumas particularidades na condução dos experimentos e nas técnicas utilizadas nas medições, que serão discutidas à medida que for conveniente.

O combustível, uma mistura, em volume, com 22,1% de CH_4 , 33,2% de H_2 e 44,7% de N_2 , foi suprido por um tubo vertical de aço inoxidável com diâmetro interno, D , de 8 mm,

com uma borda afinada em sua extremidade, e 350 mm de seção reta até sua saída, a uma velocidade média de 42,15 m/s, correspondendo a um número de Reynolds igual a 15.200, baseado no diâmetro do tubo. Sua fração de mistura estequiométrica, Z_{st} , era igual a 0,167 e a temperatura adiabática de chama, T_{ad} , igual a 2.130 K.

Nos experimentos, o H_2 foi escolhido como aditivo de forma a estabilizar e garantir o ancoramento da chama à saída do tubo que supre o combustível, uma vez que chamas de metano a elevados números de Reynolds tendem ao descolamento ou até à extinção. Contudo, a inclusão de H_2 à corrente do combustível fez com que a difusão preferencial fosse um aspecto relevante na região próxima à base da chama, devido à disparidade do número de Lewis do H_2 em relação às demais espécies normalmente encontradas em uma chama de metano [Poinso e Veynante, 2005, p. 15]. Este ponto se fez claro pelo estudo de Pitsch, 2000, para esta mesma chama, que no seu modelo considerou o cálculo do número de Lewis para as espécies ora sendo unitário ora não, sendo observadas diferenças significativas nos resultados entre as duas abordagens, mostrando que este não é um caso simples de combustão de metano.

A diluição com N_2 , por sua vez, foi necessária para que fosse diminuída a radiação térmica da chama, através da redução do sinal de fundo induzido pelos radicais de hidrocarbonetos aromáticos policíclicos (PAHs - *Polycyclic Aromatic Hydrocarbons*) e de radicais de carbono diatômico (C_2), de forma a melhorar a qualidade do sinal na técnica de dispersão de Rayleigh utilizada, o que conferiu uma tonalidade azulada à chama.

A corrente de ar, por sua vez, foi fornecida por um escoamento forçado, com velocidade de 0,3 m/s, contendo 0,8% de vapor de água em volume. No caso do *DLR Institute of Combustion Technology* e da *Technische Universität* de Darmstadt, o seu bocal de descarga era circular, com um diâmetro interno de 140 mm. Já no caso do *Sandia National Laboratory*, o seu bocal de saída era quadrado, com 300 mm de largura, igual ao descrito na seção anterior para o caso do jato de propano. Apesar desta diferença nas condições experimentais para a corrente de ar, sua contribuição é de pouca relevância, uma vez que era muito baixa a velocidade do escoamento coaxial de ar, sendo o oxidante consumido pela chama provido majoritariamente pelo ar ambiente.

Ambas as correntes, de combustível e de oxidante, e o ambiente foram mantidos à temperatura de 292 K. A pressão ambiente reportada, por sua vez, era de 95,3 kPa no *DLR Institute of Combustion Technology* e de 99,0 kPa no *Sandia National Laboratory*. Esta informação não está disponível para a *Technische Universität*. Esta diferença na condição ambiente (3,7 kPa ou 4%) muda pouco as propriedades dos fluidos utilizados, a exemplo de sua massa específica e viscosidade, contudo, a influência desta diferença nos resultados não é clara. É esperado que tal contribuição seja pequena, uma vez que foi muito boa a concordância entres os resultados dos diferentes laboratórios [Meier et al., 2000, p. 334].

A Figura 4.1 ilustra a configuração da chama sob investigação, ao lado de sua imagem fotografada.

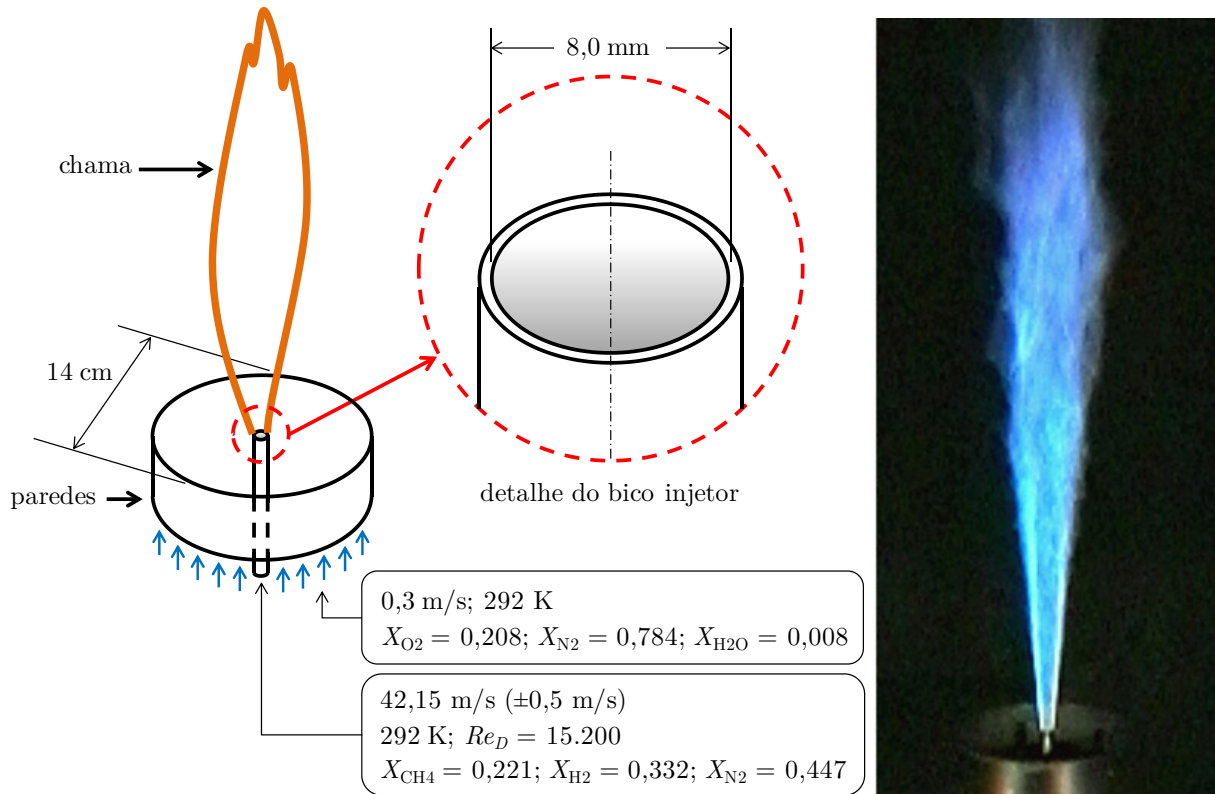


Figura 4.1 – Configuração experimental e fotografia da chama DLR-A

Os resultados experimentais, disponíveis de forma digitalizada, compreendem uma quantidade vasta de propriedades, na forma de perfis axiais, na linha de simetria do problema, e radiais, medidos a partir da saída do bico injetor, em $x/D = 5, 10, 20, 40, 60$ e 80 .

As medições de velocidade foram conduzidas pela *Technische Universität* de Darmstadt, através da técnica LDV, fornecendo os valores médios para as velocidades longitudinal e transversal, assim como para as correlações para as suas flutuações, ou seja, as componentes $u''u''$ e $u''v''$. O erro estatístico reportado está abaixo de 5% para as velocidades médias e abaixo de 10% para as correlações das flutuações de velocidade.

As medições de temperatura, realizadas pelo *Sandia National Laboratory*, foram obtidas através da técnica de dispersão de Rayleigh, para a qual os autores estimam uma incerteza da ordem de 3%.

Também do *Sandia National Laboratory* são as medições para as frações mássicas de nove espécies químicas ($CH_4, N_2, O_2, CO_2, H_2O, H_2, OH, NO$ e CO), obtidas através da técnica de dispersão de Raman, com exceção do monóxido de carbono (CO), que foi obtido através da técnica de fluorescência induzida a laser (LIF - *Laser-Induced Fluorescence*) bifotônica. A partir destas espécies é possível calcular a fração de mistura local, de acordo com a definição de Bilger, 1988, conforme a Equação 2.90. A ordem das incertezas estimadas para as frações mássicas das espécies é variada, conforme a Tabela 4.1.

Tabela 4.1 – Incertezas estimadas para as frações mássicas das espécies

Espécie	Incerteza estimada (%)
N ₂	3
H ₂ O e CO ₂	4
H ₂	6 a 12
OH	10
NO	10 a 15
CO	10 a 20

Fonte: adaptada de Meier et al., 2000, p. 329

A escolha dos autores pela técnica LIF na detecção do CO se deveu à maior confiabilidade por ela fornecida em relação à de dispersão de Raman para esta espécie em particular. Esta técnica, que suprime as divergências induzidas pelo procedimento de filtragem na dispersão de Rayleigh, demonstrou que as concentrações de CO na chama eram significativamente superiores às anteriormente obtidas pelo *DLR Institute of Combustion Technology*. Sendo assim, somente as medições LIF são utilizadas na comparação com os resultados numéricos.

Neste estudo foram adotadas as configurações geométricas e condições experimentais originais, ou seja, de acordo com aquelas reportadas pelo *DLR Institute of Combustion Technology*. Apesar das diferenças existentes nas condições experimentais entre os laboratórios que conduziram o caso, pode-se assumir que elas não prejudicam de forma significativa a utilização dos resultados. Ademais, os desvios nos resultados experimentais divulgados pelos diferentes laboratórios são menores que as incertezas estimadas para as técnicas de medição [Meier et al., 2000, p. 331].

4.2 Modelagem Numérica

Esta seção é dedicada a apresentar as abordagens empregadas na simulação do caso descrito, assim como os modelos adotados e suas respectivas equações governantes.

4.2.1 Equações Governantes e Criação das Tabelas Termoquímicas

O problema foi resolvido numericamente empregando as equações RANS na condição de regime estacionário. A parte não reativa do escoamento foi resolvida através da equação para conservação de massa total (Equação 2.33) e de quantidade de movimento (Equação 2.35).

Para o tratamento da turbulência foi escolhido o modelo $k-\varepsilon$ Padrão com a modificação da constante $C_{\varepsilon 1}$ de 1,44 para 1,60, de acordo com proposta de Morse, 1977, e Pope, 1978, que se mostrou eficaz na solução do jato de propano não reativo apresentado na

seção anterior. Apesar de os modelos $k-\varepsilon$ Padrão ajustado de acordo com proposta de Kumar e Goel, 2010, e o $k-\omega$ Padrão também terem se mostrado bons, a modificação de Morse, 1977, e Pope, 1978, é significativamente mais popular, tendo inclusive já sido empregada na solução da chama aqui investigada [Pitsch, 2000; Emami e Fard, 2012; Ziani et al., 2013]. Sendo assim, o fechamento da turbulência exige a solução das Equações 2.41 e 2.42, para a energia cinética turbulenta e sua taxa de dissipação, respectivamente.

Por sua vez, a solução da parte reativa do escoamento nos modelos de combustão empregados, SLDF e FGM, consiste de duas etapas, uma de pré-processamento e outra de processamento. Na etapa de pré-processamento devem ser realizados os passos seguintes:

- i. Cálculo de número significativo de *flamelets*, de acordo com o conjunto de Equações 2.86 a 2.108, compreendendo desde a condição próxima do equilíbrio químico, no limite em $\chi_{st} \rightarrow 0$, a até a extinção da chama. As taxas de produção/destruição de massa devem ser resolvidas de acordo com algum mecanismo para a cinética química e com auxílio de algum código numérico especializado.

Para o caso sob investigação, o primeiro passo consistiu na solução de *flamelets* na configuração de chama do tipo contracorrentes e com as condições de contorno (frações mássicas das espécies, temperatura e pressão) para o combustível e o oxidante definidos de acordo com a chama avaliada. Neste estudo foi utilizado o mecanismo de cinética química GRI-Mech 3.0 [Smith et al., 1999], que consiste de 325 reações químicas elementares e contém 53 espécies participantes, acoplado às sub-rotinas do ChemKin, versão 4.0 [Kee et al., 2004], (que está incorporado ao código CFD empregado) para a solução das equações de transporte, e com base na tabela de polinômios da NASA [McBride et al., 1993] para o cálculo das propriedades termofísicas das espécies químicas.

A taxa de dissipação do escalar estequiométrica partiu de 10^{-5} s^{-1} , tendo a chama atingido sua extinção em 253 s^{-1} . Como exemplo, a Figura 4.2 apresenta os resultados de temperatura em função da fração de mistura para alguns dos valores selecionados da taxa de dissipação do escalar estequiométrica.

À medida que aumentada a taxa de dissipação do escalar ocorre uma diminuição da temperatura das soluções e um deslocamento de seu pico para maiores valores da fração de mistura, inicialmente localizado na condição estequiométrica. Para os valores mais elevados da taxa de dissipação do escalar ocorre um alargamento da zona de reação, com o aumento da condução de calor dessa região para os dois lados, até a um ponto em que a produção de calor devida às reações não seja mais suficiente para balancear esta condução de calor e a chama seja completamente extinta [Peters, 1984, p. 324].

Se fosse utilizado algum modelo para dar conta também da parte transiente na solução dos *flamelets*, maiores taxas de dissipação do escalar poderiam ser atingidas, ampliando a região coberta pelas soluções, estendendo para baixo os perfis de temperatura na Figura 4.2. A importância de tais efeitos dependentes do tempo nos modelos baseados no conceito de *flamelets* tem sido demonstrada em diversos trabalhos, sendo o de Haworth et al.,

1988, um dos pioneiros, propondo uma modificação *ad hoc* no modelo tradicional baseado no conceito de *flamelets* a fim de dar conta de tais fenômenos. Desde então, diversas formulações têm sido propostas [Pitsch et al., 1996; Barths et al., 1998a; Barths et al., 1998b; Pitsch et al., 1998; Coelho e Peters, 2001], contudo, o presente trabalho se limitou aos modelos baseados em soluções estacionárias, não avançando, portanto, nessas outras abordagens transientes.

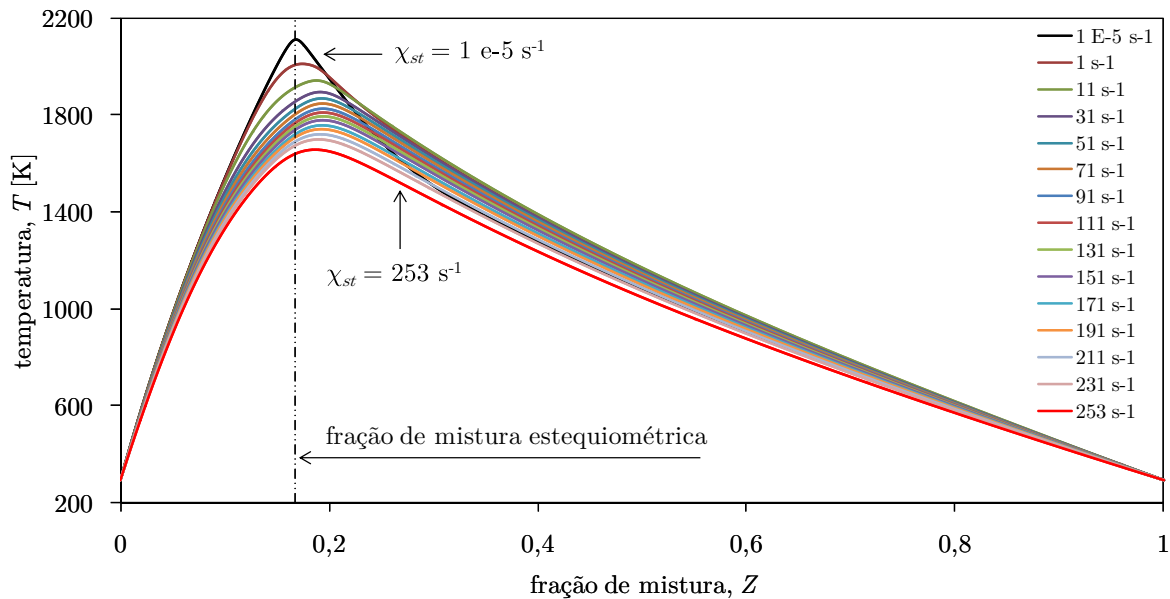


Figura 4.2 – Resultados de T em função de Z para alguns valores selecionados de χ_{st}

- ii. Construção da tabela termoquímica com as soluções laminares, parametrizada em função das variáveis de controle de cada modelo.

No caso do modelo SLDF as soluções laminares obtidas previamente foram armazenadas da forma tal como geradas, ou seja, parametrizadas em função de Z e χ_{st} . No caso do FGM, contudo, houve ainda uma etapa de conversão das espécies químicas resultantes para a composição da variável de progresso da reação, ficando as soluções parametrizadas em função de Z e c . Sendo assim, em ambos os modelos as soluções laminares são armazenadas em tabelas termoquímicas de duas dimensões.

- iii. Integração dos valores médios para a temperatura, a massa específica da mistura e as frações mássicas das espécies, de acordo com a Equação 2.103 ou a 2.111 (dependendo de cada modelo), para uma quantidade e um intervalo significativos das propriedades utilizadas para compor as funções de densidade de probabilidade, conforme as Equações 2.92 a 2.95.

As variáveis de integração utilizadas nas PDFs são os valores médios da fração de mistura (em ambos os modelos), da taxa de dissipação do escalar estequiométrica (somente no SLDF), da variável de progresso da reação (somente no FGM) e da entalpia (somente nos

casos não adiabáticos), e as variâncias da fração de mistura e da variável de progresso da reação (somente no FGM). Os valores médios da fração de mistura e da variável de progresso da reação são espontaneamente limitados de 0 a 1 (esta última devido à normalização através dos valores de equilíbrio químico, conforme a Equação 2.109), e, a partir disso, as suas variâncias acabam por ficar matematicamente limitadas ao intervalo de 0 a 0,25. Os valores médios utilizados para a taxa de dissipação do escalar estequiométrica são os mesmos utilizados na solução laminar. E para os casos não adiabáticos, é empregada uma faixa de ganho/perda da entalpia média, $\Delta\tilde{h}$, esperada na solução do escoamento.

- iv. Construção da tabela termoquímica com a incorporação da turbulência, parametrizada em função da fração de mistura média, de sua variância, da entalpia total do sistema (para os casos não adiabáticos) e da taxa de dissipação do escalar estequiométrica (no SLDF) ou a variável de progresso da reação (no FGM).

Neste passo foram criadas tabelas termoquímicas com diversos níveis de refinamento para cada um dos modelos, de acordo com a Tabela 4.2, com a quantidade de pontos nelas utilizados para compor cada variável de controle. Ademais, em todas elas foi empregado um refinamento nas regiões nas quais são esperados os maiores gradientes das propriedades armazenadas, ou seja, em \tilde{Z} concentrado em torno da estequiometria, em \tilde{c} concentrado mais próximo de 1, e em $\widetilde{Z''^2}$ e $\widetilde{c''^2}$ mais próximo de 0.

Tabela 4.2 – Quantidade de pontos para cada variável de controle nas tabelas termoquímicas para armazenamento dos escalares reativos

Modelo	Tabela	\tilde{Z}	$\widetilde{Z''^2}$	\tilde{c}	$\widetilde{c''^2}$	$\widetilde{\chi_{st}}$
SLDF	a	86	34	---	---	88
	A	86	34	---	---	130
	B	105	45	---	---	130
	C	126	52	---	---	130
	D	160	61	---	---	130
FGM	A	59	23	59	23	---
	B	71	28	71	28	---
	C	86	34	86	34	---

Nestas tabelas termoquímicas não foram armazenadas todas as espécies do mecanismo de cinética química utilizado. O tamanho destas tabelas finais tem grande influência sobre fatores práticos nas simulações, uma vez que tabelas muito grandes podem sobrecarregar a memória disponível do computador na sua leitura ou na execução dos cálculos. Galpin, 2007, mostrou que das 53 espécies presentes no mecanismo GRI-Mech 3.0, apenas sete (CH_4 , CO , CO_2 , H_2 , H_2O , N_2 e O_2 ,) são necessárias para contabilizar mais de 99,5% da massa e energia total da mistura. Portanto, o uso de informações para apenas estas sete espécies já proporcionaria uma descrição praticamente completa das propriedades da chama. No entanto,

a fim de incluir todas as espécies presentes nos dados experimentais do caso sob investigação, além destas já mencionadas, outras sete espécies foram também adicionadas às tabelas termoquímicas finais (C_2H_2 , C_2H_4 , CH_3 , H , NO , O e OH), compreendendo, assim, as 14 espécies com as maiores frações mássicas na solução deste escoamento.

Quando incluída a radiação térmica na modelagem do problema, mais uma dimensão foi incorporada às tabelas termoquímicas, a da entalpia média da mistura, sendo que neste estudo foram utilizados 35 pontos na sua discretização.

Estas etapas são realizadas previamente à solução das equações de transporte próprias do escoamento. Dessa forma se evita fazer com que a solução seja parada constantemente para realizar o cálculo das propriedades.

Já na etapa de processamento, na solução do escoamento propriamente dito, devem ser resolvidas as equações que serão utilizadas para recuperar os valores locais das variáveis dependentes armazenadas na tabela termoquímica, ou seja, as Equações 2.104, 2.105, 2.107 e 2.108 para o SLDF, e as Equações 2.105, 2.107, 2.108, 2.112 e 2.113 para o FGM.

Todas as simulações foram realizadas empregando o código numérico comercial ANSYS Fluent, versão 15.0.0, adotando discretizações espaciais com o esquema *upwind* de segunda ordem e o esquema SIMPLE para o acoplamento entre o campo de pressão e o de velocidades. Os critérios de convergência de todas as equações foram estabelecidos para resíduos inferiores a 10^{-8} no modelo SLDF e inferiores a 10^{-6} no modelo FGM, os níveis máximos de convergência obtidos com cada modelo. Para a equação de transferência radiativa, contudo, foram adotados resíduos inferiores a 10^{-4} em ambos os modelos.

4.2.2 Domínio Geométrico e Condições de Contorno

O problema foi reduzido a uma geometria bidimensional e de simetria radial, conforme mostrado na Figura 4.3.

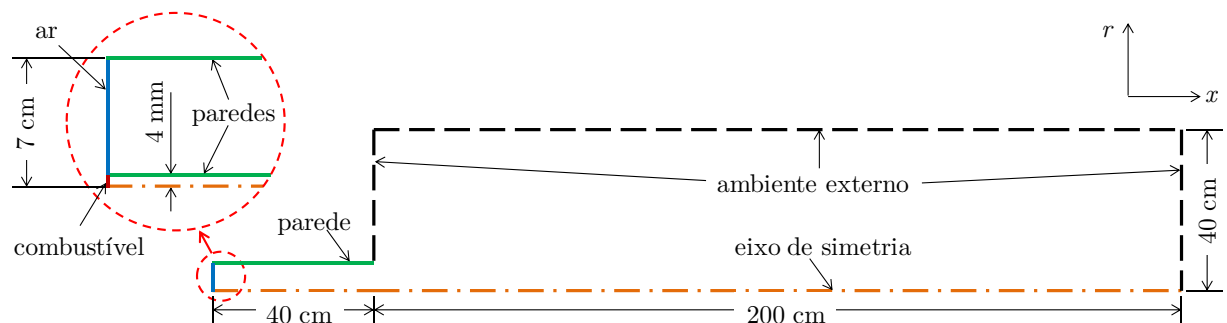


Figura 4.3 – Domínio geométrico numérico empregado

Antes de se encontrarem na saída do bico injetor, as correntes de combustível e oxidante percorrem um comprimento de 40 cm de seção reta dos dutos que os alimentam. O comprimento de 40 cm do duto de combustível a montante de sua saída, que corresponde a

uma razão entre comprimento e diâmetro do tubo igual a 50, garante que o escoamento no seu interior seja plenamente desenvolvido, tendo em conta o seu número de Reynolds [Schlichting, 1968, p. 560]. A jusante da saída do bico injetor, o domínio geométrico do problema é ainda composto por 200 cm longitudinalmente e 40 cm radialmente.

Para verificar se era suficiente o tamanho do domínio geométrico adotado, em avaliação preliminar foi obtido o campo de distribuição da temperatura, como mostrado na Figura 4.4, na qual pode ser observado que a chama está completamente contida dentro do domínio.

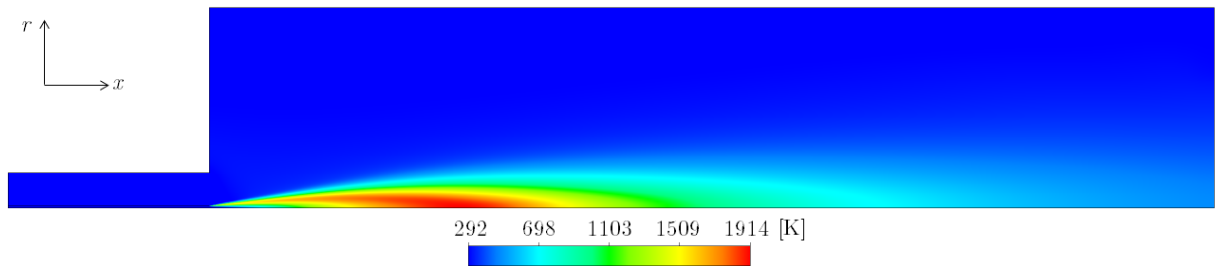


Figura 4.4 – Campo de distribuição da temperatura média em avaliação preliminar

Às fronteiras foram atribuídas condições de contorno usuais, de acordo com as informações apresentadas na Seção 4.1, ou seja, de não deslizamento e impermeabilidade nas paredes; de velocidade prescrita nas entradas do combustível e do oxidante; de pressão ambiente nas fronteiras livres do entorno; a velocidade transversal foi assumida nula na linha de simetria e nas fronteiras abertas para o ambiente; e na linha de simetria foram impostos gradientes nulos para todas as propriedades. Estas condições são resumidas na Tabela 4.3.

Tabela 4.3 – Condições de contorno empregadas

Fronteira	Condições de contorno
ambiente externo	$\tilde{p} = 99 \text{ kPa}; \tilde{v} = 0$
eixo de simetria	$\tilde{v} = 0$; derivadas nulas para todas as variáveis
entrada do combustível	$\tilde{u} = 42,15 \text{ m/s}; \tilde{Z} = 1; \tilde{v} = \tilde{Z}''^2 = \tilde{c} = \tilde{c}''^2 = 0$
entrada do oxidante	$\tilde{u} = 0,3 \text{ m/s}; \tilde{v} = \tilde{Z} = \tilde{Z}''^2 = \tilde{c} = \tilde{c}''^2 = 0$
paredes	$\tilde{u} = \tilde{v} = 0$; fluxos nulos através da fronteira

Observação: As variáveis de progresso da reação, \tilde{c} e \tilde{c}''^2 , são utilizadas apenas no modelo FGM.

As condições da turbulência nas fronteiras de entrada do combustível e do oxidante foram parametrizadas através de seus diâmetros hidráulicos e intensidades da turbulência, I , de 0,4% para a corrente de ar, e de 4,8% para o jato do combustível. \tilde{k} e $\tilde{\omega}$ foram determinados a partir das mesmas correlações apresentadas na Seção 3.2.2 para o jato isotérmico e não reativo de propano.

No caso do modelo FGM é resolvido primeiramente o escoamento a frio. A partir do campo resultante da fração de mistura média é dada então a condição inicial para ignição,

prescrevendo $\tilde{c} = 1$ para valores de \tilde{Z} próximos da estequiometria.

Nas simulações não adiabáticas, ou seja, aquelas com a inclusão da modelagem da radiação térmica, a discretização do ângulo sólido consistiu de 2.244 raios, tendo os fluxos radiativos computados através do DTRM, em conjunto com o WSGGM para a solução espectral de emissão/absorção dos gases. No caso investigado no presente estudo, as paredes (dos dutos do combustível e do ar) são de pouca contribuição para a radiação térmica, o que levou a elas serem assumidas como superfícies negras, com um coeficiente de difusividade interna igual a 1, assim como para as fronteiras do entorno aberto para o ambiente.

4.2.3 Estudo de Refinamento da Malha e das Tabelas Termoquímicas

Para cada modelo avaliado quatro malhas diferentes foram adotadas. As malhas, bidimensionais e axissimétricas, foram compostas de elementos retangulares e de tamanho não uniforme, com refinamento concentrado na região de saída do tubo de combustível. Na avaliação da independência dos resultados em função do nível de refinamento das malhas não foi incluída a modelagem da radiação térmica nas simulações.

No caso do modelo SLDF foi empregado um processo de refinamento automático das malhas (AMR - *Adaptive Mesh Refinement*), baseado nos gradientes do campo de fração de mistura média da solução, que em avaliações preliminares foi observado ser a propriedade para qual o refinamento da malha mais contribuiu. O AMR já está implementado no código CFD empregado. Neste procedimento, a malha, que parte de um tamanho inicial, tem os seus volumes de controle divididos em outros quatro a cada adaptação, seguindo a regra das subdivisões 4^n (conforme a Figura 4.5), naqueles onde são identificados os maiores gradientes da propriedade escolhida, aprimorando a resolução da solução nestas regiões.

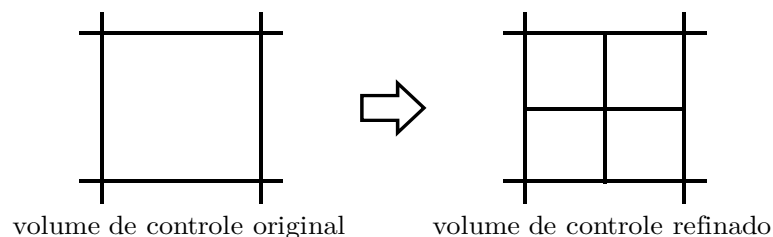


Figura 4.5 – Divisão dos volumes de controle no refinamento automático da malha

O benefício oferecido pelo AMR é um menor ônus computacional do que seria necessário se a malha fosse refinada por completo. A Figura 4.6 exemplifica isso mostrando o campo da fração de mistura média sobreposto pela malha na região próxima à saída do bico injetor do combustível.

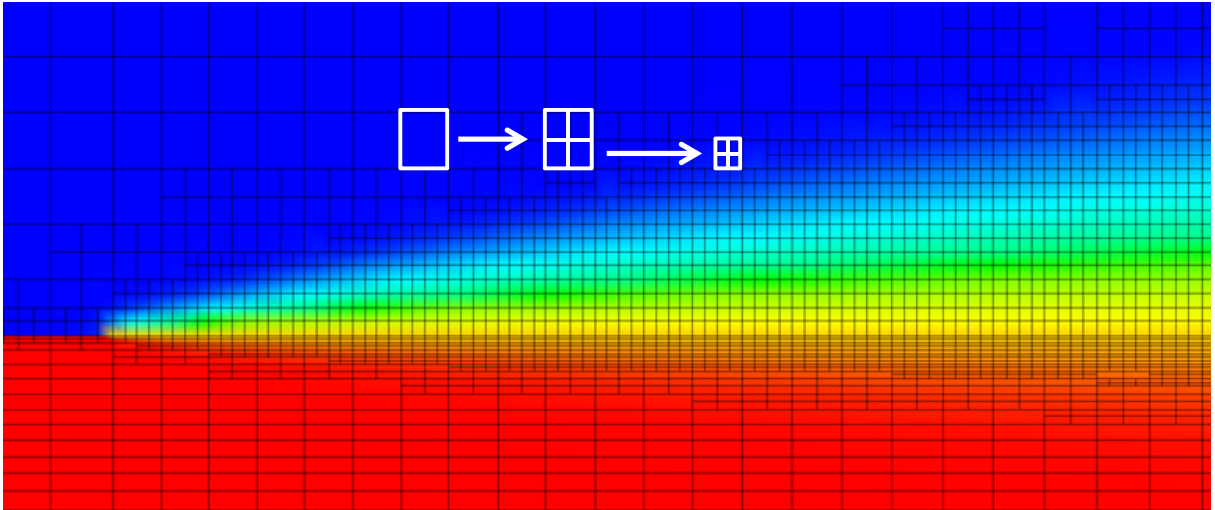


Figura 4.6 – Campo da fração de mistura média sobreposta pela malha na saída do bico injetor

O tamanho inicial e final das malhas utilizadas nesta avaliação é apresentado na Tabela 4.4.

Tabela 4.4 – Malhas utilizadas nas simulações com o modelo SLDF

Descrição	Malha 1	Malha 2	Malha 3	Malha 4
quantidade inicial de volumes de controle	43.366	18.599	8.100	3.819
quantidade final de volumes de controle	65.047	25.031	15.084	6.831

Os valores médios obtidos para a fração de mistura e temperatura ao longo da linha de simetria do problema em função do nível de refinamento das malhas são apresentados na Figura 4.7, sendo que nesta etapa foi utilizada a tabela termoquímica D, composta por 160 pontos em \tilde{Z} , 61 em $\tilde{Z}'^{1/2}$ e 130 em $\tilde{\chi}_{st}$, a mais refinada das quatro. Nesta avaliação pode ser observado que os resultados obtidos para cada malha praticamente colapsam uns sobre os outros. Sendo assim, nas avaliações subsequentes com o modelo SLDF é empregada a malha nº 2, a segunda mais refinada, com uma quantidade final de 25.031 volumes de controle.

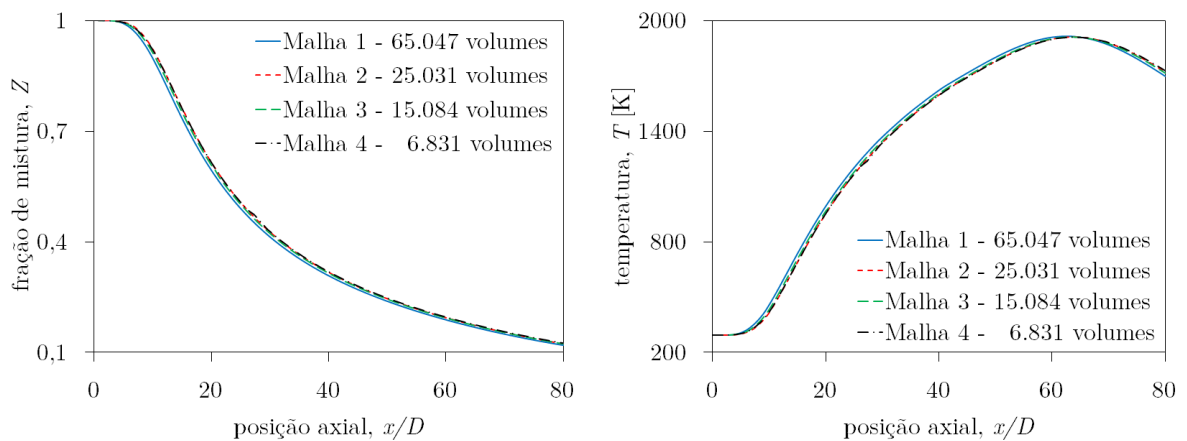


Figura 4.7 – Fração de mistura e temperatura média em função das malhas no SLDF

Na sequência é avaliada a independência dos resultados em função do nível de refinamento das tabelas termoquímicas para o modelo SLDF, de acordo com a Tabela 4.2. Os valores médios obtidos para a fração de mistura e temperatura ao longo da linha de simetria do problema em função do nível de refinamento das tabelas termoquímicas são apresentados na Figura 4.8. A sobreposição dos resultados obtidos a partir das diferentes tabelas termoquímicas é ainda maior, tornando-os indistinguíveis entre si. Sendo assim, nas avaliações subsequentes com o modelo SLDF é empregada a tabela A, composta por 86 pontos em \tilde{Z} , 34 em \widetilde{Z}'^2 e 130 em $\widetilde{\chi}_{st}$.

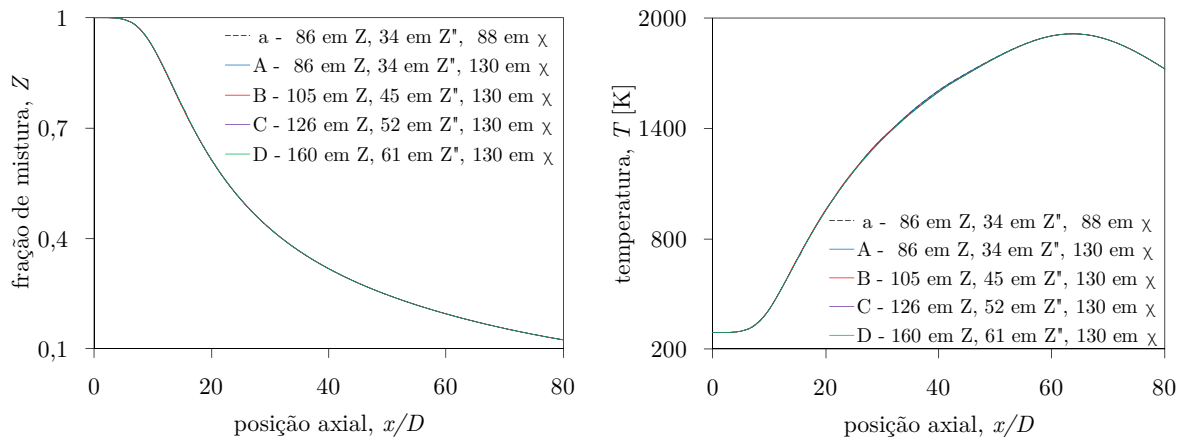


Figura 4.8 – Fração de mistura e temperatura média em função das tabelas termoquímicas no SLDF

Já com o modelo FGM, em avaliações preliminares foi observado que as mesmas malhas utilizadas para o modelo SLDF não seriam suficientes e que o refinamento automático a partir do gradiente da fração de mistura não seria uma escolha adequada. Portanto, o estudo de independência dos resultados com o FGM foi realizado com malhas estáticas (ou seja, sem a utilização do AMR), mas com uma quantidade significativamente maior de volumes de controle, com 18.599, 43.366, 122.390 e 327.480 elementos. Nesta etapa, para a composição da variável de progresso foram escolhidas as frações mássicas de CO_2 e CO , ou seja, a definição padrão do código CFD utilizado, e a tabela termoquímica C, composta por 86 pontos em \tilde{Z} e \tilde{c} e 34 em \widetilde{Z}'^2 e \widetilde{c}'^2 . Os valores médios obtidos para a fração de mistura e temperatura ao longo da linha de simetria do problema para cada malha são apresentados na Figura 4.9.

Nesta avaliação é observado um comportamento inesperado nos resultados com a utilização do modelo FGM. Nas posições compreendidas entre $x/D = 10$ e 15 e entre 30 e 40 os perfis axiais apresentam desvios abruptos, sobretudo para a temperatura, e que não são atenuados com as malhas mais refinadas, apesar da utilização de uma quantidade de volumes de controle bastante superior àquelas utilizadas com o SLDF. Esta mesma anomalia está presente para as espécies químicas, nas mesmas posições, como pode ser observado na Figura 4.10, para as frações mássicas de H_2O e CO_2 .

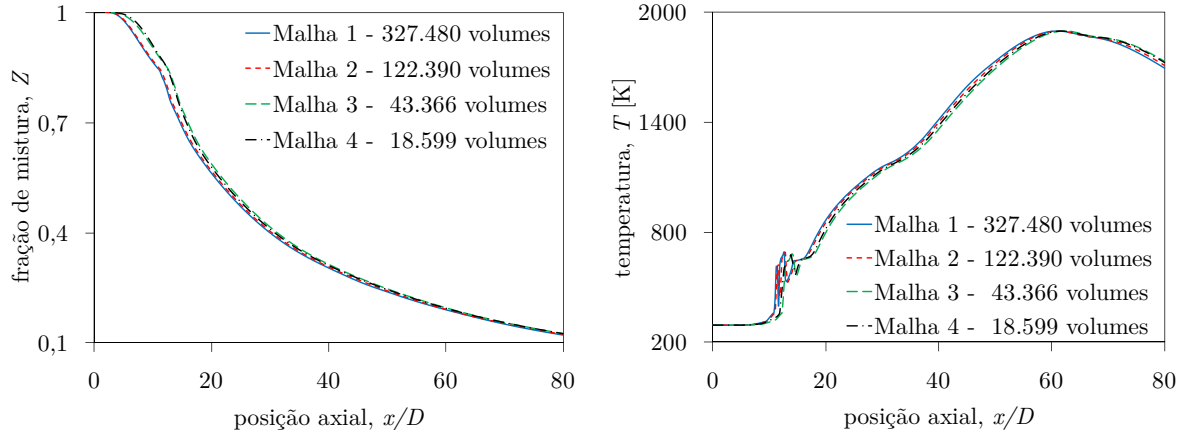


Figura 4.9 – Fração de mistura e temperatura média em função das malhas no FGM

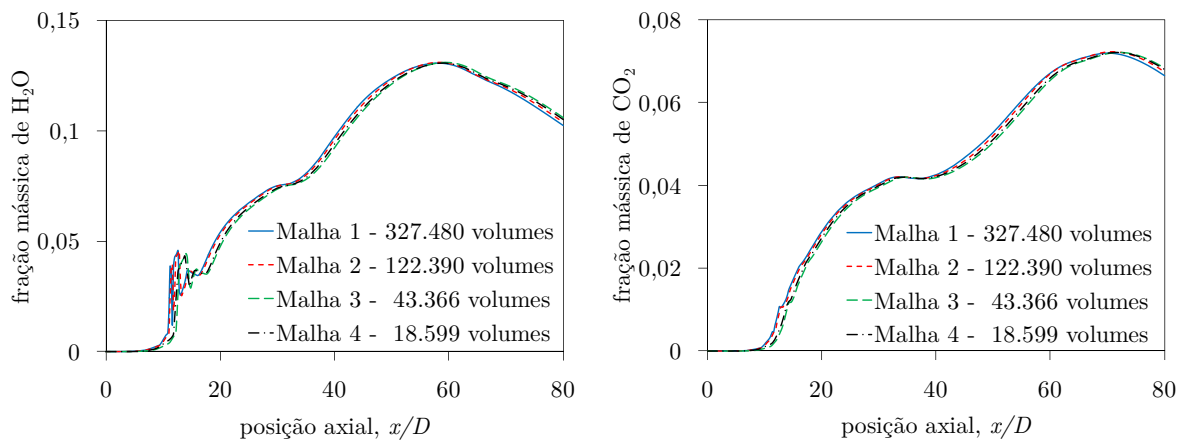


Figura 4.10 – Frações mássicas médias de H₂O e CO₂ em função das malhas no FGM

Observando que mesmo malhas muito mais refinadas não trouxeram resultados satisfatórios, o próximo passo foi modificar as espécies escolhidas na formulação da variável de progresso da reação, c . Outras sete variações foram escolhidas para c , além da definição padrão do código CFD empregado, cobrindo, assim, todas as combinações de espécies revisadas por Ihme et al., 2012, também as de Zhouqin et al., 2010, de Galpin, 2007, de Verhoeven, 2011, de Verhoeven et al., 2012 e 2013, de El-Asrag e Golden, 2013, de Coclite et al., 2015a e 2015b, e ainda outras. Foi utilizada a segunda malha mais refinada, com 122.390 volumes de controle, que chegou a resultados muito próximos com aquela com 327.480 elementos. Os valores médios obtidos para a temperatura ao longo da linha de simetria do problema em função da combinação escolhida para c são apresentados na Figura 4.11, juntamente com os resultados experimentais.

Nenhuma das escolhas para a c se mostrou satisfatória, permanecendo os desvios nos resultados nas posições compreendidas entre $x/D = 10$ e 15 e entre 30 e 40 . Para todas estas combinações de espécies foram empregados fatores de ponderação, α_k , unitários. Foram também avaliadas algumas combinações com fatores de ponderação diversos, mas também foram insatisfatórias, não sendo mostradas nas figuras.

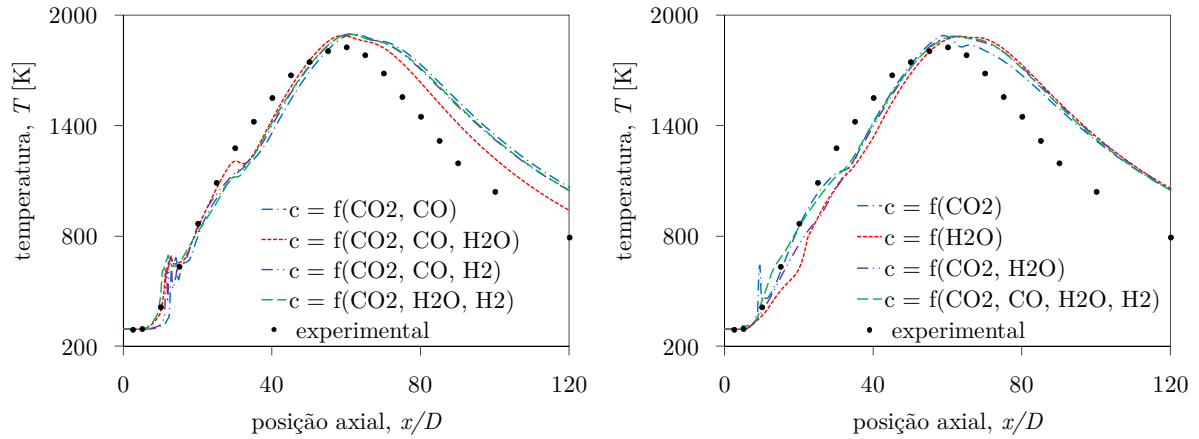


Figura 4.11 – Temperatura média em função da definição de c

Dentre as oito formulações apresentadas, quatro delas se mostraram relativamente melhores que as demais, ou seja, com desvios menos abruptos nos perfis axiais, sendo para essas apresentados os resultados para as frações mássicas de CO_2 , CO , H_2 e O_2 ao longo da linha de simetria do problema, conforme as Figuras 4.12 e 4.13.

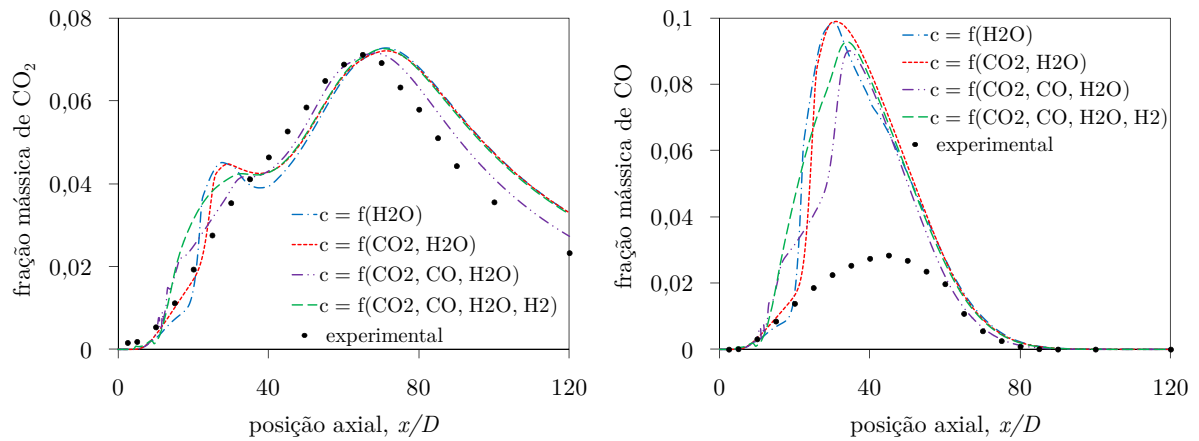


Figura 4.12 – Frações mássicas médias de CO_2 e CO em função da definição de c

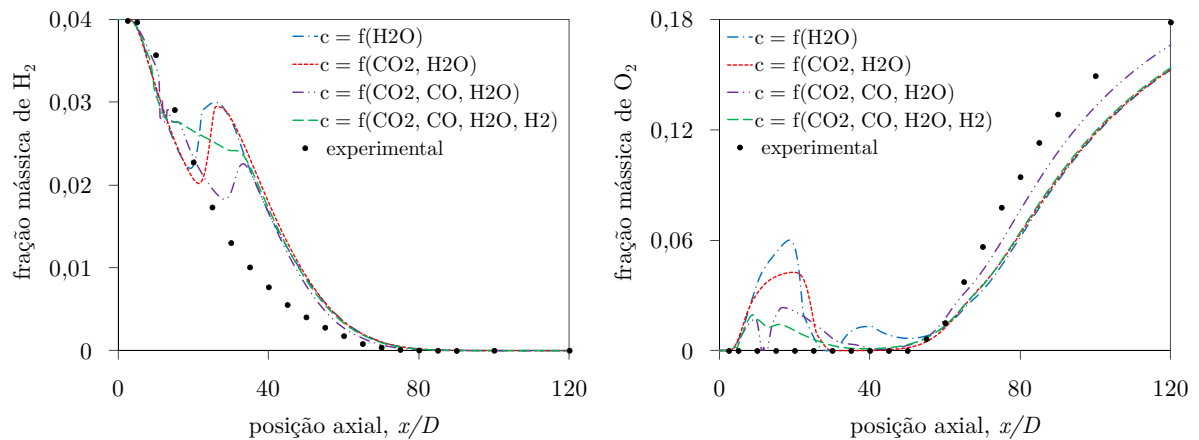


Figura 4.13 – Frações mássicas médias de H_2 e O_2 em função da definição de c

Dentre estas, a formulação para c composta pelas frações mássicas das espécies CO_2 ,

CO e H₂O apresentou os resultados mais próximos às medições experimentais para regiões distantes da saída do bico injetor, sobretudo para a temperatura e as frações mássicas de CO₂ e O₂. Contudo, a que se mostrou com desvios menos abruptos nos perfis axiais foi aquela composta por CO₂, CO, H₂O e H₂, a mesma combinação de espécies utilizada por Ihme e Pitsch, 2008a e 2008b, e por Coclite et al., 2015b, na investigação numérica das chamas D, E e F da Sandia, sendo que essas se tratam de chamas parcialmente pré-misturadas. Esta última formulação foi a escolhida nas simulações subsequentes com o modelo FGM.

Para esta definição de c , e ainda utilizando a malha composta por 122.390 volumes de controle, foi avaliada a independência dos resultados em função do nível de refinamento da tabela termoquímica, de acordo com a Tabela 4.2, sendo os valores médios obtidos para a fração de mistura e temperatura ao longo da linha de simetria do problema apresentados na Figura 4.14.

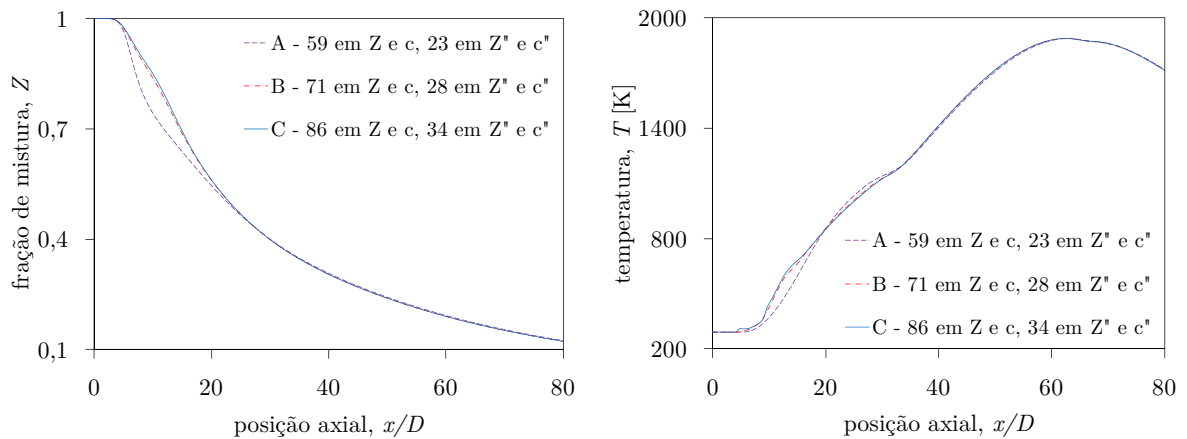


Figura 4.14 – Fração de mistura e temperatura média em função das tabelas termoquímicas no FGM

Da tabela termoquímica A para a B é possível observar uma significativa evolução dos resultados, mas não da tabela B para a C. Houve também uma tentativa de utilizar uma quantidade maior de pontos na resolução das tabelas do modelo FGM, o que não foi possível devido ao tamanho excessivo dos arquivos gerados, impossibilitando que eles fossem lidos pelo código CFD. Sendo assim, nas simulações subsequentes com o modelo FGM foi utilizada a tabela termoquímica C, composta por 86 pontos em \tilde{Z} e \tilde{c} e 34 em \widetilde{Z}''^2 e \widetilde{c}''^2 .

Vale mencionar que o aumento da resolução das tabelas termoquímicas afeta somente o tempo de pré-processamento das simulações e o tempo do seu primeiro carregamento necessário para realizar as simulações. Não foi observada diferença significativa na etapa de processamento em si na utilização das diferentes tabelas.

4.3 Comparação dos Resultados do Modelo SLDF com os Experimentais

Nesta seção são comparados os resultados obtidos com o modelo SLDF, com e sem a modelagem da radiação térmica, com as medições experimentais e com os resultados

numéricos dos trabalhos de Pitsch, 2000, e de Lee e Choi, 2009, quando disponíveis. Os resultados obtidos com o modelo FGM não são comparados neste momento devido às grandes disparidades encontradas. Os trabalhos utilizados na comparação subsequente empregaram modelagem semelhante à do presente estudo, sendo que eles já foram discutidos na Seção 1.2.2.1.

A Figura 4.15 apresenta os valores médios para a fração de mistura e a temperatura ao longo da linha de centro da chama.

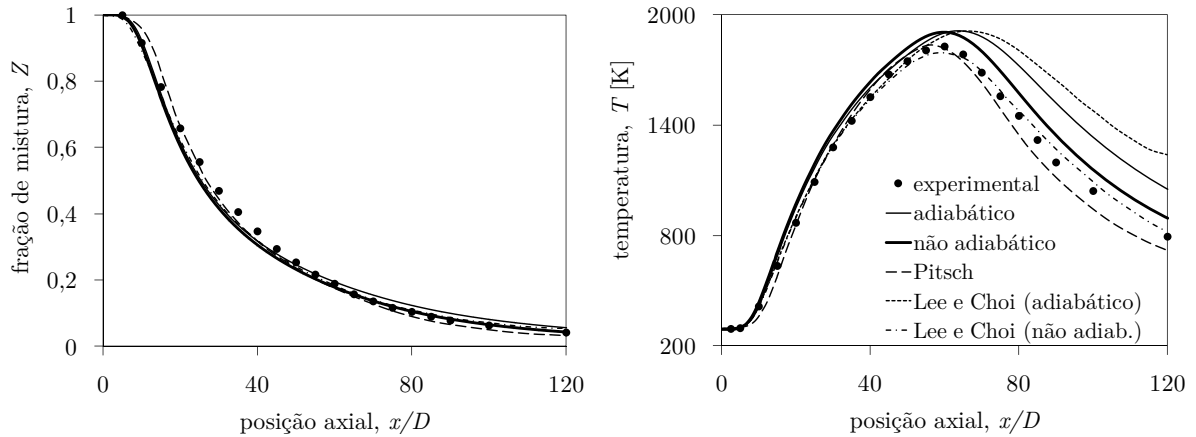


Figura 4.15 – Resultados médios para a fração de mistura e temperatura com o SLDF

Pode ser observada a significativa contribuição à qualidade dos resultados com a inclusão da modelagem da radiação térmica, sobretudo nos resultados para a temperatura nas posições posteriores a $x/D = 40$. A mesma melhoria com a inclusão da radiação também foi notada no trabalho de Lee e Choi, 2009. Porém, a contribuição da solução da radiação é melhor observada na predição das espécies, conforme as Figuras 4.16 e 4.17.

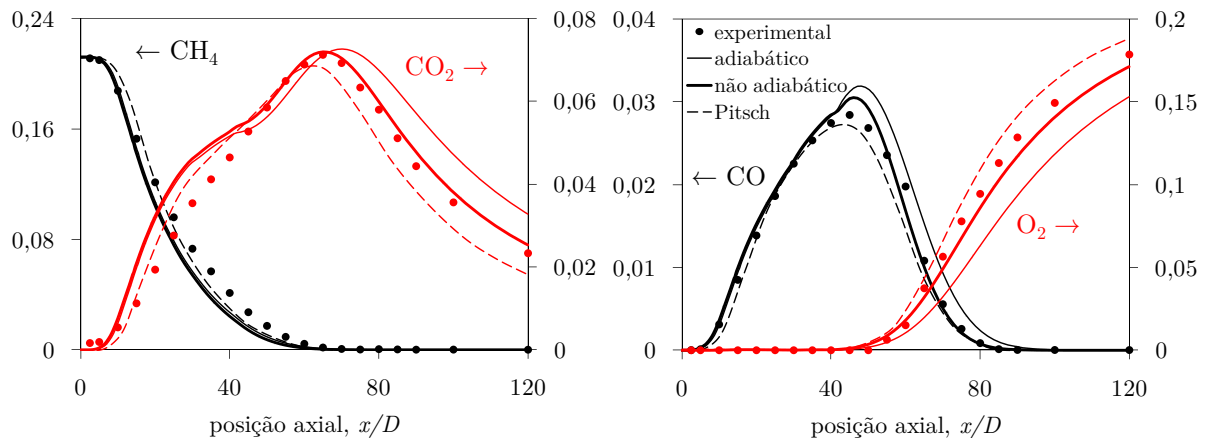


Figura 4.16 – Resultados médios para as frações mássicas de CH_4 , CO_2 , CO e O_2 com o SLDF

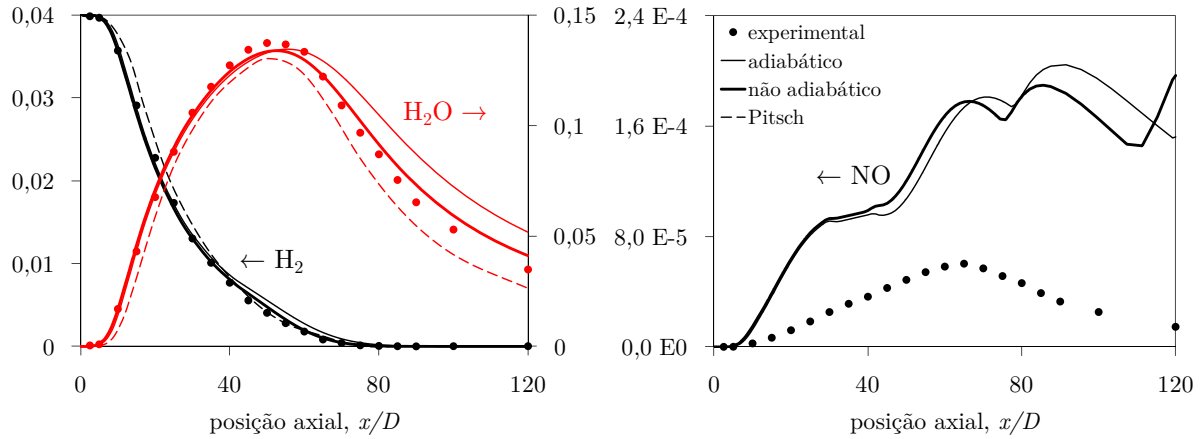


Figura 4.17 – Resultados médios para as frações mássicas de H₂, H₂O e NO com o SLDF

A melhoria dos resultados com a inclusão da radiação térmica para regiões distantes do bico injetor, após o pico de temperatura, é devida à forte interdependência entre radiação térmica e temperatura. Contudo, os resultados para a fração mássica de NO, com ou sem radiação, estão significativamente longe das medições experimentais, o que se presume ser devido à deficiência do modelo SLDF em prever a formação de espécies que envolvem reações lentas [Pitsch et al., 1998], como é o caso das reações de formação do NO.

Observa-se que os resultados numéricos obtidos com o modelo SLDF estão no mesmo nível de concordância com os dados experimentais quando comparados àqueles obtidos por Pitsch, 2000. O autor não resolveu a radiação térmica, no entanto, seu modelo inclui a solução de *flamelets* transientes, técnica que é normalmente mais eficiente em resolver algumas espécies de formação mais lenta, tais como os NO_x [Coelho e Peters, 2001]. Infelizmente, o autor não resolveu ou não divulgou os seus resultados para esta espécie em particular, ou seja, o NO.

4.4 Comparação dos Resultados dos Modelos SLDF e FGM

Nesta seção são comparados os resultados dos dois modelos de redução da cinética química sob investigação, o SLDF e o FGM, com e sem a modelagem da radiação térmica.

A Figura 4.18 apresenta os valores médios para a velocidade longitudinal e a fração de mistura ao longo da linha de centro da chama.

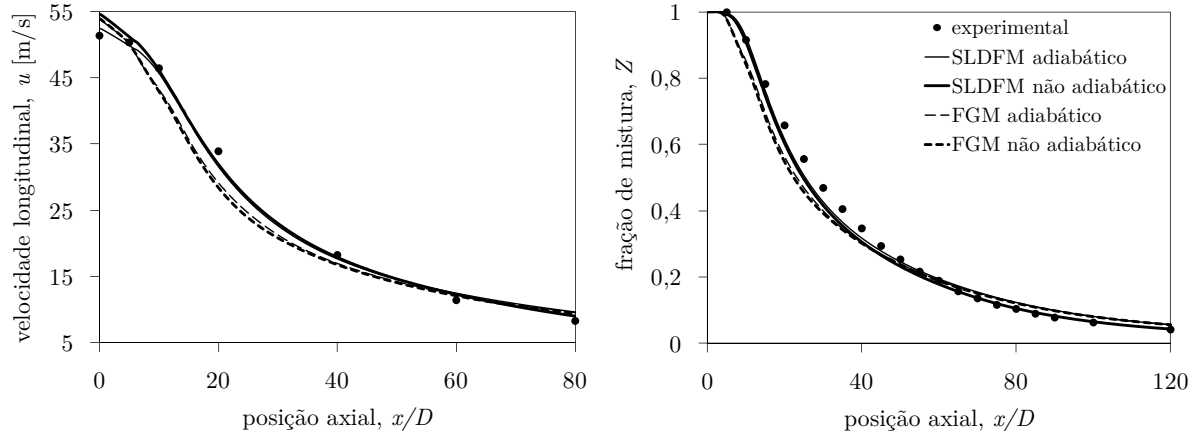


Figura 4.18 – Comparação dos resultados médios para a velocidade longitudinal e fração de mistura com o SLDF e o FGM

Neste estudo, os resultados para a velocidade longitudinal e a temperatura se mostraram próximos entre os dois modelos, mas certamente com uma vantagem do SLDF sobre o FGM quanto à concordância com as medições experimentais para o caso escolhido. As diferenças entre os modelos são melhor observadas nos resultados para a temperatura média e, sobretudo, para as frações mássicas médias das espécies químicas, conforme as Figuras 4.19 a 4.21.

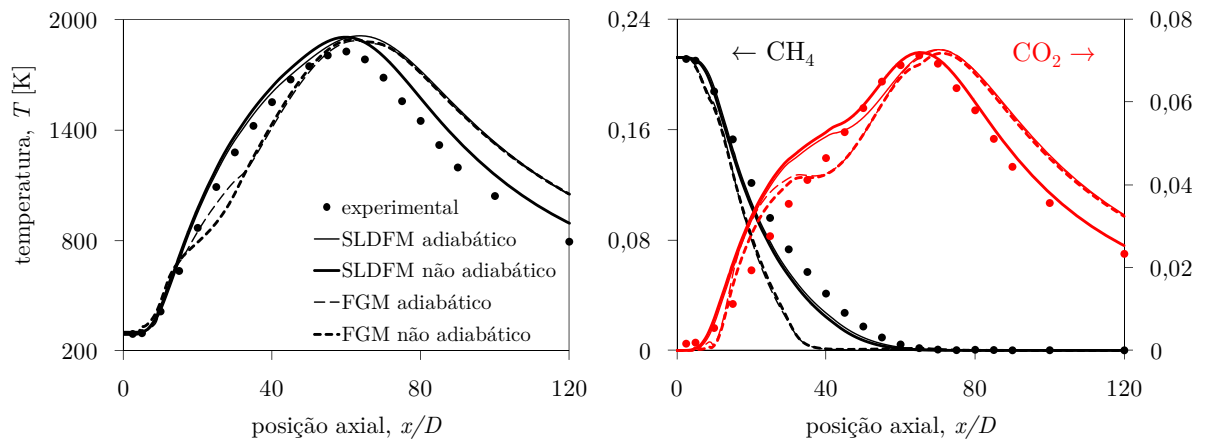


Figura 4.19 – Comparação dos resultados médios para a temperatura e frações mássicas de CH_4 e CO_2 com o SLDF e o FGM

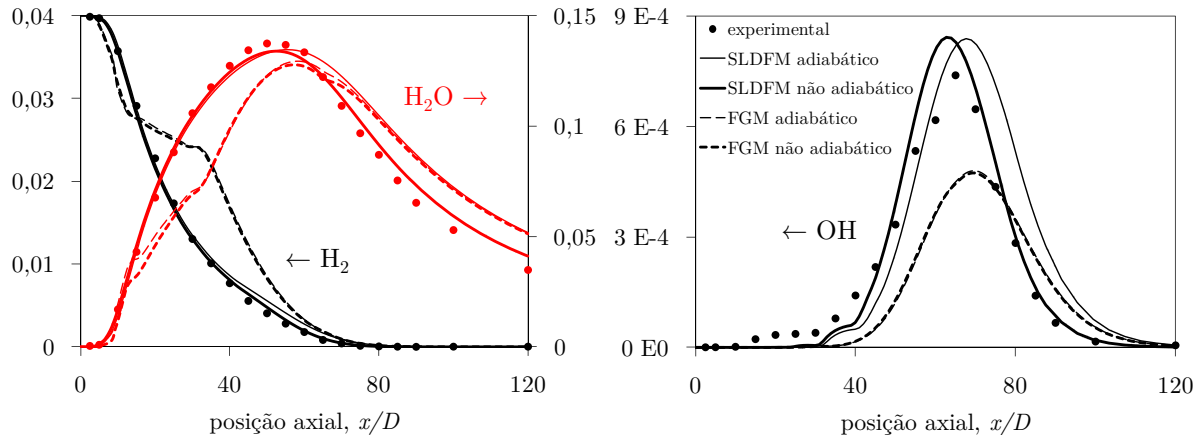


Figura 4.20 – Comparação dos resultados médios para as frações mássicas de H_2 , H_2O e OH com o SLDF e o FGM

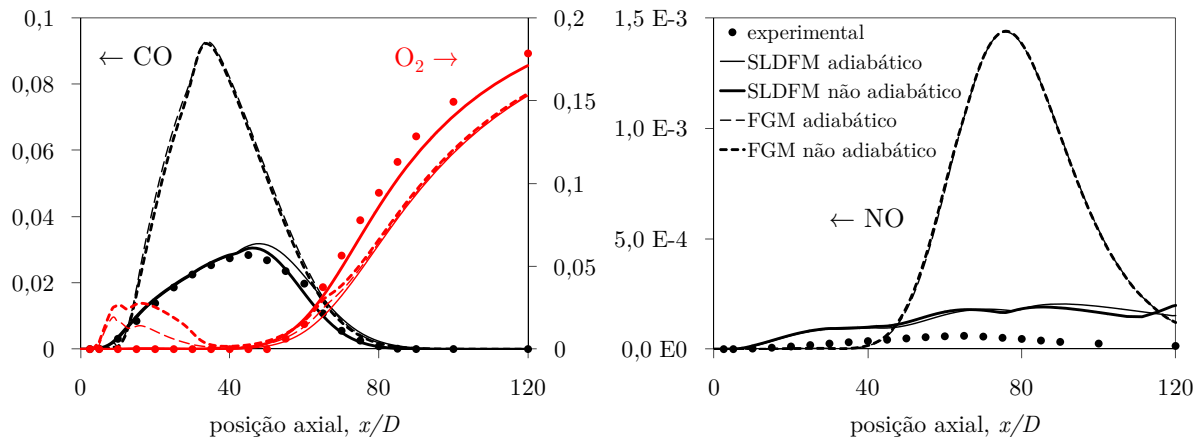


Figura 4.21 – Comparação dos resultados médios para as frações mássicas de CO , O_2 e NO com o SLDF e o FGM

Além dos desvios nos perfis axiais obtidos com o modelo FGM, a ele também são devidas frações mássicas muito distantes das medições experimentais, especialmente para as espécies OH , CO e NO . Esta última, que já não havia sido bem prevista pelo SLDF, com o modelo FGM resultou em concordância significativamente pior. E, diferentemente do observado com o modelo SLDF, a inclusão da modelagem da radiação térmica nas simulações não mostrou contribuição no aperfeiçoamento dos resultados, mantendo-os praticamente iguais à solução adiabática.

Quando os campos dos resultados obtidos por cada modelo são comparados, pode ser observado um descolamento da chama com o FGM, o que não acontece com o SLDF, a exemplo do campo de temperatura média, apresentado na Figura 4.22.

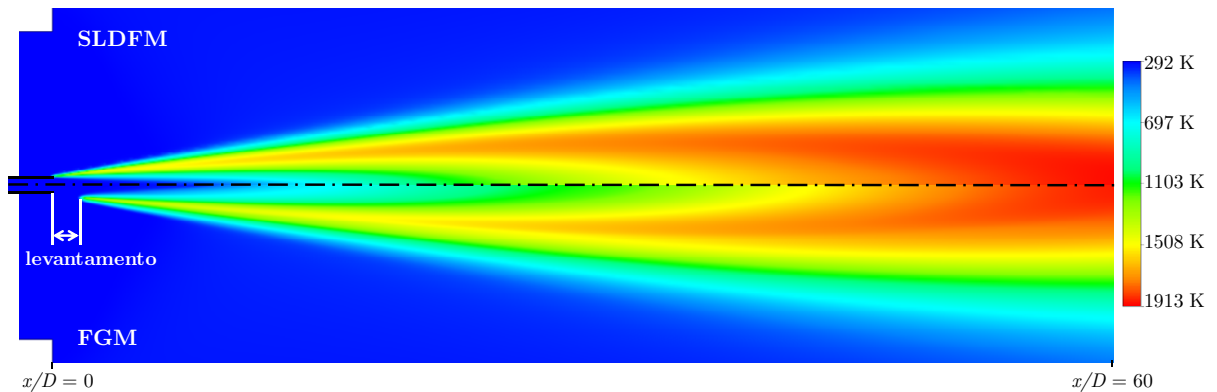


Figura 4.22 – Comparação do campo de temperatura média entre o SLDF e o FGM

Este levantamento da chama no modelo FGM, de 12 mm ($x/D = 1,5$), não é condizente com a chama real, conforme pode ser observado através de fotografias (Figura 4.1) e vídeos do experimento [Sandia National Laboratories], nos quais fica claro que a chama está completamente ancorada à saída do bico injetor. Prever o levantamento de chamas foi uma das motivações que levou à criação do FGM e modelos similares, como o de Müller et al., 1994, e de Pierce, 2001, mas este fenômeno não está presente no escoamento utilizado neste trabalho.

Em avaliação preliminar, também foi incluída no domínio geométrico a espessura da parede do duto do combustível, que até então havia sido considerada infinitesimal nas simulações, a fim de avaliar se a sua presença contribui de alguma forma ao ancoramento da chama. Contudo, mesmo assim não foi observada melhoria alguma, mesmo refinamento bastante a malha na região próxima da saída do bico injetor, ou seja, na região de encontro entre as correntes do combustível e do oxidante, onde é esperada ser significativa a difusão preferencial entre espécies.

Não foi possível identificar em qual etapa o modelo FGM não foi bem sucedido neste estudo. O modelo tem sido amplamente empregado pela comunidade científica, apesar de com modificações diversas. Estas pesquisas, contudo, têm se direcionado predominantemente para chamas totalmente ou parcialmente pré-misturadas, sendo muito escassa sua utilização em chamas não pré-misturadas, como a do presente estudo.

4.5 Conclusões do Capítulo

Neste capítulo foram comparados os desempenhos de dois modelos de redução da cinética química baseados no conceito de *flamelets* estacionários, o SLDF e o FGM, com e sem radiação térmica, na solução de uma chama turbulenta não pré-misturada de $\text{CH}_4/\text{H}_2/\text{N}_2$ circundada por um escoamento coaxial de ar. Os resultados dos modelos foram confrontados contra as medições experimentais para os valores médios da velocidade longitudinal, da fração de mistura, da temperatura e das frações mássicas das espécies.

Os resultados obtidos com o modelo SLDF se mostraram em boa concordância com os

dados experimentais, e a inclusão da radiação térmica na modelagem do problema melhorou ainda mais essa concordância, sobretudo para as regiões longe do bocal de combustível, o que se assume ser devido à forte interdependência entre temperatura e radiação térmica. Os resultados para o NO, no entanto, com ou sem radiação, ficaram significativamente longe das medições experimentais, espécie para a qual a inclusão de *flamelets* transientes tem se mostrado de grande importância.

O modelo FGM, por outro lado, apresentou resultados muito aquém dos esperados, sobretudo para as frações mássicas das espécies químicas. Sua inferioridade em relação ao SLDF para o caso sob investigação se mostrou evidente, mesmo utilizando malhas com nível de refinamento muito maior. Para este caso a inclusão da radiação térmica na modelagem não trouxe benefícios perceptíveis com o modelo FGM.

Esta inadequação do modelo FGM, mesmo com o teste de diversas formulações para compor a variável de progresso da reação é surpreendente e inclusive contraditória com outros estudos que o comparam com o modelo SLDF na simulação de chamas não pré-misturadas [Pierce, 2001; Zhouqin, et al., 2010; Jha e Groth, 2011]. Contudo, o modelo FGM presente no código CFD empregado não é igual a nenhum dos modelos destes trabalhos citados, o que não permite uma comparação direta.

Acredita-se que a chave para o acerto do modelo esteja na definição da variável de progresso da reação. É nela que estão concentradas as maiores diferenças dos modelos similares denominados FGM, FPV ou FPI. E como pode ser observado em Ihme et al., 2012, e Niu et al., 2013, esta não é uma tarefa trivial. A escolha das espécies e de seus respectivos fatores de ponderação tem usualmente se baseado na experiência e em tentativas e erros, resultando em diferentes definições de acordo com cada caso. Somente recentemente têm sido propostas metodologias para sua otimização de acordo com as especificidades de cada chama e já na etapa de pré-processamento, mas que não puderam ser avaliadas neste trabalho devido a limitações no código CFD comercial empregado.

5 CONCLUSÕES E CONSIDERAÇÕES FINAIS

No presente estudo foram comparados diferentes modelos de fechamento da turbulência, baseados nas equações de Navier-Stokes em médias de Reynolds, e modelos para simplificação da cinética química, baseados no conceito de *flamelets*, na solução numérica de jatos turbulentos não pré-misturados reais, com dados experimentais disponíveis na literatura. Todas as simulações numéricas foram realizadas empregando o código CFD comercial ANSYS Fluent, versão 15.0.0, com os modelos conforme nele implementados.

Na primeira etapa deste trabalho foi avaliado o desempenho de modelos de turbulência RANS distintos na solução numérica de um jato turbulento, não reativo e isotérmico, de propano circundado por um escoamento coaxial de ar. Estes modelos foram o $k-\varepsilon$ Padrão, o $k-\varepsilon$ *Realizable*, o $k-\omega$ Padrão e o $k-\omega$ *Shear-Stress Transport*, sendo que para o modelo $k-\varepsilon$ Padrão foram empregadas duas propostas para modificação de suas constantes, de acordo com os trabalhos de Morse, 1977, e Pope, 1978, e de Kumar e Goel, 2010, além da utilização de seus valores originais, totalizando, assim, seis abordagens diferentes. Os modelos foram comparados quanto a sua eficácia na reprodução dos valores médios das velocidades longitudinal e transversal, da fração mássica de propano e da massa específica da mistura. O coeficiente de determinação R-quadrado foi utilizado como critério quantitativo para comparação do nível de concordância dos resultados numéricos com as medições experimentais.

De uma forma geral, as modificações disponíveis na literatura para o modelo $k-\varepsilon$ Padrão se mostraram muito efetivas, melhorando de forma significativa a qualidade dos resultados em relação àqueles obtidos com o modelo sem ajustes, sendo que, juntamente ao modelo $k-\omega$ Padrão, podem ser consideradas as três melhores escolhas disponíveis entre os modelos avaliados para a solução do caso em questão. Estas modificações nos modelos mostram que eles não são inequívocos e precisam ser ajustados de acordo com as diferentes classes de escoamento.

No mesmo caso, foi identificada uma inconsistência relevante nos dados experimentais, a qual não foi citada explicitamente em nenhum outro trabalho na literatura acessível. Contudo, conforme avaliado neste estudo, esta discrepância não comprometeu a análise dos modelos.

Na segunda etapa do trabalho foi comparado o desempenho de dois modelos de redução da cinética química baseados no conceito de *flamelets* estacionários, o *Steady Laminar Diffusion Flamelet* (SLDF) e o *Flamelet-Generated Manifold* (FGM), com e sem a modelagem da radiação térmica, na solução de uma chama turbulenta não pré-misturada de $\text{CH}_4/\text{H}_2/\text{N}_2$ circundada por um escoamento coaxial de ar de baixa velocidade. Os resultados dos modelos foram confrontados contra as medições experimentais para os valores médios da velocidade longitudinal, fração de mistura, temperatura e frações mássicas das espécies químicas.

Os resultados obtidos com o modelo SLDF se mostraram em boa concordância com os dados experimentais, tendo a inclusão da radiação térmica na modelagem do problema melhorado significativamente o nível de concordância com as medições experimentais, com exceção do NO. Presume-se que os resultados para o NO seriam aperfeiçoados com a inclusão de *flamelets* transientes no modelo.

O modelo FGM, por outro lado, apresentou resultados muito aquém dos esperados, sobretudo para as frações mássicas das espécies químicas, mesmo utilizando malhas com nível de refinamento muito maior que aquelas do SLDF e com o teste de diversas combinações de espécies para a variável de progresso da reação. Por sua vez, a inclusão da radiação térmica na modelagem não trouxe benefícios perceptíveis com o FGM. Além disso, este último resultou em um levantamento irreal da chama, o que não aconteceu com o SLDF.

Não foi possível identificar em qual etapa o modelo FGM não foi bem sucedido neste estudo, e, apesar das evidentes vantagens trazidas por um código CFD comercial, sua utilização inviabilizou o acesso a muitas de suas etapas, dificultando a identificação dos pontos problemáticos do modelo.

5.1 Propostas para Trabalhos Futuros

Tendo em vista a má concordância dos resultados numéricos obtidos com o modelo FGM em relação aos resultados experimentais e da escassez de trabalhos com a sua utilização na combustão totalmente não pré-misturada, outras chamas do gênero poderiam ser com ele investigadas.

Com o objetivo de minimizar dúvidas acerca do modelo, outros estudos poderiam avaliar a contribuição de aspectos que possam estar influenciando os resultados obtidos com o FGM, a exemplo da inclusão da espessura da parede do bico injetor na chama DLR-A, que neste estudo foi considerada finita somente em uma avaliação preliminar. Dessa forma, poder-se-ia determinar se há alguma característica do escoamento utilizado no presente trabalho que compromete a eficácia do modelo FGM, e o que poderia ser nele modificado para torná-lo mais abrangente.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Alvani, R.F.; Fairweather, M. **Prediction of the Ignition Characteristics of Flammable Jets Using Intermittency-Based Turbulence Models and a Prescribed PDF Approach**, Computers & Chemical Engineering, v. 32, pp. 371-81, 2008.

Amami, E.; Nobari, M.R.H. **An Efficient PDF Calculation of Flame Temperature and Major Species in Turbulent Non-Premixed Flames**, Applied Mathematical Modelling, v. 34, pp. 2223-2241, 2010.

ANSYS Incorporated. **Fluent Theory Guide**, Canonsburg, 2013a.

ANSYS Incorporated. **Fluent User's Guide**, Canonsburg, 2013b.

Barths, H.; Peters, N.; Brehm, N.; Mack, A.; Pfitzner, M.; Smiljanovski, V. **Simulation of Pollutant Formation in Gas-Turbine Combustion Using Unsteady Flamelets**, Twenty-Seventh Symposium (International) on Combustion/The Combustion Institute, pp. 1841-1847, 1998a.

Barths, H.; Antoni, C.; Peters, N. **Three-Dimensional Simulation of Pollutant Formation in a DI Diesel Engine Using Multiple Interactive Flamelets**, SAE Technical Paper 982459, SAE International, 1998b.

Bekdemir, C. **Numerical Modeling of Diesel Spray Formation and Combustion**, Dissertação de mestrado, Technische Universiteit Eindhoven, Eindhoven, 2008.

Bekdemir, C.; Somers, L.M.T.; de Goey, L.P.H. **First Application of the Flamelet Generated Manifold (FGM) Approach to the Simulation of an Igniting Diesel Spray**, International Multidimensional Engine Modeling Users Group Meeting, 2009a.

Bekdemir, C.; Somers, L.M.T.; de Goey, L.P.H. **Flamelet Generated Manifold Strategies in Modeling of an Igniting Diesel Spray**, Towards Clean Diesel Engines, 2009b.

Bekdemir, C.; Somers, L.M.T.; de Goey, L.P.H. **Modeling Diesel Engine Combustion Using Pressure Dependent Flamelet Generated Manifolds**, Proceedings of the Combustion Institute, v. 33, pp. 2887-2894, 2011.

Bergmann, V.; Meier, W.; Wolff, D.; Stricker, W. **Application of Spontaneous Raman and Rayleigh Scattering and 2D LIF for the Characterization of a Turbulent CH₄/H₂/N₂ Jet Diffusion Flame**, Applied Physics B, v. 66, pp. 489-502, 1998.

Bilger, R.W. **The Structure of Turbulent Nonpremixed Flames**, Twenty-Second Symposium (International) on Combustion/The Combustion Institute, pp. 475-488, 1988.

Bowman, C.T.; Hanson, R.K.; Davidson, D.F.; Gardiner Jr., W.C.; Lissianski, V.; Smith, G.P.; Golden, D.M.; Frenklach, M.; Goldenberg, M. **GRI-Mechanism 2.11**, 1995. Disponível em: <http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/>

Bray, K.; Domingo, P.; Vervisch, L. **Role of the Progress Variable in Models for Partially Premixed Turbulent Combustion**, Combustion and Flame, v. 141, pp. 431-437, 2005.

Bressloff, N.W. **CFD Prediction of Coupled Radiation Heat Transfer and Soot Production in Turbulent Flames**, Tese de doutorado, Cranfield University, Bedford, 1996.

Cecere, D.; D'Anna, A.; D'Alessio, A.; Verzicco, R. **Large Eddy Simulation of a Turbulent Ethylene/Air Diffusion Flame with Presumed Moment Closure**, Proceedings of the Combustion Institute, pp. 1-7, 2007.

Celik, I.B.; Ghia, U.; Roache, P.J.; Freitas, C.J.; Coleman, H.; Raad, P.E. **Procedure for Estimation and Reporting of Uncertainty Due to Discretization in CFD Application**, Journal of Fluids Engineering, v. 130(7), 2008.

Chen, J.-Y. **Second-Order Conditional Modeling of Turbulent Nonpremixed Flames with a Composite PDF**, Combustion and Flame, v. 69, pp. 1-36, 1987.

Cho, J.R.; Chung, M.K. **A $k-\varepsilon-\gamma$ Equation Turbulence Model**, Journal of Fluid Mechanics, v. 237, pp. 301-22, 1992.

Claramunt, A.K. **Numerical Simulation of Non-Premixed Laminar and Turbulent Flames by Means of Flamelet Modelling Approaches**, Tese de doutorado, Universitat Politècnica de Catalunya, Catalunya, 2005.

Coclite, A.; Cutrone, L.; de Palma, P.; Pascazio, G. **Numerical Investigation of High-Pressure Combustion in Rocket Engines Using Flamelet/Progress-Variable Models**, 53rd AIAA Aerospace Sciences Meeting, 2015a.

Coclite, A.; Pascazio, G.; de Palma, P.; Cutrone, L.; Ihme, M. **An SMLD Joint PDF Model for Turbulent Non-Premixed Combustion Using the Flamelet Progress-Variable Approach**, Flow Turbulence Combustion, v. 95, pp. 97-119, 2015b.

Coelho, P.; Costa, M. **Combustão**, Edições Orion, 2007.

Coelho, P.J.; Peters, N. **Unsteady Modelling of a Piloted Methane/Air Jet Flame Based on the Eulerian Particle Flamelet Model**, *Combustion and Flame*, v. 124(3), pp. 444-465, 2001.

Coppalle, A.; Vervisch, P. **The Total Emissivities of High-Temperature Flames**, *Combustion and Flame*, v. 49(1-3), pp. 101-108, 1983.

Crocco, L. **The Laminar Boundary Layer in Gases**, North American Aviation, Aerophysics Laboratory, 1948.

Dally, B.B.; Fletcher, D.F.; Masri, A.R. **Flow and Mixing Fields of Turbulent Bluff-Body Jets and Flames**, *Combustion Theory Modelling*, v. 2, pp. 193-219, 1998.

Deon, D.L.; Pereira, F.M.; Hoerlle, C.A.; Vielmo, H.A. **Comparison of Turbulence Models in RANS Simulations of a Nonreacting Propane Jet Surrounded By Coflowing Air**, 15th Brazilian Congress of Thermal Sciences and Engineering, 2014.

Draper, N.R.; Smith, H. **Applied Regression Analysis**, John Wiley & Sons, ed. 3, 1998.

Dibble, R.W.; Barlow, R.S. **Comunicação privada via correio eletrônico**, 2015.

Dibble, R.W.; Hartmann, V.; Schefer, R.W.; Kollmann, W. **Conditional Sampling of Velocity and Scalars in Turbulent Flames Using Simultaneous LDV-Raman Scattering**, *Experiments in Fluids*, v. 5, pp. 103-113, 1987.

Dibble, R.W.; Kollmann, W.; Schefer, R.W. **Measurements and Predictions of Scalar Dissipation in Turbulent Jet Flames**, Twentieth Symposium (International) on Combustion/The Combustion Institute, pp. 345-352, 1984.

Dorigon, L.J.; Duciak, G.; Brittes, R.; Cassol, F.; Galarça, M. França, F.H.R. **WSGG Correlations Based on HITEMP2010 for Computation of Thermal Radiation in Non-Isothermal, Non-Homogeneous H₂O/CO₂ Mixtures**, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v. 64, pp. 863-873, 2013.

El-Asrag, H.A.; Golden, G. **A Comparison between two Different Flamelet Reduced Order Manifolds for Non-Premixed Turbulent Flames**, 8th U. S. National Combustion Meeting, 2013.

Emami, M.D.; Fard, A.E. **Laminar Flamelet Modeling of a Turbulent CH₄/H₂/N₂ Jet Diffusion Flame Using Artificial Neural Networks**, *Applied Mathematical Modelling*, v. 36, pp. 2082-2093, 2012.

Empresa de Pesquisa Energética (Brasil). **Balanco Energético Nacional 2015:**

Ano Base 2014, Rio de Janeiro, 2015.

Ern, A.; Giovangigli, V. **Multicomponent Transport Algorithms**, Springer Verlag, Heidelberg, 1994.

Fiorina, B.; Gicquel, O.; Vervisch, L.; Carpentier, S.; Darabiha, N. **Premixed Turbulent Combustion Modeling Using Tabulated Detailed Chemistry and PDF**, Proceedings of the Combustion Institute, v. 30, pp. 867-874, 2005.

Galpin, J. **Modélisation LES de la Combustion Avec une Rise en Compte des Effets de Cinétique Détaillée et en Perspective D'application Moteur**, Tese de doutorado, Institut National des Sciences Appliquées, Rouen, 2007.

George, W.K.; Wang, H.; Wollblad, C.; Johansson, T.G. **Homogeneous Turbulence and its Relation to Realizable Flows**, 14th Australasian Fluid Mechanics Conference, Adelaide, pp. 41-48, 2001.

Gharbi, A.; Ruffin, E.; Anselmet, F.; Schiestel, R. **Numerical Modelling of Variable Density Turbulent Jets**, International Journal of Heat and Mass Transfer, v. 39(9), pp. 1865-1882, 1996.

Gicquel, O.; Darabiha, N.; Thevenin, D. **Laminar Premixed Hydrogen/Air Counterflow Flame Simulations Using Flame Prolongation of ILDM with Differential Diffusion**, Proceedings of the Combustion Institute, v. 28, pp. 1901-1908, 2000.

Gilliland, T.; Ranga-Dinesh, K.K.J.; Fairweather, M.; Falle, S.A.E.G.; Jenkins, K.W.; Savill, A.M. **External Intermittency Simulation in Turbulent Round Jets**, Flow, Turbulence and Combustion, v. 89(3), pp. 385-406, 2012.

Gouldin, F.C.; Schefer, R.W.; Johnston, S.C.; Kollmann, W. **Nonreacting Turbulent Mixing Flows**, Progress in Energy and Combustion Science, v. 12, pp. 257-303, 1986.

Haworth, D.C.; Drake, M.C.; Pope, S.B.; Blint, R.J. **The Importance of Time-Dependent Flame Structures in Stretched Laminar Flamelet Models for Turbulent Jet Diffusion Flames**, Twenty-Second Symposium (International) on Combustion/The Combustion Institute, pp. 589-597, 1988.

Hirschfelder, J.O.; Curtiss, C.F.; Bird, R.B. **Molecular Theory of Gases and Liquids**, John Wiley, 1954.

Hoerlle, C.A. **Estudo Numérico de Chamas Laminares Difusivas de CH₄ Diluído com CO₂ Empregando Mecanismos Cinéticos Globais e a Técnica**

Flamelet-Generated Manifold, Dissertação de mestrado, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2015.

Hossain, M.; Malalasekera, W. **Numerical Study of Bluff-Body Flame Structures Using Laminar Flamelet Model**, Proceeding of the Institution of Mechanical Engineers, v. 219, Part A: Journal of Power and Energy, pp. 361-370, 2005.

Hottel, H.C.; Sarofim, A.F. **Radiative Transfer**, McGraw-Hill, Nova York, 1967.

Huang, C.; Lipatnikov, A.N. **Comparison of Presumed PDF Models of turbulent flames**. Journal of Combustion, v. 12, 2012.

Ihme, M.; Pitsch, H. **Prediction of Extinction and Reignition in Nonpremixed Turbulent Flames Using a Flamelet/Progress Variable Model. 1. A Priori Study and Presumed PDF Closure**, Combustion and Flame, v. 155, pp. 70-89, 2008a.

Ihme, M.; Pitsch, H. **Prediction of Extinction and Reignition in Nonpremixed Turbulent Flames Using a Flamelet/Progress Variable Model. 2. Application in LES of Sandia flames D and E**, Combustion and Flame, v. 155, pp. 90-107, 2008b.

Ihme, M.; Shunn, L.; Zhang, J. **Regularization of Reaction Progress Variable for Application to Flamelet-Based Combustion Models**, Journal of Computational Physics, v. 231, pp. 7715-7721, 2012.

Imine, B.; Saber-Benhina, A.; Imine, O.; Gazzah, M.H. **Effects of a Directed Co-Flow on a Non-Reactive Turbulent Jet with Variable Density**, Heat and Mass Transfer, v. 42, pp. 39-50, 2005.

International Energy Agency. **Key World Energy Statistics**, OECD/IEA, 2015.

Janicka, J.; Kollmann, W. **A Two-Variables Formalism for the Treatment of Chemical Reactions in Turbulent H₂-Air Diffusion Flames**, Proceedings of the Combustion Institute, v. 17, n. 1, pp. 421-430, 1979.

Janicka, J.; Peters, N. **Prediction of Turbulent Jet Diffusion Flame Lift-Off Using a PDF Transport Equation**, Symposium (International) on Combustion/The Combustion Institute, v. 19(1), pp. 367-374, 1982.

Jha, P.; Groth, C. **Evaluation of Flame-Prolongation of ILDM and Flamelet Tabulated Chemistry Approaches for Laminar Flames**, 49th AIAA Aerospace Sciences Meeting including the New Horizons Forum and Aerospace Exposition, 2011.

Jones, W.P.; Musonge, P. **Closure of the Reynolds Stress and Scalar Flux Equations**. Physics of Fluids, v. 31, pp. 3589-604, 1988.

Jones, W.P.; Whitelaw, J.H. **Calculation Methods for Reacting Turbulent Flows: A Review**, *Combustion and Flame*, v. 48, pp. 1-26, 1982.

Kamal, M.M.; Zhou, R.; Balusamy, S.; Hochgreb, S. **Favre- and Reynolds-Averaged Velocity Measurements: Interpreting PIV and LDA Measurements in Combustion**, *Proceedings of the Combustion Institute*, v. 35(3), pp. 3803-3811, 2015.

Kato, M.; Launder, B.E. **The Modelling of Turbulent Flow Around Stationary and Vibrating Square Cylinders**. Ninth Symposium on Turbulent Shear Flows, Quioto, pp. 16-18, 1993.

Kee, R.J.; Rupley, F.M.; Miller, J.A. **ChemKin-II: A Fortran Chemical Kinetics Package for the Analysis of Gas-Phase Chemical Kinetics**, Sandia National Laboratories Report SAND 89-8009, 1989.

Kee, R.J.; Rupley, F.M.; Miller, J.A.; Coltrin, M.E.; Grcar, J.F.; Meeks, E.; Moffat, H.K.; Lutz, A.E.; Dixon-Lewis, G.; Smooke, M.D.; Warnatz, J.; Evans, G.H.; Larson, R.S.; Mitchell, R.E.; Petzold, L.R.; Reynolds, W.C.; Caracotsios, M.; Stewart, W.E.; Glarborg, P.; Wang, C.; Adigun, O.; Houf, W.G.; Chou, C.P.; Miller, S.F.; Ho, P.; Young, D.J. **CHEMKIN v. 4.0 Technical Report**, Reaction Design, Incorporated, São Diego, 2004.

Kee, R.J.; Warnatz, J.; Miller, J.A. **A Fortran Computer Code Package for the Evaluation of Gas-Phase Viscosities Conductivities and Diffusion Coefficients**, Sandia National Laboratories Report SAND 83-8209, 1983.

Kim, J.S.; Williams, F.A. **Extinction of Diffusion Flames with Nonunity Lewis Number**, *Journal of Engineering Mathematics*, v. 31(2), pp. 101-118, 1997.

Kumar, S.; Goel, S.K. **Modeling of Lifted Methane Jet Flames in a Vitiated Coflow Using a New Flame Extinction Model**, *Combustion Science and Technology*, v. 182, pp. 1961-1978, 2010.

Kuznetsov, V.R. **Effect of Turbulence on the Formation of Large Superequilibrium Concentration of Atoms and Free Radicals in Diffusion Flames**, *Mehan. Zhidkosti Gasa*, v. 6, pp. 3-9, 1982.

Launder, B.E.; Spalding, D.B. **Lectures in Mathematical Models of Turbulence**, Academic Press, Londres, 1972.

Launder, B.E.; Spalding, D.B. **The Numerical Computation of Turbulent Flows**, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, v. 3(2), pp. 269-289, 1974.

Law, C.K. **Combustion Physics**, Cambridge University Press, 2006.

Lee, K.W.; Choi, D.H. **Analysis of NO Formation in High Temperature Diluted Air Combustion in a Coaxial Jet Flame Using an Unsteady Flamelet Model**, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v. 52(5-6), pp. 1412–1420, 2009.

Lentini, D.; Puri, I.K. **Stretched Laminar Flamelet Modeling of Turbulent Chloromethane-Air Nonpremixed Jet Flames**, *Combustion and Flame*, v. 103(4), pp. 328–338, 1995.

Liew, S.K.; Bray, K.N.C.; Moss, J.B. **A Flamelet Model of Turbulent Non-Premixed Combustion**, *Combustion Science and Technology*, v. 27, pp. 69–73, 1981.

Liu, F.; Guo, H.; Smallwood, G.J. **Evaluation of the Laminar Diffusion Flamelet Model in the Calculation of an Axisymmetric Coflow Laminar Ethylene-Air Diffusion Flame**, *Combustion and Flame*, v. 144, pp. 605-618, 2006.

Lockwood, F.C.; Moneib, H.A. **Fluctuating Temperature Measurements in a Heated Round Free Jet**, *Combustion Science and Technology*, v. 22(1-2), pp. 63-81, 1980.

Maas, U.; Pope, S.B. **Simplifying Chemical Kinetics: Intrinsic Low-Dimensional Manifolds in Composition Space**, *Combustion and Flame*, v. 88, pp. 239–264, 1992.

McBride, B.J.; Gordon, S.; Reno, M.A. **Coefficients for Calculating Thermodynamic and Transport Properties of Individual Species**, NASA Technical Memorandum 4513, 1993.

McGuirk, J.J.; Rodi, W. **The Calculation of Three-Dimensional Turbulent Free Jets**, 1st Symposium on Turbulent Shear Flows, pp. 71-83, 1979.

Meier, W.; Barlow, R.S.; Chen Y.-L.; Chen, J.-Y. **Raman/Rayleigh/LIF Measurements in a Turbulent CH₄/H₂/N₂ Jet Diffusion Flame: Experimental Techniques and Turbulence–Chemistry Interaction**, *Combustion and Flame*, v. 123, pp. 326-343, 2000.

Menter, F.R. **Two-Equation Eddy-Viscosity Turbulence Models for Engineering Applications**, *AIAA Journal*, v. 32(8), pp. 1598–1605, 1994.

Modest, M.F. **Radiative Heat Transfer**, Elsevier Academic Press, ed. 3, Kidlington, 2013.

Morgans, R.C.; Dally, B.B.; Nathan, G.J.; Lanspeary, P.V.; Fletcher, D.F. **Application of the Revised Wilcox (1998) *k*- Turbulence Model to a Jet in Co-Flow**, Second International Conference on CFD in the Minerals and Process Industries, Melbourne, Australia, 1999.

Morse, A.P. **Axisymmetric Turbulent Shear Flows With and Without Swirl**, Tese de doutorado, London University, Londres, 1977.

Müller, C.M.; Breitbach, H.; Peters, N. **Partially Premixed Turbulent Flame Propagation in Jet Flames**, Twenty-Fifth Symposium (International) on Combustion/The Combustion Institute, pp. 1099-1106, 1994.

Niu, Y.-S.; Vervisch, L.; Tao, P.D. **An Optimization-Based Approach to Detailed Chemistry Tabulation: Automated Progress Variable Definition**, Combustion and Flame, v. 160(4), 2013, pp. 776-785.

Odedra, A.; Malalasekera, W. **Eulerian Particle Flamelet Modeling of a Bluff-Body CH₄/H₂ Flame**, Combustion and Flame, v. 151(3), pp. 512-531, 2007.

van Oijen, J.A. **Flamelet-Generated Manifolds: Development and Application to Premixed Laminar Flames**, Tese de doutorado, Technische Universiteit Eindhoven, Eindhoven, 2002.

van Oijen, J.A. **Recent Developments in FGM Combustion Modeling**, Apresentação, Technische Universiteit Eindhoven, Eindhoven, 2014.

van Oijen, J.A.; de Goey, L.P.H. **A Numerical Study of Confined Triple Flames Using a Flamelet-Generated Manifold**, Combustion Theory Modelling, v. 8, pp. 141-163, 2004.

van Oijen, J.A.; de Goey, L.P.H. **Modelling of Premixed Laminar Flames Using Flamelet-Generated Manifolds**, Combustion Science and Technology, v. 161, pp. 113-137, 2000.

Olivieri, D.A.; Fairweather, M.; Falle, S.A.E.G. **External Intermittency Prediction Using AMR Solutions of RANS Turbulence and Transported PDF Models**, Journal of Physics: Conference Series 318, 2011.

Peters, N. **Local Quenching of Diffusion Flamelets and Non-Premixed Turbulent Combustion**, Western States Section of the Combustion Institute, artigo WSS 80-4, Spring Meeting, Irvine, 1980.

Peters, N. **Laminar Diffusion Flamelet Models in Non-Premixed Turbulent Combustion**, Progress in Energy and Combustion Science, v. 10, pp. 319-339, 1984.

Peters, N. **Laminar Flamelet Concepts in Turbulent Combustion**, Twenty-First Symposium (International) on Combustion/The Combustion Institute, pp. 1231-1250, 1986.

Peters, N. **Turbulent Combustion**, Cambridge University Press, 2004.

Peters, N. **Reduced Kinetic Mechanisms for Applications in Combustion Systems**, em Lecture Notes in Physics Monographs (editores Peters, N. e Rogg, B.), v. 15, Springer Verlag, Berlim, 1993.

Pierce, C.D. **Progress-Variable Approach for Large-Eddy Simulation of Turbulent Combustion**, Tese de doutorado, Stanford University, 2001.

Pierce, C.D.; Moin, P. **Progress Variable Approach for Large Eddy Simulation of Non-Premixed Turbulent Combustion**, Journal of Fluid Mechanics, v. 504, pp. 73–97, 2004.

Pitsch, H. **Unsteady Flamelet Modeling of Differential Diffusion in Turbulent Jet Diffusion Flames**, Combustion and Flame, v. 123, pp. 358-374, 2000.

Pitsch, H.; Barths, H.; Peters N. **Three-Dimensional Modeling of NO_x and Soot Formation in DI-Diesel Engines Using Detailed Chemistry Based on the Interactive Flamelet Approach**, SAE Technical Paper 962057, SAE International, 1996.

Pitsch, H.; Chen, M.; Peters, N. **Unsteady Flamelet Modeling of Turbulent Hydrogen-Air Diffusion Flames**, Twenty-Seventh Symposium (International) on Combustion/The Combustion Institute, pp. 1057–1064, 1998.

Pitsch, H.; Peters, N. **A Consistent Flamelet Formulation for Non-Premixed Combustion Considering Differential Diffusion Effects**, Combustion and Flame, v. 114, pp. 26-40, 1998.

Pitsch, H.; Ihme, M. **An Unsteady/Flamelet Progress Variable Method for LES of Nonpremixed Turbulent Combustion**, 43rd AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit, pp. 1-14, 2005.

Poinsot, T.; Veynante, D. **Theoretical and Numerical Combustion**, RT Edwards Incorporated, 2005.

Pope, S.B. **An Explanation of the Turbulent Round-Jet/Plane-Jet Anomaly**, AIAA Journal, v. 16, n. 3, pp. 279-281, 1978.

Pope, S.B. **Small Scales, Many Species and The Challenges of Turbulent Combustion**, Proceedings of the Combustion Institute, v. 34, pp. 1-31, 2013.

Ravikanti, M.; Hossain, M.; Malalasekera, W. **Laminar Flamelet Model Prediction of NO Formation in a Turbulent Bluff-Body Combustor**, Proceeding of the Institution of Mechanical Engineers, v. 223, Part A: Journal of Power and Energy, pp.

41-54, 2009.

Rawlings, J.O.; Pantula, S.G.; Dickey, D.A. **Applied Regression Analysis: A Research Tool**, Springer, ed. 2, 1998.

Roache, P.J. **Perspective: A Method for Uniform Reporting of Grid Refinement Studies**, Journal of Fluids Engineering, v. 116, pp. 405-413, 1994.

Rothman, L.S.; Gordon, I.E.; Babikov, Y.; Barbe, A.; Chris Benner, D.; Berbath, P.F.; Birk, M.; Bizzocchi, L.; Boudon, V.; Brown, L.R.; Campargue, A.; Chance, K.; Cohen, E.A.; Coudert, L.H.; Devi, V.M.; Drouin, B.J.; Fayt, A.; Flaud, J.-M.; Gamache, R.R.; Harrison, J.J.; Hartmann, J.-M.; Hill, C.; Hodges, J.T.; Jacquemart, D.; Jolly, A.; Lamouroux, J.; Le Roy, R.J.; Li, G.; Long, D.A.; Lyulin, O.M.; Mackie, C.J.; Massie, S.T.; Mikhailenko, S.; Müller, H.S.P.; Naumenko, O.V.; Nikitin, A.V.; Orphaul, J.; Perevalov, V.; Perrin, A.; Polovtseva, E.R.; Richard, C.; Smith, M.A.H.; Starikova, E.; Sung, K.; Tashkun, S.; Tennyson, J.; Toon, G.C.; Tyuterev, V.I.; Wagner, G. **The HITRAN2012 Molecular Spectroscopic Database**, Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer, v. 130, pp. 4-50, 2013.

Rothman, L.S.; Gordon, I.E.; Barber, R.J.; Dothe, H.; Gamache, R.R.; Goldman, A.; Perevalov, V.I.; Tashkun, S.A.; Tennyson, J. **HITEMP, the High-Temperature Molecular Spectroscopic Database**, Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer, v. 111, pp. 2139-2150, 2010.

Roy, R.N.; Kumar, S.; Sreedhara, S. **A New Approach to Model Turbulent Lifted CH₄/Air Flame Issuing in a Vitiated Coflow Using Conditional Moment Closure Coupled with an Extinction Model**, Combustion and Flame, v. 161, pp. 197-209, 2014.

Sanders, J.P.H.; Chen, J.-Y.; Gökalp, I. **Flamelet Based Modeling of NO Formation in Turbulent Hydrogen Jet Diffusion Flames**, Combustion and Flame, v. 111(1-2), pp. 1-15, 1997.

Sandia National Laboratories, **International Workshop - Measurements and Computations of Turbulent Nonpremixed Flames**. Disponível em: <<http://www.sandia.gov/TNF/abstract.html>>

Savill, A.M. **New Strategies in Modelling By-Pass Transition**, em Closure Strategies for Turbulent and Transitional Flows, ed. B.E. Launder & N.D. Sandham, Cambridge University Press, pp. 493-521, 2002.

Schefer, R.W.; Dibble, R.W. **Rayleigh Scattering Measurements of Mixture Fraction in a Turbulent Nonreacting Propane Jet**, AIAA Journal, Paper n. AIAA-86-0278, apresentado no AIAA 24th Aerospace Sciences Meeting, Reno, 1986.

Schefer, R.W.; Dibble, R.W. **Mixture Fraction Field in a Turbulent Nonreacting Propane Jet**, AIAA Journal, v. 39, n. 1, pp. 64-72, 2001.

Schefer, R.W.; Hartmann, V.; Dibble, R.W. **Conditional Sampling of Velocity in a Turbulent Nonpremixed Propane Jet**, Sandia Report SAND87-8610, AIAA Journal, v. 25, n. 10, pp. 1318-1330, 1987.

Schefer, R.W.; Johnston, S.C.; Dibble, R.W.; Gouldin, F.C.; Kollmann, W. **Nonreacting Turbulent Mixing Flows: A Literature Survey and Data Base**, Report SAND86-8217, Sandia National Laboratories, Livermore, 1986.

Shih, T.-H.; Liou, W.W.; Shabbir, A.; Yang, Z.; Zhu, J. **A New k - Eddy-Viscosity Model for High Reynolds Number Turbulent Flows - Model Development and Validation**, Computers Fluids, v. 24(3), pp. 227-238, 1995.

Schlichting, H. **Boundary-Layer Theory**, Mc-Graw-Hill, ed. 6, 1968.

Schneider, Ch.; Dreizler, A.; Janicka, J.; Hassel, E.P. **Flow Field Measurements of Stable and Locally Extinguishing Hydrocarbon-Fuelled Jet Flames**, Combustion and Flame, v. 135, pp. 185-190, 2003.

Smith, E.J.; Mi, J.; Nathan, G.J.; Dally, B.B. **Preliminary Examination of a 'Round Jet Initial Condition Anomaly' for the k - Turbulence Model**, 15th Australasian Fluid Mechanics Conference, The University of Sydney, Sydney, pp. 13-17, 2004.

Smith, E.J.; Nathan, G.J.; Dally, B.B. **Range of Validity of a Modified k - ϵ Model of the Non-Reacting Flow From a Precessing Jet Nozzle**, Third International Conference on CFD in the Minerals and Process Industries, CSIRO, Melbourne, pp. 499-504, 2003.

Smith, G.P.; Golden, D.M.; Frenklach, M.; Moriarty, N.W.; Eiteneer, B.; Goldenberg, M.; Bowman, C.T.; Hanson, R.K.; Song, S.; Gardiner Jr., W.C.; Lissianski, V.V.; Qin, Z. **GRI-Mechanism 3.0**, 1999. Disponível em: <http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/>

Smith, T.F.; Shen, Z.F.; Friedman, J.N. **Evaluation of Coefficients for the Weighted Sum of Gray Gases Model**, Journal of Heat Transfer, v. 104(4), pp. 602-608, 1982.

Tennekes, H.; Lumley, J.L. **A First Course in Turbulence**, MIT Press, Cambridge, MA, 1972.

TNF Workshop. **Proceedings of the Third International Workshop on Measurement and Computation of Turbulent Nonpremixed Flames**, Colorado,

1998.

Tominaga, Y.; Stathopoulos, T. **Turbulent Schmidt Numbers for CFD Analysis with Various Types of Flowfield**, Atmospheric Environment, v. 41, pp. 8091-8099, 2007.

Turns, S.R. **An Introduction to Combustion: Concepts and Applications**, McGraw Hill, ed. 2, 2000.

Verhoeven, L.M. **Radical Tar Removal: Numerical Modeling of Tar Conversion in a Partial Combustion Reactor**, Tese de doutorado, Technische Universiteit Eindhoven, Eindhoven, 2011.

Verhoeven, L.M.; de Andrade Oliveira, M.H.; Lantz, A.; Li, B.; Li, Z.S.; Luijten, C.C.M.; van Oijen, J.A.; Aldén, M.; de Goey, L.P.H. **A Numerical and Experimental Study of Polycyclic Aromatic Hydrocarbons in a Laminar Diffusion Flame**, Proceedings of the Combustion Institute, v. 34(1), pp. 1819-1826, 2013.

Verhoeven, L.M.; Ramaekers, W.J.S.; van Oijen, J.A.; de Goey, L.P.H. **Modeling Non-Premixed Laminar Co-Flow Flames Using Flamelet-Generated Manifolds**, Combustion and Flame, v. 159, pp. 230-241, 2012.

Warnatz, J.; Maas, U.; Dibble, R.W. **Combustion: Physical and Chemical Fundamentals, Modeling and Simulation, Experiments, Pollutant Formation**, Springer, ed. 4, Berlin, 2006.

Wen, Z.; Yun, S.; Thomson, M.J.; Lightstone, M.F. **Modeling Soot Formation in Turbulent Kerosene/Air Jet Diffusion Flames**, Combustion and Flame, v. 135(3), pp. 323-340, 2003.

Wilcox, D.C. **Turbulence Modeling for CFD**, DCW Industries, ed. 2, Califórnia, 1998.

Wilke, C.R. **A Viscosity Equation for Gas Mixtures**, The Journal of Chemical Physics, v. 18, pp. 517-519, 1950.

Williams, F.A. **Recent Advances in Theoretical Descriptions of Turbulent Diffusion Flames**, in Murthy, S.N.B. (editor). **Turbulent Mixing in Nonreactive and Reactive Flows**, pp. 189-208, Plenum Press, Nova Iorque, 1975.

Williams, F.A. **Combustion Theory**, Addison-Wesley, 1985.

Yilmaz, D.; Onbasioğlu, S.U.; Gökalp, I. **Computational Modeling of Hydrogen Enriched Non-Premixed Turbulent Methane Air Flames**, Proceedings of European Combustion Meeting, pp. 1-6, 2005.

Zakrzewski, W.; Ziółkowski, P. **Comparative Study of Turbulence Modeling in Methane Simple Jet Flame**, Colloquium Fluid Dynamics, Institute of Thermomechanics AS CR, Praga, pp. 23-25, 2013.

Zhou, R.; Balusamy, S.; Sweeney, M.S.; Barlow, R.S.; Hochgreb, S. **Flow Field Measurements of a Series of Turbulent Premixed and Stratified Methane/Air Flames**, Combustion and Flame, v. 160(10), pp. 2017-2028, 2013.

Zhouqin, F.; Mingbo, S.; Weidong, L. **Flamelet/Progress-Variable Model for Large Eddy Simulation of Supersonic Reacting Flow**, 46th AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference & Exhibit, 2010.

Ziani, L.; Chaker, A.; Chetehouna, K.; Malek, A.; Mahmah, B. **Numerical Simulations of Non-Premixed Turbulent Combustion of CH₄-H₂ Mixtures Using the PDF Approach**, International Journal of Hydrogen Energy, v. 38, pp. 8597-8603, 2013.

APÊNDICE A

Dedução da fração de mistura a partir da conservação dos elementos:

Enquanto que as espécies químicas são consumidas ou produzidas durante as reações químicas, os elementos químicos são conservados. Consequentemente, a fração mássica para cada elemento j pode ser escrita como

$$Z_j = \sum_{k=1}^{N_k} \frac{a_{k,j} W_j}{W_k} Y_k, \quad (\text{A.1})$$

onde $a_{k,j}$ é o número de átomos do elemento j na molécula da espécie química k , e W_j e W_k são as massas moleculares de cada átomo e espécie química, respectivamente.

Realizando a soma das equações de balanço para as frações mássicas das espécies químicas (Equação 2.3) de acordo com a fração de mistura baseada nos elementos, Z_j , chega-se a

$$\frac{\partial(\rho Z_j)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} Z_j) = \nabla \cdot \left(\frac{\lambda}{C_p} \nabla Z_j \right) - \nabla \cdot \left[\sum_{k=1}^{N_k} \frac{a_{k,j} W_j}{W_k} \left(\frac{\lambda}{C_p} \nabla Y_k + \mathbf{j}_k \right) \right], \quad (\text{A.2})$$

na qual o termo fonte das reações químicas acaba sendo cancelado.

Se todas as difusividades forem assumidas iguais, ou seja, se os coeficientes de difusão de massa para cada espécie, \mathcal{D}_k , forem substituídos por um único coeficiente de difusão, \mathcal{D}_Z , tal que

$$\mathbf{j}_k = -\rho \mathcal{D}_Z \nabla Y_k, \quad \rho \mathcal{D}_Z = \frac{\lambda}{C_p} \quad \text{e} \quad Le_k = Le = 1, \quad (\text{A.3})$$

a fração de mistura Z deverá satisfazer a equação de balanço definida por

$$\frac{\partial(\rho Z)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} Z) = \nabla \cdot (\rho \mathcal{D}_Z \nabla Z). \quad (\text{A.4})$$

APÊNDICE B

Dedução da fração de mistura a partir do princípio de escalar conservado:

Uma reação global e irreversível, envolvendo apenas combustível (C), oxidante (O) e produtos (P), pode ser expressa por



onde s é a massa de oxidante requerida para queimar completamente todo o combustível em condições estequiométricas.

A fração mássica de cada espécie (C, O e P) deverá obedecer às equações de balanço dadas por

$$\frac{\partial(\rho Y_F)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} Y_F) = \nabla \cdot (\rho \mathcal{D}_F \nabla Y_F) + \dot{\omega}_F, \quad (\text{B.2})$$

$$\frac{\partial(\rho Y_O)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} Y_O) = \nabla \cdot (\rho \mathcal{D}_O \nabla Y_O) + \dot{\omega}_O \quad \text{e} \quad (\text{B.3})$$

$$\frac{\partial(\rho Y_P)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} Y_P) = \nabla \cdot (\rho \mathcal{D}_P \nabla Y_P) + \dot{\omega}_P, \quad (\text{B.4})$$

onde, por razões de conservação da massa total, as taxas de reação estão relacionadas entre si através de

$$\dot{\omega}_F = \frac{\dot{\omega}_O}{s} = \frac{\dot{\omega}_P}{1 + s}. \quad (\text{B.5})$$

Se assumido que os coeficientes de difusão das espécies envolvidas são todos iguais, é possível combinar as Equações B.2 a B.5 de forma a obter uma equação de transporte sem termo fonte, ou seja, para um escalar conservado, tal que

$$\frac{\partial[\rho(s Y_F - Y_O)]}{\partial t} + \nabla \cdot [\rho \mathbf{u} (s Y_F - Y_O)] = \nabla \cdot [\rho \mathcal{D} \nabla (s Y_F - Y_O)]. \quad (\text{B.6})$$

Definindo o escalar conservado, γ , como

$$(s Y_F - Y_O) = \gamma, \quad (\text{B.6})$$

é possível chegar à fração de mistura, Z , lembrando que ela é definida como sendo a fração mássica do material originado do combustível, através de

$$Z = \frac{\gamma^* - \gamma_2^*}{\gamma_1^* - \gamma_2^*} = \frac{(s Y_F - Y_O) - (s Y_{F,2} - Y_{O,2})}{(s Y_{F,1} - Y_{O,1}) - (s Y_{F,2} - Y_{O,2})}, \quad (\text{B.7})$$

onde os índices 1 e 2 se referem às correntes de combustível e de oxidante, respectivamente.

APÊNDICE C

Dedução das equações que descrevem a estrutura dos *flamelets*:

A partir da representação esquemática apresentada na Figura 2.4 podem ser derivadas as equações para os *flamelets*. A primeira delas consiste em introduzir um sistema de coordenadas atrelado à superfície da frente de chama, assumindo-a na posição da mistura estequiométrica, e sua transformação em função da fração de mistura.

A transformação inicia pela substituição da coordenada x_1 , definida como sendo localmente normal à superfície da chama, pela nova coordenada independente Z , enquanto que as coordenadas tangenciais x_2 e x_3 são transformadas nas coordenadas Z_2 e Z_3 , respectivamente. As coordenadas x_3 e Z_3 não são mostradas na Figura 2.4 porque elas estão normais ao plano da imagem.

De posse das novas variáveis independentes, $Z = x_1$, $Z_2 = x_2$, $Z_3 = x_3$ e $\tau = t$, e das regras de transformação

$$\frac{\partial}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial \tau} + \frac{\partial Z}{\partial t} \frac{\partial}{\partial Z}, \quad (\text{C.1})$$

$$\frac{\partial}{\partial x_1} = \frac{\partial Z}{\partial x_1} \frac{\partial}{\partial Z} \quad \text{e} \quad (\text{C.2})$$

$$\frac{\partial}{\partial x_\alpha} = \frac{\partial}{\partial Z_\alpha} + \frac{\partial Z}{\partial x_\alpha} \frac{\partial}{\partial Z} \quad \text{para} \quad \alpha = 2, 3, \quad (\text{C.3})$$

e aplicando-as às equações de transporte para as frações mássicas das espécies químicas (Equação 2.3) e para a energia (Equação 2.16) são obtidas as equações gerais para os *flamelets*,

$$\rho \frac{\partial Y_k}{\partial \tau} = \rho \mathcal{D}_Z \left(\frac{\partial Z}{\partial x_\alpha} \right)^2 \frac{\partial^2 Y_k}{\partial Z^2} + \dot{\omega}_k - R(Y_k) \quad \text{e} \quad (\text{C.4})$$

$$\rho \frac{\partial T}{\partial \tau} = \rho \mathcal{D}_Z \left(\frac{\partial Z}{\partial x_\alpha} \right)^2 \frac{\partial^2 T}{\partial Z^2} - \frac{1}{C_p} \sum_{k=1}^{N_k} h_k \dot{\omega}_k - R(T), \quad (\text{C.5})$$

onde o operador R é definido por

$$R = \rho \left(u_2 \frac{\partial}{\partial Z_2} + u_3 \frac{\partial}{\partial Z_3} \right) - \frac{\partial(\rho \mathcal{D}_Z)}{\partial x_2} \frac{\partial}{\partial Z_2} - \frac{\partial(\rho \mathcal{D}_Z)}{\partial x_3} \frac{\partial}{\partial Z_3} - \rho \mathcal{D}_Z \sum_{\alpha=2}^3 \left(2 \frac{\partial Z}{\partial x_\alpha} \frac{\partial^2}{\partial Z \partial Z_\alpha} + \frac{\partial^2}{\partial Z_\alpha^2} \right). \quad (\text{C.6})$$

Esta transformação, do campo espacial para o composicional, é uma transformação do tipo Crocco, que na sua investigação da camada-limite sobre uma placa plana expressou o campo de temperatura em função de outra variável dependente, a velocidade [Crocco, 1948].

Tomando como base a espessura normalizada da zona de reação como sendo um

parâmetro pouco importante, argumentos assintóticos são usados para demonstrar que as derivadas dos escalares nas direções tangenciais são desprezíveis quando comparadas àquelas da direção normal, expressas agora em termos da nova variável independente Z . Este é um argumento clássico utilizado na descrição matemática de camadas-limite finas. Isso significa dizer que, por exemplo, a temperatura é praticamente constante ao longo da superfície estequiométrica da chama, e que os gradientes ao longo dela podem ser considerados pequenos em relação aos gradientes na direção normal a esta superfície, e o mesmo podendo ser dito em relação às frações mássicas das espécies químicas. Sendo assim, podem ser eliminados da formulação os termos compreendidos pelo operador R , ou seja, os termos relativos às direções tangenciais à superfície da chama.

Por fim, é introduzido o parâmetro que quantifica a influência dos efeitos multidimensionais difusivos do campo do escoamento, denominado taxa de dissipação do escalar, χ , definida por

$$\chi = 2 \mathcal{D}_Z \left(\frac{\partial Z}{\partial x_\alpha} \right)^2 = 2 \mathcal{D}_Z \left[\left(\frac{\partial Z}{\partial x_1} \right)^2 + \left(\frac{\partial Z}{\partial x_2} \right)^2 + \left(\frac{\partial Z}{\partial x_3} \right)^2 \right]. \quad (\text{C.7})$$

A taxa de dissipação do escalar tem a dimensão s^{-1} , e pode ser interpretada como um tempo de difusão característico. Introduzindo-a nas equações C.4 e C.5 chegar-se-á à formulação para os *flamelets*, dada por

$$\rho \frac{\partial Y_k}{\partial \tau} = \frac{1}{2} \rho \chi \frac{\partial^2 Y_k}{\partial Z^2} + \dot{\omega}_k \quad \text{para} \quad k = 1, N_k - 1 \quad \text{e} \quad (\text{C.8})$$

$$\rho \frac{\partial T}{\partial \tau} = \frac{1}{2} \rho \chi \frac{\partial^2 T}{\partial Z^2} - \frac{1}{C_p} \sum_{k=1}^{N_k} h_k \dot{\omega}_k + \frac{1}{2} \frac{\rho \chi}{C_p} \left(\frac{\partial C_p}{\partial Z} + \sum_{k=1}^{N_k} C_{p,k} \frac{\partial Y_k}{\partial Z} \right) \frac{\partial T}{\partial Z}. \quad (\text{C.9})$$