

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

Solução Numérica de uma Chama Difusiva e sua Validação

por

César Flaubiano da Cruz Cristaldo

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

Prof. Dr. Álvaro Luiz de Bortoli
Orientador

Porto Alegre, dezembro de 2008.

CIP - CATALOGAÇÃO NA PUBLICAÇÃO

Cristaldo, César Flaubiano da Cruz

Solução Numérica de uma Chama Difusiva e sua Validação / César Flaubiano da Cruz Cristaldo.—Porto Alegre: PPGMAp da UFRGS, 2008.

78 p.: il.

Dissertação (mestrado) —Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada, Porto Alegre, 2008.

Orientador: de Bortoli, Álvaro Luiz

Dissertação: Matemática Aplicada
Combustão, Chama Difusiva, Métodos Numéricos

Solução Numérica de uma Chama Difusiva e sua Validação

por

César Flaubiano da Cruz Cristaldo

Dissertação submetida como requisito parcial
para a obtenção do grau de

Mestre em Matemática Aplicada

Linha de Pesquisa: Métodos Analíticos e Numéricos em Dinâmica de Fluidos

Orientador: Prof. Dr. Álvaro Luiz de Bortoli

Banca examinadora:

Prof. Dr. Sebastião Cícero Pinheiro Gomes
Departamento de Matemática/FURG-RS

Profa. Dra. Janaína Pires Zingano
PPGMAp/UFRGS-RS

Prof. Dr. Nilo Sérgio Medeiros Cardozo
PPGEQ/UFRGS-RS

Dissertação apresentada e aprovada em
DEZEMBRO de 2008.

Profa. Dra. Maria Cristina Varriale
Coordenadora

AGRADECIMENTOS

Agradeço a todas as pessoas que, de alguma forma, contribuíram para o desenvolvimento deste trabalho. Pessoas que me incentivaram de diferentes maneiras. A todos vocês o meu sincero "muito obrigado".

Ao orientador Álvaro de Bortoli, pelo incentivo, compreensão, nos momentos mais difíceis, e pela amizade.

Aos colegas que ajudaram durante as disciplinas obrigatórias. Em especial, os colegas Esequia Sauter e Greice Lorenzetti.

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

À CAPES, Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Ensino Superior, pelo apoio financeiro.

Conteúdo

AGRADECIMENTOS	iv
LISTA DE FIGURAS	vii
LISTA DE SÍMBOLOS	ix
LISTA DE ABREVIATURAS	xi
RESUMO	xii
ABSTRACT	xiii
1 INTRODUÇÃO	1
1.1 Objetivo do trabalho	3
1.2 Justificativas	3
1.3 Descrição dos próximos capítulos	4
2 ESTRUTURA DE UMA CHAMA	6
2.1 Conceito de camada limite	7
2.2 Tipos de chamas	9
3 FORMULAÇÃO	12
3.1 Algumas relações	12
3.1.1 Relação fração de massa e da mistura	13
3.1.2 Relação entalpia e temperatura	17
3.1.3 Relação temperatura e fração de mistura	18
3.2 Equações governantes da hidrodinâmica de uma chama	20
4 ESTUDO ANALÍTICO E NUMÉRICO	22
4.1 Soluções analíticas para a velocidade e fração de mistura	22
4.2 Estudo numérico	28

4.2.1	Adimensionalização das equações governantes	30
4.2.2	Obtenção da malha computacional apropriada	32
4.2.3	Discretização das equações governantes	33
4.2.4	Esquemas em diferenças finitas	34
4.2.5	Condições iniciais e de contorno	36
4.2.6	Algoritmo de solução via Gauss-Seidel	37
4.3	Algumas considerações sobre chamas laminares e turbulentas	37
5	RESULTADOS	40
5.1	Comparação das soluções analítica, numérica e experimental para o jato de propano	41
5.1.1	Comparação das soluções ao longo do eixo	41
5.1.2	Comparação das soluções nas secções radiais	42
5.2	Comparação das soluções analítica, numérica e experimental para a chama Sandia C	46
5.2.1	Comparação dos resultados ao longo do eixo	47
5.2.2	Comparação dos resultados nas secções radiais	48
5.3	Temperatura ao longo do eixo de simetria e secções radiais	52
5.4	Frações mássicas de CH_4, O_2, CO_2 e H_2O	55
6	CONCLUSÕES	65
	BIBLIOGRAFIA	67
	APÊNDICE A	73
A.1	Crítérios de convergência do método de Gauss-Seidel	73
A.1.1	Crítério de Sassenfeld	74
A.1.2	Crítério das linhas	77

Lista de Figuras

Figura 2.1	Chama difusiva laminar	6
Figura 2.2	Núcleo potencial de uma chama	7
Figura 2.3	Jato livre laminar bidimensional	8
Figura 4.1	Fluxograma do código desenvolvido	29
Figura 4.2	Domínio de estudo	33
Figura 5.1	Fração de mistura ao longo da linha de centro para o jato de propano	42
Figura 5.2	Fração de mistura ao longo do raio em $x/D = 4$ para o jato de propano	43
Figura 5.3	Fração de mistura ao longo do raio em $x/D = 15$ para o jato de propano	44
Figura 5.4	Fração de mistura ao longo do raio em $x/D = 30$ para o jato de propano	44
Figura 5.5	Fração de mistura ao longo do raio em $x/D = 50$ para o jato de propano	45
Figura 5.6	Jato estabilizado por uma chama Pilot	46
Figura 5.7	Fração de mistura ao longo do eixo	47
Figura 5.8	Fração de mistura ao longo do raio em $x/D = 15$ para chama Sandia C	48
Figura 5.9	Fração de mistura ao longo do raio em $x/D = 30$ para chama Sandia C	49
Figura 5.10	Fração de mistura ao longo do raio em $x/D = 45$ para chama Sandia C	49
Figura 5.11	Fração de mistura ao longo do raio em $x/D = 60$ para chama Sandia C	50
Figura 5.12	Temperatura ao longo do eixo de simetria para chama Sandia C	52
Figura 5.13	Temperatura nas secções radiais: (superior) $x/D = 15$, (inferior) $x/D = 30$ para chama Sandia C	53

Figura 5.14	Temperatura nas secções radiais: (superior) $x/D = 45$, (inferior) $x/D = 60$ para chama Sandia C	54
Figura 5.15	Fração mássica de CH_4 ao longo do eixo de simetria para a chama Sandia C	56
Figura 5.16	Fração de massa de CH_4 em $x/D = 15$	57
Figura 5.17	Fração de massa de CH_4 em $x/D = 30$	57
Figura 5.18	Fração mássica de O_2 ao longo do eixo de simetria	58
Figura 5.19	Fração mássica de O_2 em $x/D = 15$	60
Figura 5.20	Fração mássica de O_2 em $x/D = 30$	60
Figura 5.21	Fração mássica de O_2 em $x/D = 45$	61
Figura 5.22	Fração mássica de O_2 em $x/D = 60$	61
Figura 5.23	Fração de mistura de CO_2 ao longo do eixo de simetria	62
Figura 5.24	Fração mássica de CO_2 em $x/D = 45$	62
Figura 5.25	Fração mássica de CO_2 em $x/D = 60$	63
Figura 5.26	Fração mássica de H_2O : (superior) $x/D = 15$, (inferior) $x/D = 30$	64

LISTA DE SÍMBOLOS

A	área
C_p	calor específico a pressão constante
C_{pi}	calor específico da espécie i
D_B	diâmetro do bocal
d_q	transferência de calor
dU	variação da energia interna
dw_r	trabalho realizado pelo atrito
H	entalpia específica
H_i	entalpia específica da espécie i
$H_{i,b}$	entalpia específica da espécie i no estado queimado
$H_{i,ref}$	entalpia na condição de temperatura de referência
$H_{i,u}$	entalpia específica da espécie i no estado não queimado
m_i	massa de todas as moléculas da espécie i
m_s	massa total do sistema
n_i	número de moles da espécie i
pdV	trabalho devido à variação volumétrica
Q	quantidade de calor
Q_{ref}	quantidade de calor na condição de temperatura de referência
R	constante universal dos gases
Re	número de Reynolds
Sc	número de Schimdt
T	temperatura
T_b	temperatura no estado queimado
T_{ref}	temperatura de referência
T_u	temperatura no estado não queimado
u	velocidade na direção de x

U	energia interna
U_i	energia interna da espécie i
U_m	velocidade média na saída do bocal
v	velocidade na direção de y
V	volume
$V.C$	volume de controle
W_i	massa molecular da espécie i
$Y_{i,b}$	fração de massa da espécie i no estado queimado
Y_i	fração de massa da espécie i
$Y_{i,u}$	fração de massa da espécie i no estado não queimado
Z	fração de mistura
Z_{st}	fração de mistura na condição estequiométrica
ψ	função corrente
ν	viscosidade
ν_0	viscosidade cinemática
ν_i	coeficiente estequiométrico da espécie i
ζ	coordenada de similaridade na direção de x
η	coordenada de similaridade na direção de y
ρ	massa específica
τ_c	escala de tempo de reação química
τ_t	escala de tempo turbulento

LISTA DE ABREVIATURAS

EDPs	Equações Diferenciais Parciais
MDF	Método de Diferenças Finitas
PVIF	Problema de Valor Inicial e de Fronteira
TVD	Total Variational Diminishing

RESUMO

Neste trabalho apresenta-se um estudo numérico de uma chama difusiva. Os resultados numéricos são validados com resultados analíticos e experimentais disponíveis na literatura. Com o intuito de obter uma solução de modo simples e com baixo esforço computacional, adotamos o método de diferenças finitas com um sistema não oscilatório do tipo TVD (Total Variational Diminishing) baseado na formulação incompressível das equações reativas de Navier- Stokes, considerando-se um domínio retangular e condições de contornos dos tipos Dirichlet e Neumann. Para a comparação dos resultados foram apresentadas a fração de mistura (combustível-ar), frações mássicas dos reagentes (combustível, oxigênio), frações mássicas dos produtos (dióxido de carbono e vapor d'água) e temperatura.

ABSTRACT

This work presents a numerical study of a diffusive flame. The numerical results are validated with analytic values and experimental data found in the literature. In order to obtain a simple and with low computational cost solution, the finite difference based on a non oscillatory TVD, Total Variation Diminishing, scheme with the incompressible formulation, for the reacting Navier-Stokes equations, is solved in a rectangular domain with Dirichlet and Neumann boundary conditions. To compare the results, the mixture fraction, the mass fractions of reactants and products and the temperature are shown.

1 INTRODUÇÃO

A combustão é uma das mais velhas tecnologias da humanidade; tem sido provavelmente usada por mais de um milhão de anos. Nos dias atuais 90% da energia utilizada no mundo provém da combustão. Por este motivo o estudo nesta área é realmente importante [51]. Um olhar rápido a nossa volta mostra a importância da combustão na vida diária. A combustão é utilizada para produzir energia elétrica, para a energia que aciona os meios de transporte, nas indústrias de produção de energia, na propulsão de jatos e foguetes, em sistemas de prevenção contra incêndios, no controle de poluentes e no processamento de materiais.

Além dos benefícios a combustão gera efeitos nocivos principalmente na emissão de poluentes para a atmosfera. Importa por isso conhecer os processos de combustão por dois motivos fundamentais de ordem prática: obtenção de processos de elevada eficiência energética e econômica e saber controlar a combustão de modo a minimizar os efeitos negativos das emissões de poluentes no ambiente. Há ainda outros motivos para estudar a combustão como o desafio intelectual que esta ciência proporciona por integrar todas as ciências térmicas e a química e trazê-las para o campo da prática. A combustão é um fenômeno complexo, porque depende de muitas variáveis físicas, agregando conceitos da Mecânica de Fluidos, Termodinâmica e Química [47].

As chamas difusivas são usadas em indústrias de queimadores a óleo e a gás, motores a diesel e na maioria das turbinas a gás devido à facilidade com que tais chamas podem ser controladas e podem ser aplicadas na maioria dos sistemas de combustão [26]. Uma vez iniciadas, elas tendem a permanecer ancoradas ao queimador sob as mais variadas circunstâncias, estabilizando-se naturalmente na camada cisalhante entre o combustível e o oxidante por não poderem se propagar de um lado para o outro, enquanto que as pré-misturadas têm sua velocidade de propagação característica e, quando se alimentam da mistura fresca (gases não

queimados), elas tendem a se propagar para dentro do tubo (queimador) ou apagar. Para iniciar uma chama difusiva algum tipo de agente ignitor, uma faísca elétrica ou uma chama piloto, deve ser aplicada à camada de mistura.

A queima em chamas sem pré-mistura é um fenômeno de combustão controlado por difusão, escoamento e outros processos físicos da mistura. Gradientes de espécies e de temperatura aparecem na região causando condução de calor e difusão de espécies para regiões de temperatura e concentrações mais baixas [31].

Simulações numéricas são uma das principais ferramentas para analisar, e consequentemente otimizar processos de combustão. Infelizmente, a alta complexidade dos tipos de chamas usados em combustão industrial ultrapassam até mesmo as mais modernas instalações computacionais, onde se deseja fazer simulações envolvendo reações químicas para altos números de Reynolds. Na simulação do processo de combustão várias escalas de tempo e comprimento dever ser levados em conta, estas escalas estão relacionadas ao tempo, comprimento, velocidade, energia, entre outros [24]. Cientistas desenvolveram vários métodos para diminuir as elevadas exigências de transformação para simular a combustão turbulenta. Uma das formas mais eficazes consiste na modelagem de uma complexa chama turbulenta como um conjunto de pequenas escalas de chamas laminares. Esta técnica é conhecida sob o nome de "flamelet", inicialmente introduzida por Williams [52] e após melhorada por Liew et al. [30], conforme Peters [37].

Na maioria dos mecanismos práticos de combustão o escoamento é turbulento. A adição de combustão à turbulência aumenta a complexidade e abre novos campos de investigação [32]. A aceleração do processo de combustão e de troca de calor, além de aumentar em muito a taxa de difusão de um escoamento [34], é uma das implicações da turbulência. Do ponto de vista de aplicações, esta é, talvez, a característica mais importante da turbulência. O que distingue um escoamento turbulento de um laminar é a rápida mistura dos elementos de fluido. No experimento de Osborne Reynolds [27] a injeção de corante em um escoamento de água

em um duto circular, observaram-se diferentes regimes no escoamento iniciando pelo laminar, onde as camadas de fluidos deslocaram-se umas sobre as outras como se fossem lâminas. Com o aumento da velocidade aumentam-se as instabilidades no escoamento, até que o corante se mistura totalmente com a água. É este movimento que causa a mistura, o responsável pela transferência de quantidade de movimento e de massa, na direção transversal do escoamento. Reynolds mostrou que a transição laminar - turbulento era caracterizada com o então denominado hoje, número de Reynolds, mas que dependeria também das condições de entrada e rugosidade do tubo por onde passa o escoamento e também dos ruídos ou vibrações do ambiente as quais o tubo está sujeito [34].

As chamadas a baixo ou Reynolds moderado serão o foco deste trabalho, pois elas são de grande importância para um bom entendimento no estudo das chamadas turbulentas.

1.1 Objetivo do trabalho

O objetivo deste trabalho consiste em simular numericamente uma chama difusiva, através da solução das equações reativas de Navier-Stokes, que representam o escoamento de combustível e ar. A simulação computacional considera um plano bidimensional e os resultados obtidos numericamente são comparados com uma solução analítica e com dados experimentais disponíveis com a finalidade de validar a mesma.

1.2 Justificativas

Apesar da existência de algumas fontes de energia alternativas, a queima de uma variedade de combustíveis é o meio mais utilizado de produção de energia na atualidade, e ainda será por muitos anos. Devido a tais importâncias, pesquisadores

buscam um entendimento mais detalhado de sistemas envolvendo misturas, dinâmica de fluídos e reações químicas nos processos de combustão, havendo a necessidade crescente de técnicas mais sofisticadas de diagnósticos. A análise assintótica de uma chama laminar tem grande interesse especialmente para chamas turbulentas.

Estes conceitos não são novos, estes estudos e aplicações vêm crescendo e aperfeiçoando-se durante as duas últimas décadas [37, 36]. Chamas turbulentas são de maior interesse nas aplicações, mas a sua estrutura utiliza conceitos de chamas laminares; em suma, um bom conhecimento dos conceitos de chamas laminares serve de suporte para entender problemas mais complexos.

Trabalharemos com uma chama difusiva na qual um combustível gasoso e o ar misturam-se a nível molecular na região de combustão, ou seja, na zona de reação. Alguns autores vêm fornecendo soluções analíticas com existência de comprovação experimental, e o objetivo de nosso trabalho é reproduzir numericamente estes resultados; assim, estudaremos sistemas de equações (baseadas nas equações de Navier-Stokes), onde a solução deste sistema de equações será aproximada pelo método de diferenças finitas. Finalmente, os resultados da simulação serão validados com a solução analítica e dados experimentais, visando obter um melhor entendimento da complexidade envolvida em chamas difusivas. Nos próximos capítulos os mecanismos necessários para a simulação de uma chama difusiva e sua validação serão discutidos detalhadamente.

1.3 Descrição dos próximos capítulos

No capítulo 2 será apresentada uma breve abordagem sobre a estrutura de uma chama, a classificação das chamas com relação ao regime de mistura e suas principais características. O conceito de camada limite é admitido como válido para a simulação numérica [35]. As hipóteses necessárias para o desenvolvimento da

chama difusiva serão fatores importantes neste capítulo para o desenvolvimento da simulação numérica.

No capítulo 3 será apresentada uma descrição detalhada da formulação no processo de combustão: fração de massa, conservação da energia, temperatura e fração de mistura e por fim chega-se nas equações governantes que são descritas pelas equações reativas de Navier-Stokes (continuidade, quantidade de movimento e fração de mistura).

O capítulo 4 inicia com as formulações analíticas para a velocidade e fração de mistura partindo das equações de Navier-Stokes. Logo após as equações governantes são discretizadas por diferenças finitas com um tipo de malha apropriada e o algoritmo que produz a solução numérica é descrito. Na simulação numérica das equações de Navier-Stokes para escoamentos incompressíveis é utilizado um esquema não oscilatório do tipo TVD (Total Variational Diminishing) afim de obtermos resultados numéricos mais apurados para os termos advectivos.

No capítulo 5 os resultados são apresentados em gráficos com suas principais características comparadas com resultados analíticos e experimentais disponibilizados pela Sandia National Laboratories [50]. Dois casos são estudados neste trabalho, um jato de propano e a Chama Sandia C, onde são obtidos e analisados os perfis de velocidade e fração de mistura ao longo da chama.

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

2 ESTRUTURA DE UMA CHAMA

A teoria da combustão representa uma grande gama de fenômenos naturais que podem ser deduzidos via alguns princípios fundamentais [5]. Os modelos de combustão podem se tornar muito complexos; como por exemplo o mecanismo de reação do iso-octano (principal componente de gasolina) inclui 3.600 reações elementares entre 860 espécies químicas. O mecanismo do metano contém mais de 300 reações elementares e mais de 30 espécies [10]. Teoricamente, para cada reação seria necessário resolver uma equação diferencial. Desta forma, mecanismos de reação simplificados são normalmente utilizados [29].

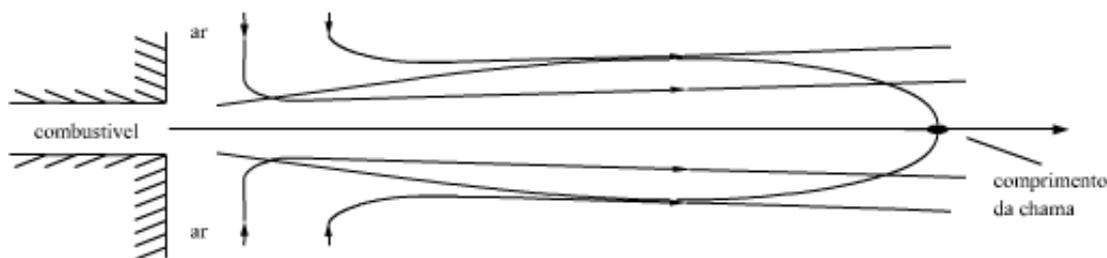


Figura 2.1: Chama difusiva laminar

Normalmente, a velocidade do jato é tão grande que este torna-se turbulento e a mistura turbulenta determina o escoamento [11]. Desejamos obter uma solução via similaridade para um jato circular a partir da fenda de um queimador. A figura 2.1 ilustra uma chama difusiva. O jato emitido de uma pequena fenda dentro de uma parede arrasta o fluido que o circunda. Tanto a velocidade como a fração de mistura de combustível e oxidante decrescem conforme aumenta a distância em relação ao ponto de injeção [23]. A camada limite que se desenvolve na parede é negligenciada por simplicidade. Então, o fluido carregado dirige-se também na direção normal do jato, conforme a distância axial aumenta.

Na figura 2.1 observa-se como a propagação do jato lançado livremente num ambiente, após deixar o bocal, produz uma mistura com o ar que esta em repouso na vizinhança do jato, sofrendo a ação das forças de atrito interno e o fluido que o circunda. A largura desta região inicial de mistura cresce continuamente, e a velocidade longitudinal do jato na linha de centro não é afetada pela mistura, sendo praticamente igual à velocidade de saída do jato no centro. Esta zona de desenvolvimento inicial do jato é denominada de núcleo potencial conforme mostra a figura 2.2. Após esta região, o espalhamento radial do fluido é maior e a velocidade longitudinal do jato cai fortemente conforme aumenta a sua distância do bocal. Isto ocorre devido ao aumento da transferência de quantidade de movimento com o fluido que é posto em movimento. A pressão permanece praticamente constante no jato e no meio circundante [41].

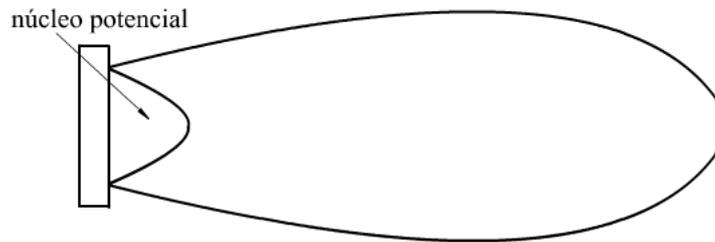


Figura 2.2: Núcleo potencial de uma chama

2.1 Conceito de camada limite

O conceito de camada limite foi introduzido por Ludwig Prandtl em 1904 [23]. A partir de evidências experimentais Prandtl observou que, para um número de Reynolds suficientemente elevado, os efeitos viscosos em um escoamento sobre uma superfície ficam confinados a uma fina região próxima a esta superfície.

O fluxo do jato em um orifício é um exemplo do movimento onde é possível a aplicação da teoria de camada limite. Problemas envolvendo jatos que emergem

ao longo de um fenda estreita e misturam-se com um fluido foram resolvidos por H. Schlichting [46] e W. Bickley [3]. No presente trabalho vamos desenvolver analiticamente o caso laminar; o turbulento pode ser analisado matematicamente de forma semelhante, considerando a viscosidade turbulenta.

O jato emergindo traz consigo algumas das imediações do fluido que estava originalmente em repouso, devido ao atrito desenvolvido em seu contorno. O resultado qualitativo das linhas de corrente é mostrado na figura 2.3

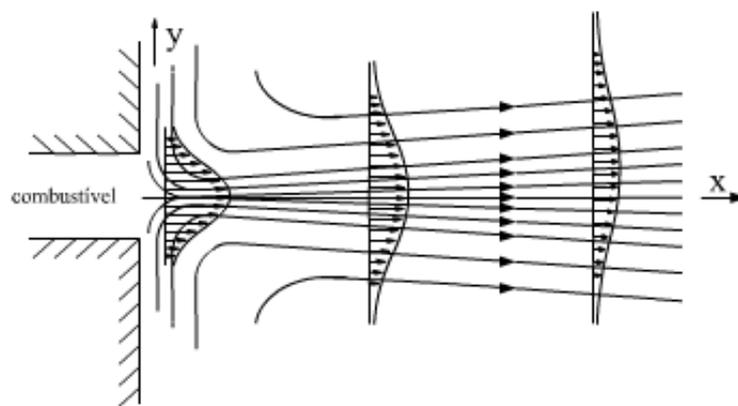


Figura 2.3: Jato livre laminar bidimensional

Uma chama difusiva ideal consiste de uma zona de reação exotérmica infinitamente pequena que separa o fluxo de combustível a partir do fluxo oxidante, isto é, em chamas difusivas ideais o combustível e o oxidante são separados por uma interface.

Esta difusão da chama na zona de reação ocorre devido aos gradientes que são fortemente regulados pelo fluxo e pela mistura. Devido à difusão, fluxo, mistura e transferência de calor desempenham um papel importante e o estudo de chamas difusivas logicamente envolve estudos de camada limite, e de transferência de calor e massa.

Neste trabalho assume-se que a hipótese de camada limite seja válida e a pressão seja aproximadamente constante [35]. Nós denotamos por x a coordenada no eixo central do jato e y como a coordenada normal a este. As componentes da velocidade são representadas por u (velocidade na direção de x) e v (velocidade na direção de y).

2.2 Tipos de chamas

A estrutura e as propriedades de uma chama dependem do tipo de mistura entre o combustível e o oxidante. Quanto ao tipo de mistura as chamas podem ser divididas em duas classes [20]: chamas do tipo pré-misturadas, nas quais o combustível gasoso e o ar são misturados antes da ignição, e chamas sem pré-mistura, nas quais o combustível gasoso e o ar encontram-se no instante da combustão, ou seja, na zona de reação. A esta segunda classe de chamas os autores Burke e Schumann têm aplicado o termo "Chamas Difusivas" fornecendo uma solução analítica com existência de comprovação experimental [7]. Burke e Schumann estabeleceram, em 1928, um modelo de chama sem pré-mistura baseado na hipótese de que o tempo de mistura é muito pequeno, o que implica em uma cinética muito rápida e uma espessura de chama muito fina.

Uma chama difusiva pode ser dividida em uma região contendo combustível e uma outra região com oxidante; a frente de chama é justamente onde os dois se encontram e reagem com taxa estequiométrica. Exemplos de chamas de difusão são: "flares" de poços de petróleo, velas, queima de gotas e sprays, queima de vapores de combustível, camadas cisalhantes reativas, interações entre vórtices e chamas, chamas de contra-fluxo, dentre outras [27, 35]. Diferente das chamas pré-misturadas, as chamas difusivas não possuem uma velocidade característica (uniforme) de queima estabelecida.

No estudo de chamas difusivas tem-se normalmente interesse na sua estrutura interna, nas suas taxas de energia liberada, nas taxas de transporte de combustível e do oxidante na região cisalhante (taxa de queima) e nas condições necessárias para sua existência e extinção [35]. As taxas de transporte de combustível / oxidante acontecem de modo que os reagentes difundem-se das regiões de alta concentração para a região da chama, onde desaparecem devido às reações, diminuindo assim suas concentrações, enquanto que os produtos difundem-se para fora e para dentro da chama onde possuem baixa concentração. A queima em chamas sem pré-mistura é um fenômeno de combustão controlado por difusão, escoamento e outros processos físicos da mistura. Gradientes de espécies e de temperatura aparecem na distribuição espacial causando condução de calor e difusão de espécies para regiões de temperatura e concentrações mais baixas [27].

Entre os diversos modelos de chama laminar, o baseado na formulação assintótica apresentado por Zel'dovich [53] tem uma abordagem simplificada e de fácil compreensão dos principais mecanismos físicos que influenciam na sua propagação e na sua estrutura. Esta formulação considera que a reação é simplificada na forma de uma única reação global, irreversível, espessa por



Chamas laminares são caracterizadas por baixo número de Reynolds e tipicamente baixo fluxo de quantidade de movimento; conseqüentemente, os efeitos de flutuação são tipicamente importantes [8].

Algumas hipóteses são necessárias para o desenvolvimento deste modelo, para uma chama laminar:

- A pressão é constante;
- A reação global dada na equação (2.1) permite supor que o número de moles não varia durante a reação;

- O calor específico C_p pode ser considerado constante
- A chama é bidimensional e estacionária;
- Os efeitos de transferência de calor e forças externas são negligenciáveis;
- A difusão causada por gradientes de pressão é desprezível;
- O gás é uma mistura binária no qual ocorre a reação unimolecular Reagente \longrightarrow Produto.

As chamas difusivas são estabelecidas por algum processo de ignição local na camada limite livre entre o combustível e oxidante, não tendo velocidade de propagação e limite de flamabilidade bem definidos. A principal característica de uma chama não pré-misturada é sua forma e particularmente sua altura/comprimento. O comprimento da chama indica o quão eficientemente o ar está sendo arrastado para a chama: quanto maior a quantidade de ar arrastado mais cedo o combustível é consumido. Em geral, o comprimento da chama é apresentado na forma adimensionalizada (usualmente com o diâmetro do queimador) uma vez que isto facilita não só a comparação de resultados de vários autores como também o estabelecimento de correlações para estas grandezas.

3 FORMULAÇÃO

3.1 Algumas relações

Em muitos fornos industriais, combustores e dispositivos de propulsão, é necessário prever a forma e a estrutura da chama resultante da injeção de combustível gasoso em uma atmosfera oxidante. A fim de alcançar uma boa capacidade preditiva, uma chama laminar difusiva deve ser modelada [49].

Neste trabalho, vamos considerar inicialmente um jato laminar horizontal a baixo número de Mach, mas rápidas taxas de reação química; vamos assumir que as condições de camada limite sejam válidas, que a pressão seja aproximadamente constante e que os efeitos de flutuação sejam desprezíveis. Sob estas condições, a descrição da formulação da chama é mostrada a seguir.

Em geral, a estrutura de chamas não pré-misturadas são descritas por um escalar conservativo, que é quimicamente independente (não-reagente). Esta variável é chamada de fração de mistura (Z) [38, 28]. Z é um escalar conservativo que calcula o nível de mistura entre o oxigênio e o combustível que muda devido a difusão e convecção, mas não reagem. É conveniente que Z esteja numa escala de 0 a 1. Esta definição de fração de mistura variável não está diretamente relacionada com qualquer combinação de escalares reativos, mas definida a partir de uma equação de conservação com um coeficiente arbitrário de difusão e condições de fronteira [39] adequadas.

3.1.1 Relação fração de massa e da mistura

A massa m_i de todas as moléculas das espécies i está relacionada com o número de moles por

$$m_i = W_i n_i \quad (3.1)$$

onde W_i é o massa molecular da espécie i e n_i é o número de moles.

A massa total para todas as espécies na mistura é

$$m = \sum_{i=1}^n m_i. \quad (3.2)$$

A fração molar é uma maneira de representar a concentração das inúmeras espécies químicas presentes na mistura. Para cada componente i , a fração molar X_i é o número de moles n_i dividido pelo número de moles do sistema, n_s .

$$X_i = \frac{n_i}{n_s}. \quad (3.3)$$

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

$$Y_i = \frac{m_i}{m_s}, \quad i = 1, 2, \dots, n. \quad (3.4)$$

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

$$Y_i = \frac{W_i}{W} X_i \quad (3.5)$$

e a fração de massa dos elementos

$$m_j = \sum_{i=1}^n \frac{a_{ij} W_j}{W_i} m_i. \quad (3.6)$$

com a fração de massa do elemento j representada por

$$Z_j = \frac{m_j}{m} = \sum_{i=1}^n \frac{a_{i,j} W_i Y_i}{W_i} = \frac{W_i}{W} \sum_{i=1}^n a_{i,j} X_i \quad j = 1, 2, \dots, n. \quad (3.7)$$

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

$$\frac{dn_i}{\nu_i} = \frac{dn_1}{\nu_1} \quad (3.8)$$

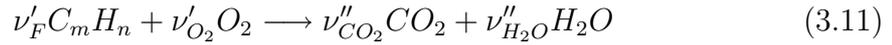
Com a equação 3.1 a relação entre as massas parciais torna-se:

$$\frac{dm_i}{\nu_i W_i} = \frac{dm_1}{\nu_1 W_1}. \quad (3.9)$$

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

$$\frac{dY_i}{\nu_i W_i} = \frac{dY_1}{\nu_1 W_1}. \quad (3.10)$$

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



onde os coeficientes estequiométricos são

$$\nu'_F = 1, \quad \nu'_{O_2} = m + \frac{n}{4}, \quad \nu''_{CO_2} = m, \quad \nu''_{H_2O} = \frac{n}{2} \quad (3.12)$$

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

$$\left. \frac{n_{O_2,u}}{n_{F,u}} \right|_{st} = \frac{\nu'_{O_2}}{\nu'_F} \quad (3.13)$$

ou em termos de fração de massa

$$\left. \frac{Y_{O_2,u}}{Y_{F,u}} \right|_{st} = \frac{\nu'_{O_2} W_{O_2}}{\nu'_F W_F} = \nu \quad (3.14)$$

onde ν é chamado de razão de massa estequiométrica.

Integrando a equação (3.10), substituindo $i = O_2$ e $1 = F$ entre o estado inicial não queimado (subscrito u) e algum estado posterior, temos as seguintes relações:

$$\int_{O_2,u}^{O_2} \frac{dY_{O_2}}{\nu'_{O_2} W_{O_2}} = \int_{F,u}^F \frac{dY_F}{\nu'_F W_F}; \quad (3.15)$$

logo,

$$Y_{O_2} - Y_{O_2,u} = \nu(Y_F - Y_{F,u}). \quad (3.16)$$

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

$$Y_{F,u} = Y_{F,1}Z \quad (3.17)$$

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

$$Y_{O_2,u} = Y_{O_2,2}(1 - Z) \quad (3.18)$$

onde $Y_{O_2,2}$ corresponde à fração de massa na corrente de oxigênio (não misturado).

Introduzindo (3.17) e (3.18) em (3.16) obtemos a fração de mistura

$$Z = \frac{\nu Y_F - Y_{O_2} + Y_{O_2,2}}{\nu Y_{F,1} + Y_{O_2,2}}. \quad (3.19)$$

Na mistura estequiométrica, $Y_{O_2,u} = 0$ e $Y_{F,u} = 0$; logo pela relação (3.16) temos $Y_{O_2} = \nu Y_F$ que substituindo na equação (3.19) obtemos a fração de mistura estequiométrica

$$Z_{st} = \left[1 + \frac{\nu Y_{F,1}}{Y_{O_2,2}} \right]^{-1}. \quad (3.20)$$

Se $Z < Z_{st}$ (Z_{st} é a fração de mistura estequiométrica), tem-se pouco combustível e a mistura é chamada de pobre. Então, a combustão termina com todo o combustível consumido, $Y_{F,b} = 0$ na queima gasosa (suscrevemos b). O restante da fração de massa do oxigênio na queima é calculado de (3.18) onde $Y_{F,b} = 0$. Temos, então

$$Y_{O_2,b} = Y_{O_2,2} \left(1 - \frac{Z}{Z_{st}} \right) \quad Z < Z_{st}. \quad (3.21)$$

Similarmente se $Z > Z_{st}$ tem-se uma mistura rica e a combustão termina com todo o oxigênio consumido, $Y_{O_2,b} = 0$, conduzindo a

$$Y_{F,b} = Y_{F,1} \frac{Z - Z_{st}}{1 - Z_{st}} \quad Z \geq Z_{st}. \quad (3.22)$$

Para os hidrocarbonetos considerados, os elementos de fração de massa resultantes na queima da mistura são

$$Z_C = m \frac{W_C Y_{F,u}}{W_F} \quad (3.23)$$

$$Z_H = n \frac{W_H Y_{F,u}}{W_F} \quad (3.24)$$

$$Z_O = Y_{O_2,u}. \quad (3.25)$$

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

$$Z_C = m \frac{W_C}{W_F} Y_{F,b} + \frac{W_C}{W_{CO_2}} Y_{CO_2,b} \quad (3.26)$$

$$Z_H = n \frac{W_H}{W_F} Y_{F,b} + \frac{W_H}{W_{H_2O}} Y_{H_2O,b} \quad (3.27)$$

$$Z_O = 2 \frac{W_O}{W_{O_2}} Y_{O_2,b} + 2 \frac{W_O}{W_{CO_2}} Y_{CO_2,b} + \frac{W_O}{W_{H_2O,b}} Y_{H_2O,b}. \quad (3.28)$$

Isto produz com (3.17) e $Y_{F,b} = 0$ para $Z < Z_{st}$:

$$Y_{CO_2,b} = Y_{CO_2,st} \frac{Z}{Z_{st}}$$

$$Y_{H_2O,b} = Y_{H_2O,st} \frac{Z}{Z_{st}} \quad (3.29)$$

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

$$Y_{CO_2,b} = Y_{CO_2,st} \frac{1 - Z}{1 - Z_{st}}$$

$$Y_{H_2O,b} = Y_{H_2O,st} \frac{1 - Z}{1 - Z_{st}} \quad (3.30)$$

onde

$$Y_{CO_2,st} = Y_{F,1} Z_{st} \frac{m W_{CO_2}}{W_F} \quad (3.31)$$

$$Y_{H_2O,st} = Y_{F,1} Z_{st} \frac{n W_{H_2O}}{2 W_F}. \quad (3.32)$$

3.1.2 Relação entalpia e temperatura

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

$$dU + pdV = dH - Vdp = dq + dw_R. \quad (3.33)$$

onde dq é a transferência de calor na parte circundante, dw_R é o trabalho realizado pelo atrito, dU é a variação da energia interna e pdV é o trabalho devido à variação volumétrica. A entalpia específica H está associada a energia interna específica U por

$$H = U + pV = U + \frac{RT}{W} \quad (3.34)$$

onde $V = 1/\rho$ é o volume específico.

Em um sistema de vários componentes químicos, a energia interna específica e a entalpia específica são a soma do peso mássico pela quantidade específica de todas as espécies.

$$U = \sum_{i=1}^n Y_i U_i, \quad H = \sum_{i=1}^n Y_i H_i. \quad (3.35)$$

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

$$H_i = U_i + \frac{RT}{W_i} \quad (3.36)$$

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

$$H_i = H_{i,ref} + \int_{T_{ref}}^T c_{pi} dT. \quad (3.37)$$

onde $C_{pi} = W_i c_{pi}$ é o calor específico a pressão constante e $H_{i,ref}$ é a entalpia de referência na condição da temperatura de referência T_{ref} . Esta temperatura pode ser escolhida arbitrariamente; frequentemente $T_{ref} = 0$ ou $T_{ref} = 298.16K$ são usados. A entalpia molar parcial torna-se [35]

$$H = W_i H_i. \quad (3.38)$$

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

$$c_p = \sum_{i=1}^n Y_i c_{pi}. \quad (3.39)$$

As entalpias de referência dos produtos da combustão como o CO_2 e o H_2O são tipicamente negativas. A dependência da temperatura de C_{pi} e H_i pode ser calculada pelos polinômios da NASA documentado em um artigo por A. Burcat, 1984 [6].

3.1.3 Relação temperatura e fração de mistura

Vamos considerar a primeira lei da termodinâmica para um sistema adiabático ($dq = 0$) na condição de pressão constante ($dp = 0$) e desconsiderar o trabalho realizado pelo atrito ($dw_R = 0$). A equação (3.33) com $dH = 0$, pode ser integrada do estado não queimado ao estado queimado, resultando

$$H_u = H_b \quad (3.40)$$

ou

$$\sum_{i=1}^n Y_{i,u} H_{i,u} = \sum_{i=1}^n Y_{i,b} H_{i,b}. \quad (3.41)$$

Com a dependência de temperatura e a entalpia específica, a equação (3.37) pode ser escrita como

$$\sum_{i=1}^n (Y_{i,u} - Y_{i,b}) h_{i,ref} = \int_{T_{ref}}^{T_b} c_{p,b} dT - \int_{T_{ref}}^{T_u} c_{p,u} dT \quad (3.42)$$

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

$$c_{p,b} = \sum_{i=1}^n Y_{i,b} c_{pi}(T), \quad c_{p,u} = \sum_{i=1}^n Y_{i,u} c_{pi}(T). \quad (3.43)$$

Para uma reação global de passo único o termo esquerdo de (3.42) é calculado integrando (3.10); assim

$$(Y_{i,u} - Y_{i,b}) \nu_F W_F = (Y_{F,u} - Y_{F,b}) \nu_i W_i \quad (3.44)$$

tal que

$$\sum_{i=1}^n (Y_{i,u} - Y_{i,b}) h_{i,ref} = \frac{(Y_{F,u} - Y_{F,b})}{\nu_F W_F} \sum_{i=1}^n \nu_i W_i h_{i,ref} \quad (3.45)$$

onde é conveniente a definição de calor da combustão como

$$Q = - \sum_{i=1}^n \nu_i W_i h_i = - \sum_{i=1}^n \nu_i H_i. \quad (3.46)$$

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

$$Q_{ref} = - \sum_{i=1}^n \nu_i H_{i,ref} \quad (3.47)$$

Por simplicidade, considere $T_u = T_{ref}$ e assumimos $c_{p,b}$ aproximadamente constante. Para a combustão no ar, a contribuição do nitrogênio é dominante no cálculo de $c_{p,b}$. A aproximação do calor específico da queima gasosa na mistura estequiométrica é $c_p = 1.40 kJ/kgK$ [40]. Assumindo c_p constante e $Q = Q_{ref}$, a temperatura adiabática da chama para uma mistura ($Y_{F,b} = 0$) é calculada por 3.42 e 3.45 com $\nu_F = -\nu'_F$ e resulta em

$$T_b - T_u = \frac{Q_{ref} Y_{F,u}}{c_p \nu'_F W_F}. \quad (3.48)$$

Para uma mistura rica, a relação 3.44 deve ser substituída por

$$Y_{i,u} - Y_{i,b} = (Y_{O_2,u} - Y_{O_2,b}) \frac{\nu_i W_i}{\nu_{O_2} W_{O_2}} \quad (3.49)$$

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

$$T_b - T_u = \frac{Q_{ref} Y_{O_2,u}}{c_p \nu'_{O_2} W_{O_2}}. \quad (3.50)$$

As equações (3.48) e (3.50) podem ser expressas em termos da fração de mistura pela introdução de (3.17) e (3.18) e escrevendo a temperatura da mistura antes da queima por

$$T_u(Z) = T_2 - Z(T_2 - T_1) \quad (3.51)$$

onde T_2 é a temperatura da corrente de oxigênio e T_1 a temperatura na corrente de combustível. A equação (3.51) descreve a mistura das duas correntes com c_p

assumido como constante. As equações (3.48) e (3.50) resultam na forma

$$T_b(Z) = \begin{cases} T_u(Z) + \frac{Q_{ref} Y_{F,1}}{c_p \nu'_F W_F} Z & \text{para } Z \leq Z_{st} \\ T_u(Z) + \frac{Q_{ref} Y_{O_2,2}}{c_p \nu'_{O_2} W_{O_2}} (1 - Z) & \text{para } Z \geq Z_{st} \end{cases} \quad (3.52)$$

A seguir apresenta-se as equações governantes de uma chama difusiva.

3.2 Equações governantes da hidrodinâmica de uma chama

As equações de Navier-Stokes descrevem uma grande gama de fenômenos em mecânica dos fluidos. No entanto, estas apresentam soluções analíticas para apenas alguns casos particulares, como problemas de escoamento de fluido sem considerar a viscosidade, irrotacionais e isocóricas (escoamento potencial), problemas de escoamento viscoso em canais retilíneos, etc [18]. É comum dizer que as equações de Navier-Stokes resolvem quase a totalidade de problemas em Mecânica dos Fluidos, o problema é resolver estas equações. Dessa forma, a solução dessas equações é obtida em geral através de métodos numéricos.

Iniciamos apresentando a forma integral da equação da conservação da massa, que fisicamente indica que a vazão em massa para fora da superfície de controle é igual ao decréscimo de massa no interior do volume de controle na unidade de tempo, ou seja,

$$\int_{S.C.} \rho V \cdot dA = \frac{\partial}{\partial t} \int_{V.C} \rho dv. \quad (3.53)$$

Aplicamos o teorema de Gauss para transformar o primeiro termo numa integral de volume. Assim, a equação (3.53) pode ser escrita como

$$\int_{V.C} \nabla \cdot (\rho V) dv + \frac{\partial}{\partial t} \int_{V.C} \rho dv = \int_{V.C} \left[\nabla \cdot (\rho V) + \frac{\partial \rho}{\partial t} \right] dv = 0. \quad (3.54)$$

Como o volume de controle é arbitrário, o integrando deve ser nulo, de modo que obtemos a forma diferencial da equação da conservação da massa

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho V) = 0, \quad (3.55)$$

onde V é o campo de velocidade u e v , que para um fluido incompressível torna-se a equação da continuidade.

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0. \quad (3.56)$$

Indicamos agora a equação da quantidade de movimento já aplicada sob a hipótese da chama poder ser representada pela teoria da camada limite. As equações da quantidade de movimento ou de Navier-Stokes nada mais são do que um balanço de forças sobre o volume de controle, resultando em

$$\rho u \frac{\partial u}{\partial x} + \rho v \frac{\partial u}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial y} \left(\rho \nu \frac{\partial u}{\partial y} \right) - \frac{\partial p}{\partial x}. \quad (3.57)$$

A fração de mistura é uma quantidade importante na teoria da combustão não pré-misturada uma vez que ela corresponde a um escalar que se conserva. A fração de mistura em qualquer estágio da combustão, depois de inserir as frações de massa do combustível e do oxidante, é dada por

$$\rho u \frac{\partial Z}{\partial x} + \rho v \frac{\partial Z}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial y} \left(\rho D \frac{\partial Z}{\partial y} \right). \quad (3.58)$$

Observe que esta equação não apresenta termos fonte, facilitando também a sua solução numérica [14].

No próximo capítulo apresentaremos o estudo analítico e numérico para a modelagem das principais características de uma chama difusiva.

4 ESTUDO ANALÍTICO E NUMÉRICO

4.1 Soluções analíticas para a velocidade e fração de mistura

Os escoamentos livres cisalhantes mais comumente estudados são os jatos. Assim, por livre, entende-se que o fluido escoar sem perturbação nem confinamento de paredes.

Na figura 2.1 observa-se como a propagação do jato lançado livremente, após deixar o bocal do queimador, produz uma mistura com o ar em repouso da vizinhança do jato, sofrendo a ação das forças de atrito interno e com o fluido que o circunda. A largura do jato cresce continuamente, e a velocidade longitudinal do mesmo, na linha de centro, não é afetada pela mistura, sendo praticamente igual à velocidade de saída do jato no centro. Esta zona de desenvolvimento inicial do jato é denominada núcleo potencial [41]. Após esta região, o espalhamento radial do fluido é maior e a velocidade longitudinal do jato cai fortemente conforme aumenta a sua distância do orifício. Isto ocorre devido ao aumento da transferência de quantidade de movimento com o fluido que é posto em movimento. A pressão permanece praticamente constante no jato e no meio circundante [41]. As regiões de mistura existentes nos jatos livres produzem o denominado comprimento de mistura, dentro do jato.

O decaimento da fração de mistura pode ser comparado e obtido sem a presença da chama, uma vez que a espessura da chama de interesse é da ordem de $0,1\text{mm}$. Combinando a equação do momento (3.57) com a continuidade (3.56) e integrando de $y = 0$ a $y \rightarrow \infty$, resulta

$$\frac{\partial}{\partial x} \int_0^{\infty} \rho u^2 dy + \left[\rho uv \right]_0^{\infty} = \left[\rho \nu \frac{\partial u}{\partial y} \right]_0^{\infty} \quad (4.1)$$

com as condições de contorno $u = 0$ e $\partial u/\partial y = 0$ em $y = \infty$ e $v = 0$ e $du/dy = 0$ em $y = 0$. Segue que a primeira integral indica que a quantidade de movimento do jato é independente de x . Assumindo velocidade constante na saída do orifício com meia largura b , a força (quantidade de movimento) do jato torna-se

$$\int_0^\infty \rho u^2 dy = \rho_0 u_0^2 b \quad (4.2)$$

onde ρ_0 é a massa específica na corrente do combustível. Adota-se uma hipótese adequada para a distribuição da velocidade $u(x, y)$, isto é, considera-se que os perfis de velocidade, como no caso de uma placa lisa, são muito provavelmente semelhantes.

A continuidade é satisfeita pela função de corrente ψ definida por

$$\rho u = \frac{\partial \psi}{\partial y}, \quad \rho v = -\frac{\partial \psi}{\partial x}. \quad (4.3)$$

Elimina-se a dependência de x e introduz-se a variável de simiralidade da forma $\eta \sim y/x^m$ [35]. Requerendo que a função corrente seja da forma $\psi \sim x^m f(\eta)$, nós necessitamos de duas condições para determinar n e m . Estas resultam do balanço do momento (4.2) e do balanço entre os termos difusivos e convectivos na equação (3.57):

$$2m - n = 0 \quad (4.4)$$

e

$$2m - 2n - 1 = m - 3m \quad (4.5)$$

o que conduz a $m = 1/3$ e $n = 2/3$ [45]. Aproximando as escalas de comprimento e de velocidade para a direção do jato, tem-se:

$$l_\nu = \nu_0/u_0, \quad u_\nu = u_0 \quad (4.6)$$

onde ν_0 é a viscosidade cinemática do jato na corrente de combustível. As coordenadas de similaridade ζ e η e a função corrente adimensional $f(\eta)$ podem ser escritas como

$$\eta = \frac{1}{3l_\nu^{1/3}\zeta^{2/3}} \int_0^y \frac{\rho}{\rho_0} dy = \frac{1}{3} \left(\frac{u_0}{\nu_0 \zeta^2} \right)^{1/3} \int_0^y \frac{\rho}{\rho_0} dy \quad (4.7)$$

$$\zeta = x + a$$

onde a é a distância entre $x = 0$ e a origem do jato, e

$$f(\eta) = \frac{\psi}{\rho_0 \zeta^{1/3} u_\nu l_\nu^{2/3}} = \frac{\psi}{\rho_0 (\nu_0^2 u_0 \zeta)^{1/3}}. \quad (4.8)$$

A equação (4.8) combinada com (4.3) resulta para as velocidades em

$$u = \frac{1}{3} \left(\frac{u_0^2 \nu_0}{\zeta} \right)^{1/3} f'(\eta) \quad (4.9)$$

$$\rho v = -\frac{\rho_0}{3} \left(\frac{\nu_0^2 u_0}{\zeta^2} \right)^{1/3} (f(\eta) - 2\eta f'(\eta)). \quad (4.10)$$

A transformação de coordenadas (x, y) para $\eta = \eta(x, y)$, $\zeta = x + a$ da forma

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} &= \frac{\partial \zeta}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \zeta} + \frac{\partial \eta}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \eta} \\ \frac{\partial}{\partial y} &= \frac{\partial \eta}{\partial y} \frac{\partial}{\partial \eta}. \end{aligned} \quad (4.11)$$

quando aplicada ao termo convectivo de (3.57) e usando (4.7) e (4.11) implica em

$$\frac{\partial \psi}{\partial y} \left(\frac{\partial \zeta}{\partial x} \frac{\partial u}{\partial \zeta} + \frac{\partial \eta}{\partial x} \frac{\partial u}{\partial \eta} \right) - \frac{\partial \psi}{\partial x} \left(\frac{\partial \eta}{\partial y} \frac{\partial u}{\partial \eta} \right) = \quad (4.12)$$

$$\frac{\partial \psi}{\partial y} \frac{\partial \zeta}{\partial x} \frac{\partial u}{\partial \zeta} + \frac{\partial \psi}{\partial y} \frac{\partial \eta}{\partial x} \frac{\partial u}{\partial \eta} - \frac{\partial \psi}{\partial x} \frac{\partial \eta}{\partial y} \frac{\partial u}{\partial \eta} = \quad (4.13)$$

$$\rho u \frac{\partial u}{\partial x} + \rho v \frac{\partial u}{\partial y} = \frac{\partial \eta}{\partial y} \frac{\partial \psi}{\partial \eta} \frac{\partial \zeta}{\partial x} \frac{\partial u}{\partial \zeta} + \frac{\partial \eta}{\partial y} \frac{\partial \psi}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial x} \frac{\partial u}{\partial \eta} - \left(\frac{\partial \zeta}{\partial x} \frac{\partial \psi}{\partial \zeta} + \frac{\partial \eta}{\partial x} \frac{\partial \psi}{\partial \eta} \right) \frac{\partial \eta}{\partial y} \frac{\partial u}{\partial \eta} \quad (4.14)$$

resultando em

$$\rho u \frac{\partial u}{\partial x} + \rho v \frac{\partial u}{\partial y} = \frac{\partial \eta}{\partial y} \left(\frac{\partial \psi}{\partial \eta} \frac{\partial u}{\partial \zeta} - \frac{\partial \psi}{\partial \zeta} \frac{\partial u}{\partial \eta} \right) \quad (4.15)$$

Assim,

$$\frac{\partial \psi}{\partial \eta} = \rho_0 (\nu_0^2 u_0 \zeta)^{1/3} f'(\eta), \quad \frac{\partial u}{\partial \eta} = \frac{1}{3} \left(\frac{u_0^2 \nu_0}{\zeta} \right)^{1/3} f''(\eta), \quad (4.16)$$

$$\frac{\partial \psi}{\partial \zeta} = \frac{1}{3} \rho_0 \left(\frac{\nu_0^2 u_0}{\zeta^2} \right)^{1/3} f(\eta), \quad \frac{\partial u}{\partial \zeta} = -\frac{1}{9} \left(\frac{u_0^2 \nu_0}{\zeta^4} \right)^{1/3} f'(\eta), \quad (4.17)$$

$$\frac{\partial \eta}{\partial y} = \frac{1}{3} \left(\frac{u_0}{\nu_0 \zeta^2} \right)^{1/3} \frac{\rho}{\rho_0} \quad (4.18)$$

e substituindo (4.16), (4.17) e (4.18) em (4.15), obtemos

$$\rho u \frac{\partial u}{\partial x} + \rho v \frac{\partial u}{\partial y} = -\frac{1}{9} \frac{\rho_0 \nu_0 u_0}{\zeta} \frac{\partial \eta}{\partial y} (f'^2 + f f'') \quad (4.19)$$

Para o termo difusivo temos

$$\frac{\partial}{\partial y} \left(\rho\nu \frac{\partial u}{\partial y} \right) = \frac{\partial \nu}{\partial y} \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\rho\nu \frac{\partial u}{\partial y} \right) = \frac{\partial \nu}{\partial y} \frac{\partial}{\partial \eta} \left[\rho\nu \left(\frac{\partial \eta}{\partial y} \frac{\partial u}{\partial \eta} \right) \right]. \quad (4.20)$$

Substituindo (4.16), (4.17) e (4.18) em (4.20), resulta em

$$\frac{\partial}{\partial y} \left(\rho\nu \frac{\partial u}{\partial y} \right) = \frac{1}{9} \frac{\rho_0 \nu_0 u_0}{\zeta} \frac{\partial \eta}{\partial y} \frac{\partial}{\partial \eta} (C f'') \quad (4.21)$$

onde C é o parâmetro de Chapman-Rubesin dado por [35]

$$C = \frac{\rho^2 \nu}{\rho_0^2 \nu_0} \quad (4.22)$$

Combinando as equações (4.19) e (4.21) obtém-se

$$-\frac{1}{9} \frac{\rho_0 \nu_0 u_0}{\zeta} \frac{\partial \eta}{\partial y} (f'^2 + f f'') = \frac{1}{9} \frac{\rho_0 \nu_0 u_0}{\zeta} \frac{\partial \eta}{\partial y} \frac{\partial}{\partial \eta} (C f'') \quad (4.23)$$

resultando na forma conveniente da equação para $f(\eta)$

$$f'^2 + f f'' + (C f'')' = 0 \quad (4.24)$$

com as condições de contorno $f = 0$, $f'' = 0$ para $\eta = 0$ e $f' = 0$ para $\eta \rightarrow \infty$; integrando a equação (4.24), temos

$$f f' + C f'' = \left(\frac{f^2}{2} \right)' + (C f')' = 0 \quad (4.25)$$

ou ainda

$$\frac{f^2}{2} + C f' = K \quad (4.26)$$

Substituindo $F = f/2\gamma$ e $\xi = \gamma\eta$ pode-se escrever

$$f(\eta) = F2\gamma \quad \longrightarrow \quad f'(\eta) = 2\gamma^2 F'(\xi). \quad (4.27)$$

Substituindo f na equação (4.26) e assumindo que $K = 2\gamma^2$, temos

$$F^2 + C F' = 1 \quad (4.28)$$

onde a constante de integração pode ser assumida igual a unidade. Logo, obtemos

$$C \frac{dF}{d\xi} = 1 - F^2 \quad (4.29)$$

e integrando temos

$$\int_0^F \frac{dF}{1-F^2} = \int_0^\xi C d\xi \quad (4.30)$$

Por simplicidade assumimos que $C = 1$ e a solução da equação (4.30) torna-se

$$F = \frac{1 - e^{-2\xi}}{1 + e^{-2\xi}}, \quad (4.31)$$

ou

$$F = \tanh(\xi), \quad (4.32)$$

de forma que

$$\frac{\partial F}{\partial \xi} = 1 - \tanh^2 \xi \quad (4.33)$$

logo,

$$f' = 2\gamma^2 \frac{\partial F}{\partial \xi} = 2\gamma^2 (1 - \tanh^2 \xi). \quad (4.34)$$

Substituindo a equação (4.34) em (4.9) obtemos a velocidade u em função de ζ e η

$$u = \frac{2\gamma^2}{3} \left(\frac{u_0^2 \nu_0}{\zeta} \right)^{1/3} [1 - \tanh^2(\gamma\eta)] \quad (4.35)$$

e similarmente para a componente v da velocidade como

$$v = -\frac{4\gamma^2 \eta \rho_0}{3\rho} \left(\frac{\nu_0^2 u_0}{\zeta^2} \right)^{1/3} \left[\frac{\tanh(\gamma\eta)}{2\gamma\eta} + \tanh^2(\gamma\eta) - 1 \right] \quad (4.36)$$

Para a fração de mistura procede-se de forma semelhante as velocidades para obter uma solução analítica. Substituindo a equação da velocidade (4.35) em (4.2) resulta

$$\int_0^\infty \left(\frac{2}{3} \gamma^2 \left[\frac{u_0^2 \nu_0}{\zeta} \right]^{1/3} \right)^2 (1 - \tanh^2 \xi)^2 dy = \rho_0 u_0^2 b. \quad (4.37)$$

Como

$$dy = \frac{3\rho_0}{p} \left(\frac{\nu_0 \zeta^2}{u_0} \right)^{1/3} \frac{d\xi}{\gamma}, \quad (4.38)$$

resulta que

$$\int_0^\infty \frac{4}{3} \gamma^3 u_0 \nu_0 \rho_0 (1 - \tanh^2 \xi)^2 d\xi = \rho_0 u_0^2 b. \quad (4.39)$$

Lembrando que

$$\xi = \int_0^F \frac{dF}{1-F^2} \longrightarrow d\xi = \frac{dF}{1-F^2}. \quad (4.40)$$

tem-se,

$$\int_0^\infty (1 - \tanh^2 \xi)^2 d\xi = \int_0^\infty (1 - F^2)^2 \frac{dF}{1 - F^2} = \frac{2}{3} \quad (4.41)$$

e substituindo o resultado de (4.41) em (4.39) obtemos

$$\gamma^3 = \frac{9}{8} \frac{u_0 b}{\nu_0} = \frac{9}{8} R_{e_0} \quad (4.42)$$

onde R_{e_0} é o número de Reynolds na saída do jato. A equação para a fração de mistura pode ser semelhantemente obtida fazendo

$$Z = \alpha \left(\frac{\nu_0}{u_0 \zeta} \right)^{1/3} \omega \quad (4.43)$$

com um coeficiente desconhecido α . Nas equações (4.19) e (4.21), substituindo u por Z obtemos

$$f'\omega + f\omega' + \left(\frac{C}{S_c} \omega \right)' = 0 \quad (4.44)$$

onde S_c é o número de Schimdt ($S_c = \nu/D$). Integrando a equação (4.44) obtemos

$$f\omega + \frac{C}{S_c} \omega' = 0. \quad (4.45)$$

Combinando esta equação com a equação (4.25) achamos uma relação entre ω e f' equivalente a

$$\frac{d}{d\eta} (\ln f') = \frac{1}{S_c} \frac{d}{d\eta} (\ln \omega). \quad (4.46)$$

Integrando a equação (4.46) com S_c constante, temos

$$\omega = (f')^{S_c}. \quad (4.47)$$

Substituindo (4.47) em (4.43) para $C = 1$ obtemos

$$Z = \alpha(2\gamma^2)^{S_c} \left(\frac{\nu_0}{u_0\zeta} \right)^{1/3} [1 - \tanh^2(\gamma\eta)]^{S_c}. \quad (4.48)$$

Integrando a equação (3.58) da fração de mistura e similarmente a equação da quantidade de movimento, descobrimos que a integral do fluxo de fração de massa é independente de x , ou seja,

$$\int_0^\infty \rho u Z dy = \rho_0 u_0 b. \quad (4.49)$$

Se as equações (4.42) e (4.48) são introduzidos em (4.49) temos

$$\alpha(2\gamma^2)^{S_c} \int_0^1 (1 - F^2)^{S_c} dF = \frac{4}{9}\gamma^2 \quad (4.50)$$

para o qual o coeficiente em (4.43) pode ser determinado para $S_c = 1$. Obtemos $\alpha = 1/3$, que substituído em (4.48) resulta para Z em

$$Z = \frac{2\gamma^2}{3} \left(\frac{\nu_0}{u_0\zeta} \right)^{1/3} [1 - \tanh^2(\gamma\eta)]. \quad (4.51)$$

Neste caso, o campo de fração de mistura é proporcional ao campo de velocidade conforme a relação

$$Z = \frac{u}{u_0} \quad (4.52)$$

4.2 Estudo numérico

Apresentamos, no que segue, as configurações empregadas para a simulação numérica do escoamento de uma chama difusiva. Estas configurações foram estudadas utilizando-se a metodologia de dinâmica dos fluidos computacional, onde foi utilizado um código computacional escrito em FORTRAN 90. A implementação computacional consiste em chegar num resultado estacionário após um certo número de iterações.

A figura 4.1 representa o fluxograma que descreve a seqüência de operações lógicas do algoritmo. As formulações matemáticas utilizadas normalmente possuem

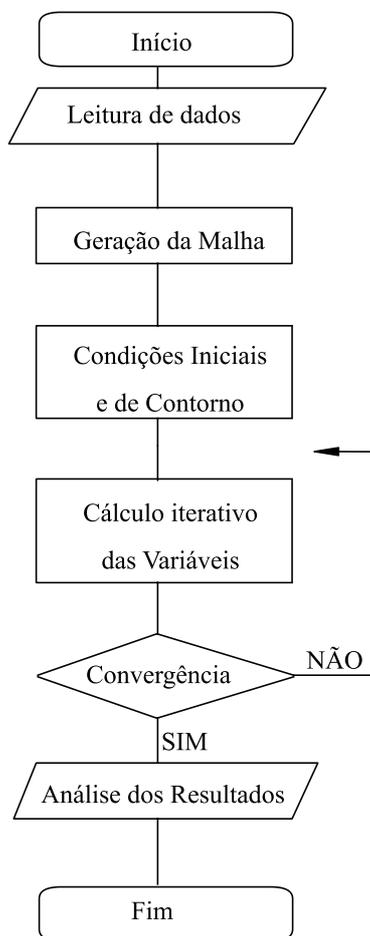


Figura 4.1: Fluxograma do código desenvolvido

o formato diferencial, podendo ser descritas por variáveis com domínio no espaço e no tempo.

Para obter a solução aproximada destas equações, é necessária a utilização de métodos de discretização, que consistem basicamente em transformar as equações diferenciais em um sistema de equações algébricas, as quais podem ser então resolvidas nos computadores. Seguem os tópicos necessários para a simulação numérica.

4.2.1 Adimensionalização das equações governantes

Geralmente a solução dos problemas de interesse técnico em mecânica dos fluidos requer tanto um desenvolvimento teórico como resultados experimentais. Através de um agrupamento de grandezas significativas em parâmetros adimensionais é possível reduzir o número de variáveis presentes e tornar esse resultado compacto (equações ou gráficos) aplicável as situações semelhantes. Para descrever as equações de balanço (3.56), (3.57) e (3.58) na forma adimensional, definem-se as variáveis:

$$u^* = \frac{u}{U_\infty}, \quad v^* = \frac{v}{U_\infty}, \quad x^* = \frac{x}{L}, \quad y^* = \frac{y}{L},$$

$$\rho^* = \frac{\rho}{\rho_\infty}, \quad t^* = \frac{tU_\infty}{L}, \quad Y_k^* = \frac{Y_k}{Y_\infty}, \quad Z^* = \frac{Z}{Z_\infty}$$

onde L é a escala de comprimento, U_∞ a escala de velocidade nas direções x e y , Y_∞ é a escala de fração de massa e Z_∞ é a escala de fração de mistura. Assim obtemos as equações de interesse na forma adimensional.

Para a equação da Continuidade, resulta

$$\frac{\partial u^*}{\partial x^*} + \frac{\partial v^*}{\partial y^*} = 0. \quad (4.53)$$

Para a equação de conservação da Quantidade de Movimento obtém-se

$$(u^*U_\infty) \frac{\partial(u^*U_\infty)}{\partial(x^*L)} + (v^*U_\infty) \frac{\partial(u^*U_\infty)}{\partial(y^*L)} = \nu \frac{\partial^2(u^*U_\infty)}{\partial^2(y^*L)} \quad (4.54)$$

$$u^* \frac{\partial u^*}{\partial x^*} + v^* \frac{\partial u^*}{\partial y^*} = \frac{\nu}{LU_\infty} \frac{\partial^2 u^*}{\partial^2 y^*}. \quad (4.55)$$

Definindo o número de Reynolds por:

$$Re = \frac{U_\infty L}{\nu}. \quad (4.56)$$

O número de Reynolds é um parâmetro adimensional fundamental na definição de escoamentos. O número de Reynolds pode ser interpretado como a razão das forças de inércia, que são responsáveis pelo movimento do fluido, e as forças viscosas, que são responsáveis pela dissipação devido à viscosidade molecular [46].

Para a equação da quantidade de movimento chega-se a

$$u^* \frac{\partial u^*}{\partial x^*} + v^* \frac{\partial v^*}{\partial y^*} = \frac{1}{Re} \frac{\partial^2 u^*}{\partial^2 y^*}. \quad (4.57)$$

Para a fração de mistura resulta

$$(u^* Z_\infty) \frac{\partial(Z^* Z_\infty)}{\partial(x^* L)} + (v^* Z_\infty) \frac{\partial(Z^* Z_\infty)}{\partial(y^* L)} = D \frac{\partial^2(Z^* Z_\infty)}{\partial^2(y^* L)} \quad (4.58)$$

$$u^* \frac{\partial Z^*}{\partial x^*} + v^* \frac{\partial Z^*}{\partial y^*} = \frac{D}{LU^*} \frac{\partial^2 Z^*}{\partial y^*}. \quad (4.59)$$

Definindo o número de Schmidt, por

$$S_{C_k} = \frac{\nu}{D} \quad (4.60)$$

com a relação

$$\frac{D}{LU^*} = \frac{\nu}{LU^*} \frac{D}{\nu} = \frac{1}{Re S_{C_k}} \quad (4.61)$$

obtemos a equação na forma adimensional da fração de mistura

$$u^* \frac{\partial Z^*}{\partial x^*} + v^* \frac{\partial Z^*}{\partial y^*} = \frac{1}{Re S_{C_k}} \frac{\partial^2 Z^*}{\partial^2 y^*}. \quad (4.62)$$

Neste trabalho, a viscosidade é corrigida em função do aumento da temperatura conforme

$$\frac{\mu}{\mu_0} = \left(\frac{T}{T_0} \right)^{3/4}, \quad (4.63)$$

onde o subíndice "0" indica a condição de referencial inicial.

4.2.2 Obtenção da malha computacional apropriada

Soluções analíticas envolvem expressões tais que as variáveis dependentes são conhecidas em qualquer ponto do domínio. Soluções numéricas têm respostas somente em alguns pontos do domínio. Esse conjunto de pontos é conhecido como malha computacional. Por mais fina que uma malha seja, sempre será formada por alguns pontos, diferentemente das soluções analíticas que são válidas em todos os pontos do domínio.

O primeiro passo para a resolução de problemas utilizando o método de diferenças finitas é a discretização do domínio onde a equação será definida. Dessa forma, define-se uma malha sobre a qual será calculada a solução aproximada. Fortuna [19] descreve que uma boa solução numérica depende de uma malha de boa qualidade, isto é, que seja refinada em regiões nas quais os gradientes das variáveis dependentes são elevados, por exemplo.

O método de diferenças finitas apresenta facilidade de formulação, para malha do tipo estruturada, providenciando soluções discretas [9]. Malhas consideradas ótimas geralmente são não uniformes, isto é, refinada onde há mudança brusca da propriedade e relativamente grossa onde não há mudança significativa. Geralmente leva-se mais que 50% do tempo (tempo total de modelagem do problema) na definição da geometria e na obtenção da malha adequada ao problema.

O domínio computacional foi definido usando como base o trabalho de Peters [38], onde o escoamento é assumido bi-dimensional e com simetria. Isto quer dizer que a chama será modelada como sendo de camada limite. As dimensões do domínio computacional nas direções longitudinal (x) e radial (y) são de $100.D_B$ e $10.D_B$, respectivamente, onde D_B representa o diâmetro do bocal do queimador. A origem do sistema de coordenadas foi situada no centro do jato do queimador, conforme mostrado na figura 4.2. Os pontos da malha são orientados pelos índices i, j , de modo que i representa a direção x e j a direção y . O domínio computacional foi

representado por uma malha retangular não homogênea, conforme mostra a figura 4.2.

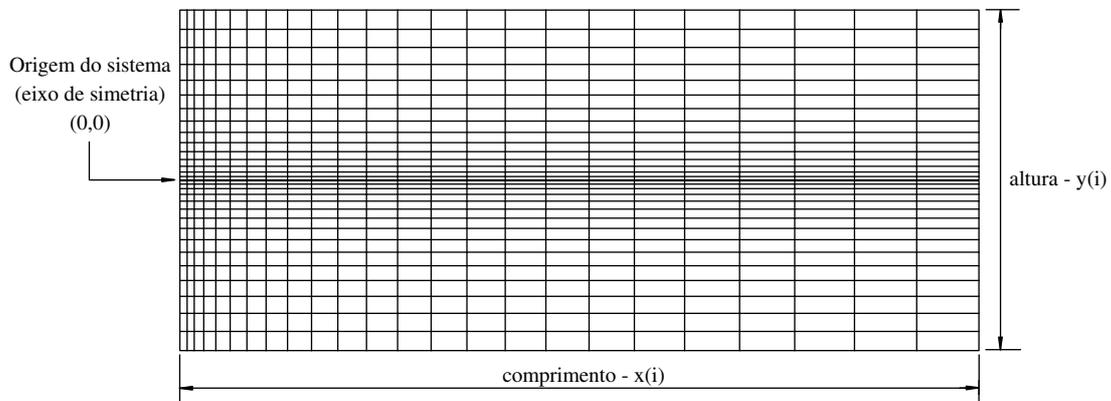


Figura 4.2: Domínio de estudo

4.2.3 Discretização das equações governantes

O propósito de qualquer técnica de discretização é transformar as equações diferenciais parciais em um sistema de equações algébricas correspondente, representando o balanço local das forças envolvidas. Sob condições favoráveis, a solução desse sistema produz um conjunto de valores que está associado à solução das equações originais em alguma região pré-estabelecida. No uso de técnicas numéricas de solução de equações diferenciais parciais (EDPs), o domínio Ω não é tratado como contínuo, mas sim como um conjunto discreto e finito de pontos ou sub-domínios na qual as variáveis de interesse são calculadas, sendo que quanto maior for o seu número, mais próxima da solução exata será a solução aproximada. O conjunto discreto de pontos ou subdomínios constitui a malha. Esta é a idéia fundamental das técnicas numéricas: a dimensão espacial é dividida em um conjunto discreto de pontos ou células (malha) e o tempo é discretizado em pequenos intervalos [4].

Uma vez que o domínio deve estar discretizado, isto é, dividido em pontos ou células, deve-se obter um conjunto de equações escritas em função dos valores das variáveis em outros pontos da malha. Este procedimento resulta em um sistema

de equações algébricas, geralmente lineares, que representam as EDPs no espaço computacional.

A técnica de discretização para resolver o conjunto de EDPs que utilizaremos neste trabalho é o método de diferenças finitas (MDF). No (MDF) as derivadas da EDP são aproximadas por diferenças, as quais são obtidas utilizando-se de expansões em série de Taylor ao redor de pontos nodais distribuídos no domínio. Um esquema não oscilatório, do tipo TVD (Total Variational Diminishing), é introduzido a fim de obtermos resultados numéricos mais acurados para a representação dos termos advectivos.

4.2.4 Esquemas em diferenças finitas

Um dos primeiros métodos numéricos desenvolvidos foi o de Diferenças Finitas, sendo aplicado, até a atualidade, a uma extensa gama de problemas. Neste método, utiliza-se uma malha sobre todo o domínio físico, a qual contém determinados pontos onde são efetuadas as aproximações envolvidas. No Método de Diferenças Finitas as derivadas existentes na equação diferencial são aproximadas utilizando-se uma expansão truncada da série de Taylor. Assim, a equação algébrica resultante de tal aproximação é expressa em termos dos valores da função incógnita em alguns pontos específicos da malha utilizada, os pontos nodais. A vantagem na utilização de esquemas envolvendo o Método de Diferenças Finitas consiste em tais esquemas serem comparativamente econômicos, em relação a outros métodos numéricos, para a montagem do sistema linear de equações algébricas resultante, devido à simplicidade das operações envolvidas. Por este motivo, tais esquemas ainda são largamente utilizados atualmente, principalmente em aplicações em áreas como a Mecânica dos Flúidos, a qual requer a aplicação de uma malha altamente refinada.

Infelizmente, a simulação numérica de equações de transporte com termos advectivos-difusivos-reativos muitas vezes enfrentam sérias dificuldades. Quase to-

dos os métodos numéricos padrões produzem soluções com excessivas oscilações. Para eliminar as oscilações espúrias, esquemas TVD (Total Variational Diminishing) são propostos. A propriedade TVD garante então que a variação total da solução de uma equação não cresça na direção progressiva do tempo.

Considere as aproximações dadas por diferenças finitas de baixa (primeira) e segunda ordem, respectivamente

$$u_{i,j}^l \cong \frac{u_{i,j} - u_{i-1,j}}{\Delta x} \quad (4.64)$$

$$u_{i,j}^h \cong \frac{u_{i+1,j} - u_{i-1,j}}{2 \Delta x}. \quad (4.65)$$

Desta forma, a aproximação da derivada pode ser escrita como

$$\left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_{i,j} \cong u_{i,j}^l - \phi(r_i)(u_{i,j}^l - u_{i,j}^h) \quad (4.66)$$

onde

$$\phi(r_i) = \frac{r_i + |r_i|}{1 + r_i} \quad (4.67)$$

e $\phi(r_i)$ é chamado de limitador de fluxo e r_i é representado por

$$r_i = \frac{u_{i,j} - u_{i-1,j}}{u_{i+1,j} - u_{i,j}}. \quad (4.68)$$

Analogamente, para a fração de mistura temos

$$Z_{i,j}^l \cong \frac{Z_{i,j} - Z_{i-1,j}}{\Delta x} \quad (4.69)$$

$$Z_{i,j}^h \cong \frac{Z_{i+1,j} - Z_{i-1,j}}{2 \Delta x} \quad (4.70)$$

$$\left(\frac{\partial Z}{\partial x} \right)_{i,j} \cong Z_{i,j}^l - \phi(b_i)(Z_{i,j}^l - Z_{i,j}^h) \quad (4.71)$$

onde

$$\phi(b_i) = \frac{b_i + |b_i|}{1 + b_i} \quad (4.72)$$

e b_i é representado por

$$b_i = \frac{Z_{i,j} - Z_{i-1,j}}{Z_{i+1,j} - Z_{i,j}}. \quad (4.73)$$

Para os termos de derivadas de segunda ordem temos a aproximação em séries de Taylor por:

$$\left(\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}\right)_{i,j} \cong \frac{u_{i,j+1} - 2u_{i,j} + u_{i,j-1}}{\Delta y^2} \quad (4.74)$$

$$\left(\frac{\partial^2 Z}{\partial y^2}\right)_{i,j} \cong \frac{Z_{i,j+1} - 2Z_{i,j} + Z_{i,j-1}}{\Delta y^2} \quad (4.75)$$

4.2.5 Condições iniciais e de contorno

As equações do modelo requerem condições subsidiárias e fisicamente apropriadas para definir problemas específicos. Essas condições, chamadas condições iniciais e de fronteira, são fundamentais para se obter uma solução numérica de boa qualidade. Para as condições iniciais do escoamento devemos conhecer, em $t = 0$, a distribuição espacial das variáveis dependentes. Para as condições de fronteira devemos ter alguma informação física, para todo tempo t , das variáveis dependentes no contorno da região limitando o escoamento. Mais precisamente, as equações (3.56), (3.57) e (3.58), implementadas adequadamente com um campo de velocidade inicial em um domínio e uma condição sobre a fronteira deste domínio, constituem um Problema de Valor Inicial e de Fronteira (PVIF) bem posto, no sentido de Hadamard.

As equações de camada limite bidimensional possuem natureza matemática parabólica constituindo-se, portanto em problemas de percurso/marcha numérica na direção do escoamento. Ou seja, uma vez impostas as condições iniciais em um ponto, marcha-se numericamente a jusante deste ponto, na direção do escoamento.

Formalmente, se Ω é um domínio limitado no R^n , $n=2$, $\partial\Omega$ é a fronteira limitando Ω , definimos as condições iniciais e de fronteiras nas seguintes formas:

- Condições Iniciais ($t = 0$)

$$u_{i,j} = 0.01, \quad v_{i,j} = 0.0, \quad Z_{i,j} = 1.0, \quad \text{para todo } (x_i, y_j) \in \Omega$$

- Condições de Contorno

$$u_{i,j}^{t-1} = u_{i,j}, \quad v_{i,j}^{t-1} = v_{i,j}, \quad Z_{i,j}^{t-1} = Z_{i,j}^t \quad \text{para todo } (x_i, y_i) \in \partial\Omega \quad \text{e } t \in [0, t]$$

onde $u(i, j)$ é a velocidade na direção x , $v(i, j)$ a velocidade na direção y , $Z(i, j)$ a fração de mistura com ni o número de pontos na direção i e nj número de pontos da direção j

4.2.6 Algoritmo de solução via Gauss-Seidel

O algoritmo iterativo de solução para o problema do escoamento incompressível foi implementado de maneira que as equações envolvidas são resolvidas separadamente, apesar de serem acopladas, convergindo, após um certo número de iterações. Para obter a solução no estado estacionário, no presente trabalho, utilizou-se o método de Gauss-Seidel. No entanto é possível estabelecerem-se critérios e condições suficientes para a convergência, que são de aplicação relativamente simples e facilitam a decisão prévia do método utilizado. Existem dois critérios de suficiência para a convergência do Método de Gauss-Seidel, o de linhas e o de Sassenfeld (ver apêndice A).

4.3 Algumas considerações sobre chamas laminares e turbulentas

O propósito aqui é apresentar a simulação de uma chama difusiva tratando-a laminar, embora na prática uma chama quase nunca se comporta como laminar.

Apesar dos resultados experimentais destas chamas [50] serem complicados, pelas altas intensidades de turbulência locais, seu estudo teórico é relativamente

simples, já que o jato é axissimétrico e que aproximações de camada limite podem ser aplicadas à sua camada cisalhante livre. Embora as soluções teóricas sejam confiáveis para fins de comparação, faremos algumas considerações necessárias para que a comparação seja válida.

Damköhler [12] distinguiu dois modos de desenvolvimento de chama:

- Pequena escala, onde ocorre turbulência de alta intensidade e a relação do tamanho dos vórtices com a espessura de chama é pequena.
- Grande escala, onde há turbulência de baixa intensidade e a relação do tamanho dos vórtices com a espessura de chama é grande.

O jato de Propano e a Chama C, apresentados neste trabalho, são situações turbulentas de grande escala e baixa intensidade, surgindo ondulações (em comparação com a chama laminar), mas as propriedades de transporte se mantêm as mesmas. Já que para velocidade laminar de chama, V_L , a área da chama é proporcional à velocidade do escoamento, espera-se que o aumento da área devido à turbulência seja proporcional a velocidade u [21].

A hipótese que a chama turbulenta consiste de vários elementos de chama laminar é explícita em vários estudos qualitativos de combustão turbulenta [12]. O número de Damköhler, por exemplo, compara as escalas de tempo turbulento (τ_t) e de reação química (τ_c):

$$Da = \frac{\tau_t}{\tau_c}. \quad (4.76)$$

Para valores muito superiores à unidade considera-se que a taxa de reação é rápida se comparada à taxa de escoamento turbulento [25]. No limite de altos números de Damköhler ($Da \gg 1$), há zona fina de reação, distorcida e transportada (por convecção) pelo escoamento. Neste caso a estrutura interna da chama não é fortemente afetada pela turbulência que pode ser descrita como um elemento de chama laminar chamado *flamelet*.

O modelo flamelet baseia-se no conceito de que a reação química é rápida quando comparada ao tempo de transporte de espécies químicas pelo escoamento, podendo ser empregado em reações com alto número de Damköhler. Quando os reagentes se misturam em escala molecular estes formam produtos instantaneamente. Este modelo assume que a taxa de reação é diretamente proporcional ao tempo necessário para que ocorra a mistura dos reagentes no nível molecular. Em escoamentos turbulentos o tempo característico de reação é determinado principalmente pelas propriedades das estruturas turbulentas, os vórtices. O tempo de mistura entre os componentes do escoamento é proporcional à razão entre a energia cinética turbulenta k e a dissipação da energia cinética turbulenta ε [1].

Assumindo estas hipóteses podemos comparar os resultados numéricos para uma chama laminar com chamas em regime turbulento de grande escala e de baixa intensidade (Chama Sandia C).

5 RESULTADOS

Determinar se uma solução numérica tem credibilidade é de grande interesse para projetistas e todos que são afetados por decisões baseadas em simulações. Uma das desvantagens da simulação numérica é a necessidade de verificação e validação do modelo proposto. Usuários e programadores enfrentam nos dias atuais uma questão crítica: o quanto se pode confiar na verificação e validação. Verificação e validação de simulações computacionais são métodos primários para construir e quantificar esta confiança. Resumidamente, verificação é a estimativa da precisão da solução para um modelo computacional por comparação com soluções conhecidas. Validação é a estimativa da precisão da simulação computacional por comparação com dados experimentais. Na verificação, a relação entre a simulação numérica com o mundo real não é essencial. Na validação a relação entre a simulação e o mundo real (dados experimentais) é importante.

Neste capítulo apresenta-se a comparação de três resultados:

- Numérico desenvolvido pelo autor
- Solução Analítica obtida por Peters [35]
- Dados Experimentais obtidos pela Sandia National Laboratories [50]

Os dados utilizados para avaliação dos modelos computacionais (Jato de Propano e Chama C) foram documentados pela *International Workshop on Measurement and Computation of Turbulent Nonpremixed Flames* [50]. Foram escolhidas estas chamadas por ser possível a comparação com resultados experimentais disponíveis na referida conferência. A discussão e a análise dos dados experimentais podem ser encontradas nos trabalhos de Schefer et al. 1985, 1986 e 1987 [44, 42, 43], Dibble et al. 1984 [16], 1985 e 1987 [17, 15] e Gouldin et al. 1986 [22].

De maneira clássica, os resultados são apresentados na forma de diagramas de componentes adimensionais de velocidade no plano de simetria, os quais são normalizados pela velocidade média de saída do jato central, U_m . As distâncias são normalizadas pelo diâmetro do bocal do queimador, D_B . Por simplicidade, só são mostrados valores obtidos para o semi-eixo radial positivo. Deve-se lembrar que as escalas nas figuras estão definidas apenas para efeitos de visualização, de maneira que a altura apresenta-se maior que seu tamanho original em relação ao comprimento.

5.1 Comparação das soluções analítica, numérica e experimental para o jato de propano

O jato de propano utilizado para avaliação dos modelos computacionais sai do bico injetor do combustível com um diâmetro interno de $0,526\text{cm}$ [50]. Apresenta-se a seguir as comparações (numérica, analítica e experimental) para as principais características deste jato. Nesta simulação computacional utilizou-se uma malha de 110×50 pontos e o número de Reynolds baseado no diâmetro do bocal é de 1500. Neste caso a chama não é reativa.

Apresenta-se inicialmente a comparação ao longo do eixo e depois mostra-se as comparações para algumas secções radiais.

5.1.1 Comparação das soluções ao longo do eixo

Começamos fazendo uma análise do comportamento da fração de mistura na linha de centro do jato. Conforme mostra a figura 5.1, a fração de mistura permanece praticamente constante ao longo da região do núcleo potencial, que se estende aproximadamente até 4 diâmetros a jusante da saída do jato; a partir deste ponto observa-se um decréscimo da fração de mistura, à medida que o jato se desen-

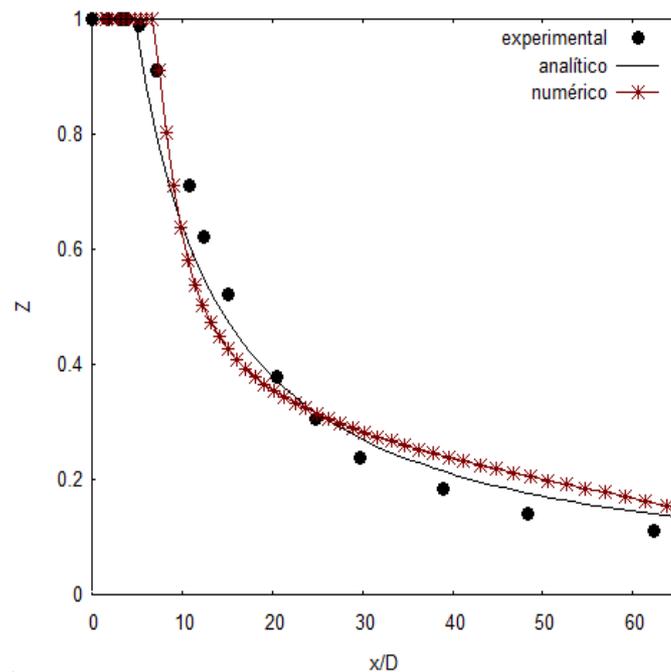


Figura 5.1: Fração de mistura ao longo da linha de centro para o jato de propano

volve, e isto ocorre devido a difusão. Isto ocorre por que o jato se mistura com fluido oriundo do meio ambiente. A boa concordância, mostrada na figura 5.1, indica que os mecanismos de convecção e difusão estão sendo bem reproduzidos no modelo.

O comportamento da velocidade é semelhante ao da fração de mistura, conforme [13, 27] indica a equação (4.52).

5.1.2 Comparação das soluções nas secções radiais

Neste ítem é apresentado o comportamento da fração de mistura em função da distância radial normalizada pelo diâmetro do jato para valores de $x/D = 4$, $x/D = 15$, $x/D = 30$ e $x/D = 50$. Em todos os casos, a fração de mistura decresce ao longo do raio; à medida que o fluido se afasta do bico injetor este decréscimo se torna mais lento. Isto ocorre porque o combustível está sendo consumido à medida que se mistura em razão estequiométrica com o ar. A figura 5.2 representa a fração de

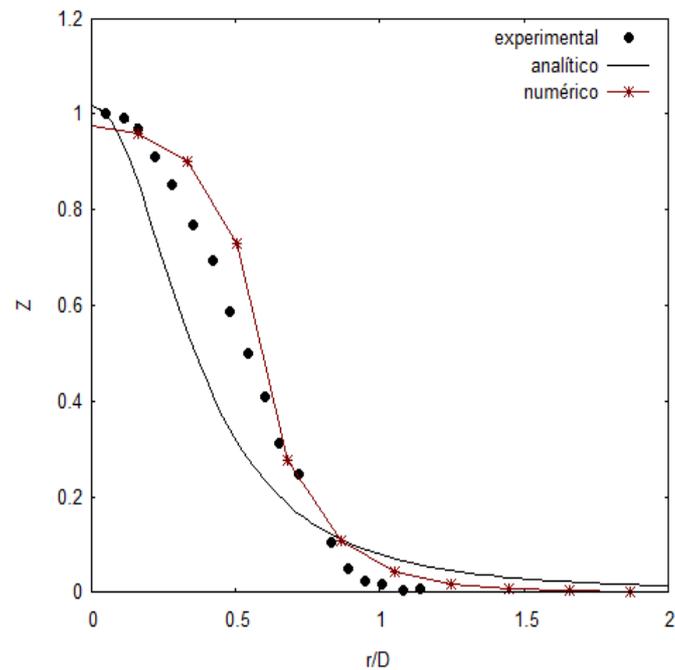


Figura 5.2: Fração de mistura ao longo do raio em $x/D = 4$ para o jato de propano

mistura ao longo do raio em $x/D = 4$. Esta começa com valor quase 1, ou seja, quase 100% de combustível na mistura gasosa. As soluções numéricas e experimentais apresentam boa concordância, já a solução analítica apresenta discrepância em quase todo o raio; esta discordância se deve a dissipação maior no modelo analítico.

Na posição $x/D = 15$, conforme mostra a figura 5.3, a fração de mistura próximo ao bico injetor apresenta melhor concordância em relação ao resultado em $x/D = 4$, embora a malha seja mais refinada próximo ao início do jato, conforme mostramos na figura 4.2. A fração de mistura começa com valor próximo a 0,55, ou seja 55% de combustível na mistura gasosa, decresce mais lentamente ao longo do raio; a maior discrepância da solução analítica ocorre próxima a posição $r/D = 1$. Observa-se que para chamas os resultados experimentais são estatísticos e a faixa de erro pode ser da ordem de 10%, já que o processo de queima numa chama é transiente [13].

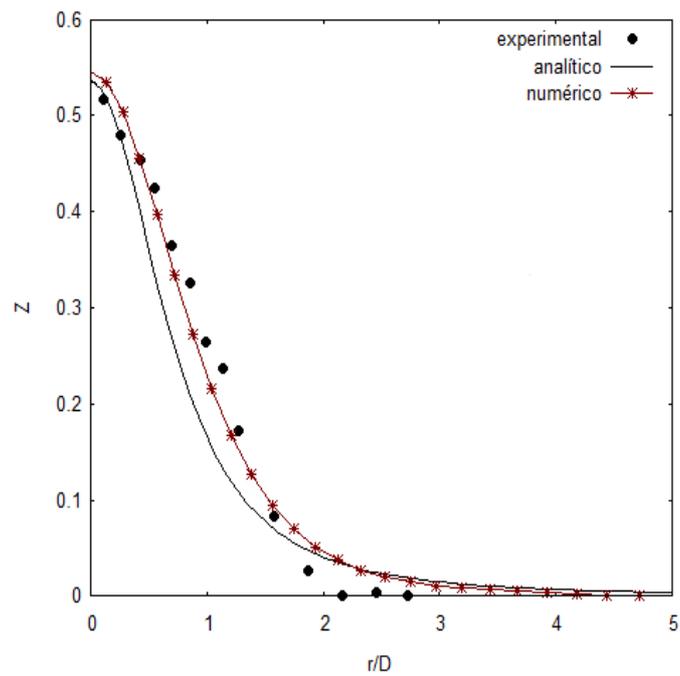


Figura 5.3: Fração de mistura ao longo do raio em $x/D = 15$ para o jato de propano

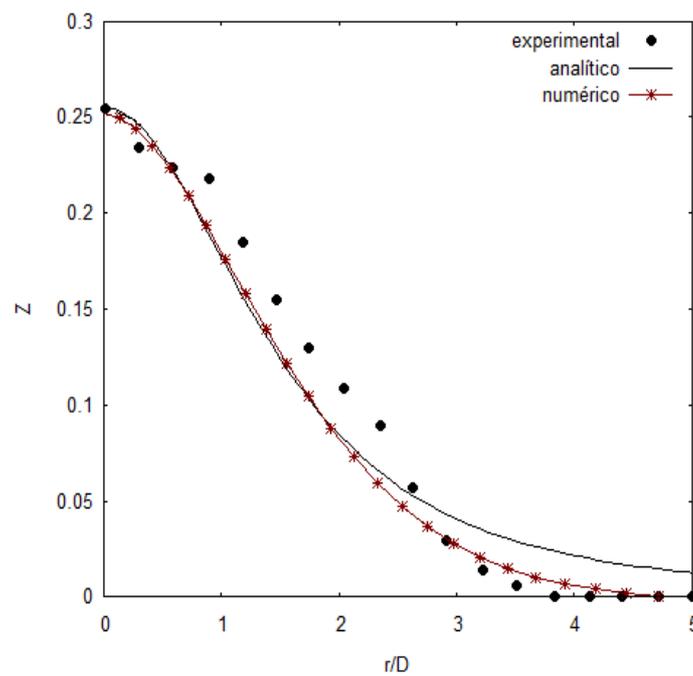


Figura 5.4: Fração de mistura ao longo do raio em $x/D = 30$ para o jato de propano

Na figura 5.4 mostra-se a evolução da fração de mistura na posição axial $x/D = 30$. Nota-se que a solução analítica e numérica têm boa concordância; a fração de mistura começa em aproximadamente 27% com um decréscimo mais lento que nas posições anteriores ($x/D = 4$ e $x/D = 15$). A discrepância é mais acentuada próximo a $r/D = 2$ pois, neste local, além da dissipação, a malha está menos refinada.

Por último, a figura 5.5 mostra o comportamento da fração de mistura radial na posição $x/D = 50$. É bom lembrar que um jato laminar geralmente se extingue na posição próxima a $x/D = 80$. Em $x/D = 50$ a fração de mistura inicia em 14% e decresce; a partir de $r/D = 2$ ocorre uma maior discordância em relação as posições estudadas anteriormente. Isto ocorre por esta posição ($x/D = 50$) estar mais afastada do bico injetor, onde o efeito da dissipação viscosa torna-se maior.

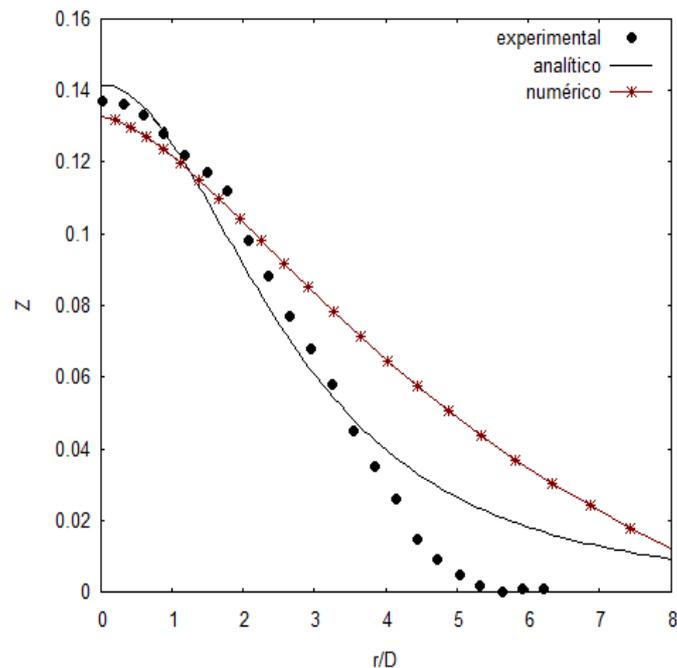


Figura 5.5: Fração de mistura ao longo do raio em $x/D = 50$ para o jato de propano

A seguir mostraremos os resultados da simulação para a chama Sandia C (chama de metano/ar).

5.2 Comparação das soluções analítica, numérica e experimental para a chama Sandia C

A chama Sandia C é uma chama que consiste em um jato principal com uma mistura de 25% de metano e 75% de ar. Os dados experimentais da chama C provém de Sandia, 1997, em medidas multiscalares de chama piloto ar-metano [2] estabilizada por um queimador desenvolvido por Masri [33].

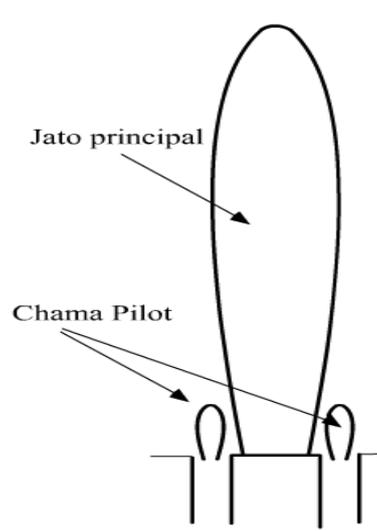


Figura 5.6: Jato estabilizado por uma chama Pilot

A principal função do piloto é a de transferir a energia necessária à ignição do combustível principal, estabelecendo uma solução de continuidade na corrente gasosa principal, não permitindo que o ar seja difundido para o seu interior na região próxima ao queimador, o que caracterizaria uma zona de pré-mistura [48]. Esta chama piloto pode ser facilmente contabilizada, podendo ser negligenciada a sua influência na composição da chama na região onde os principais fenômenos de extinção da chama ocorrem [33]. Sem a chama piloto, a chama principal apresentaria uma região inicial de pré-mistura, de difícil modelagem.

A seguir apresenta-se as comparações analíticas e numéricas com os dados experimentais.

5.2.1 Comparação dos resultados ao longo do eixo

A Figura 5.7 mostra a evolução da fração de mistura ao longo da linha de centro. A fração de mistura, pela sua própria definição, é uma grandeza conservativa. Desta forma, a sua distribuição é determinada pelos mecanismos de transporte unicamente. O comportamento da fração de mistura é bem reproduzido pelos modelos; o seu comportamento é semelhante ao jato de propano estudado anteriormente, pois seus mecanismos são governados pelas mesmas equações (3.56), (3.57), (3.58).

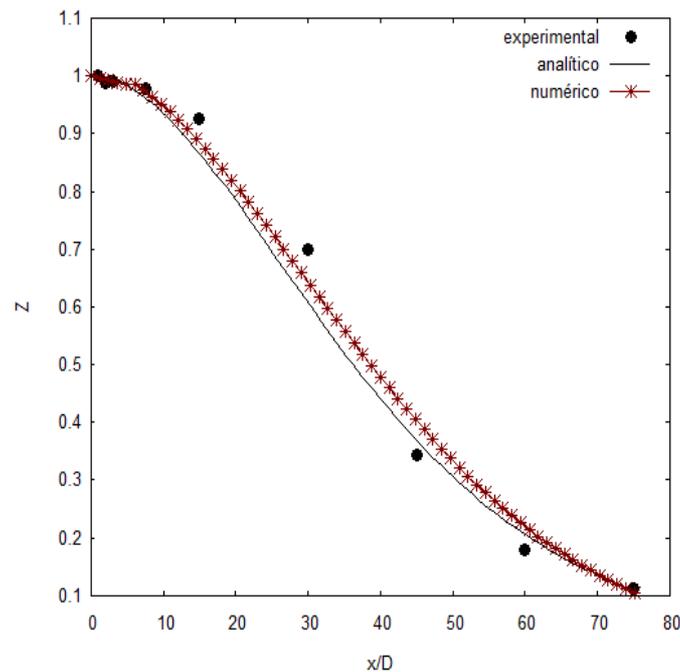


Figura 5.7: Fração de mistura ao longo do eixo

Na sequência apresenta-se as comparações dos resultados analíticos e experimentais nas seções radiais.

5.2.2 Comparação dos resultados nas seções radiais

A figura 5.8 representa a fração de mistura na posição axial $x/D = 15$, Nota-se que houve certa discrepância ao longo do raio; o resultado numérico mostra um decréscimo mais acentuado da fração de mistura.

Nota-se também que a fração de mistura inicia-se próximo a 0.9, indicando que na posição axial próxima a 15 diâmetros do bocal temos uma mistura de combustível-ar próximo a 90%. O decréscimo da fração de mistura deve-se aos efeitos de difusão/mistura.

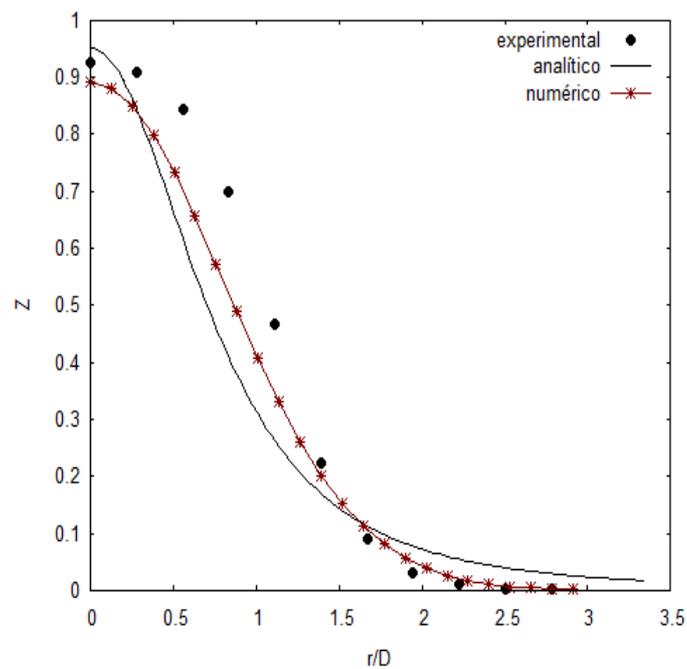


Figura 5.8: Fração de mistura ao longo do raio em $x/D = 15$ para chama Sandia C

O resultado apresentado na figura 5.9 mostra que na posição $x/D = 30$ houve uma melhora na comparação dos resultados; a fração de mistura experimental decresce mais rapidamente que a numérica. A fração de mistura inicia-se próximo a 70% e a discrepância é maior em $r/D = 2.5$. Esta discrepância pode também

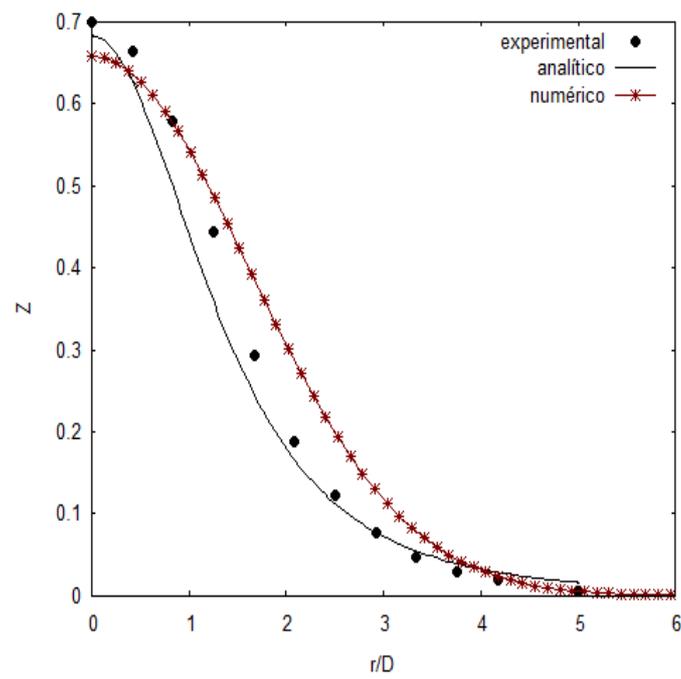


Figura 5.9: Fração de mistura ao longo do raio em $x/D = 30$ para chama Sandia C

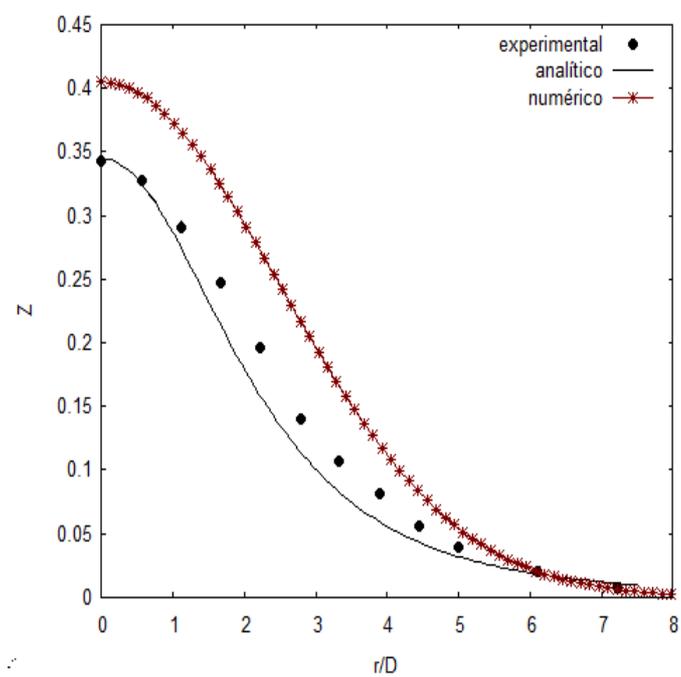


Figura 5.10: Fração de mistura ao longo do raio em $x/D = 45$ para chama Sandia C

estar relacionada ao tipo de malha empregada e seu refinamento; como a malha vai ficando mais grossa à medida que se afasta do bocal na direção da linha de centro, a tendência é que nos próximos resultados esta discrepância aumente ainda mais.

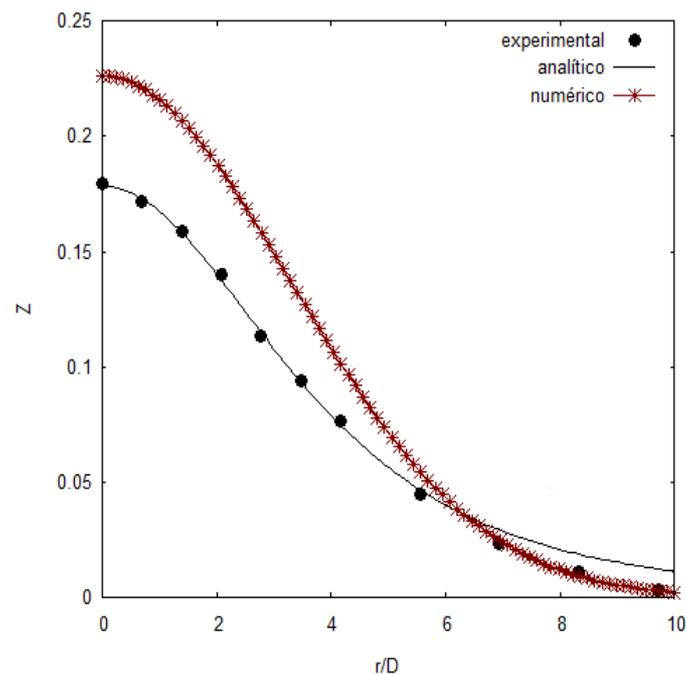


Figura 5.11: Fração de mistura ao longo do raio em $x/D = 60$ para chama Sandia C

A figura 5.10 mostra a fração de mistura ao longo do raio na posição $x/D = 45$. No resultado experimental a fração de mistura inicia-se em 0.4 enquanto que o numérico em 0.35; isto se deve ao efeito da viscosidade. Observe que na chama real a turbulência é de alta intensidade, o que se torna complexo representar num modelo numérico.

A figura 5.11 mostra a evolução da fração de mistura na posição axial $x/D = 60$ e as discrepâncias aumentaram ainda mais. Enquanto que na fração de mistura experimental inicia-se em aproximadamente 0.225, o resultado numérico inicia em 0.175, praticamente a mesma diferença apresentada nos resultados anteriores.

As discrepâncias podem estar relacionadas com o tipo de malha utilizada, após o estudo de vários tipos, a malha mais razoável para baixo custo foi de 100x70 pontos com refinamento na saída na linha de centro do jato, conforme figura 4.2. Uma alternativa para melhorar os resultados seria o refinamento da malha, mas isto acarretaria num aumento do esforço computacional. Os resultados obtidos por esta malha, conforme indicado na figura 5.7 são razoáveis para entender o comportamento da chama.

Numa tentativa de melhor entender o surgimento das discrepâncias considere que a difusão molecular é um exemplo de fenômeno de transporte de matéria onde a mistura (combustível-ar) é transportada devido ao movimento das moléculas do fluido [48]. Este movimento faz com que, do ponto de vista macroscópico, a mistura passe das zonas de elevada concentração para zonas de baixa concentração. Isto explica o decréscimo da fração de mistura ao longo do eixo de simetria nas figuras 5.1 a 5.11.

A viscosidade é a propriedade dos fluidos correspondente ao transporte microscópico de quantidade de movimento por difusão molecular [23]. Ou seja, quanto menor a viscosidade, maior tende a ser o espalhamento. Define-se pela lei de Newton da viscosidade a tensão

$$\tau = -\mu \frac{\partial u}{\partial y} \quad (5.1)$$

onde μ é o coeficiente de viscosidade ou viscosidade dinâmica e o sinal de menos na equação (5.1) indica que a tensão de cisalhamento é exercida, no sentido de diminuir a velocidade. Conforme a equação (4.63), a viscosidade é representada em função da temperatura. A seguir mostra-se a distribuição da temperatura na chama em análise.

5.3 Temperatura ao longo do eixo de simetria e secções radiais

No que segue vamos apresentar o comportamento da temperatura ao longo do eixo de simetria. No gráfico da figura 5.12 a temperatura foi normalizada com a temperatura de saída do jato. Para representar analiticamente a temperatura em função da distância axial x , combinamos a equação (3.52) com a equação (4.51) e, de forma análoga, obtemos a temperatura em função de x para a solução numérica.

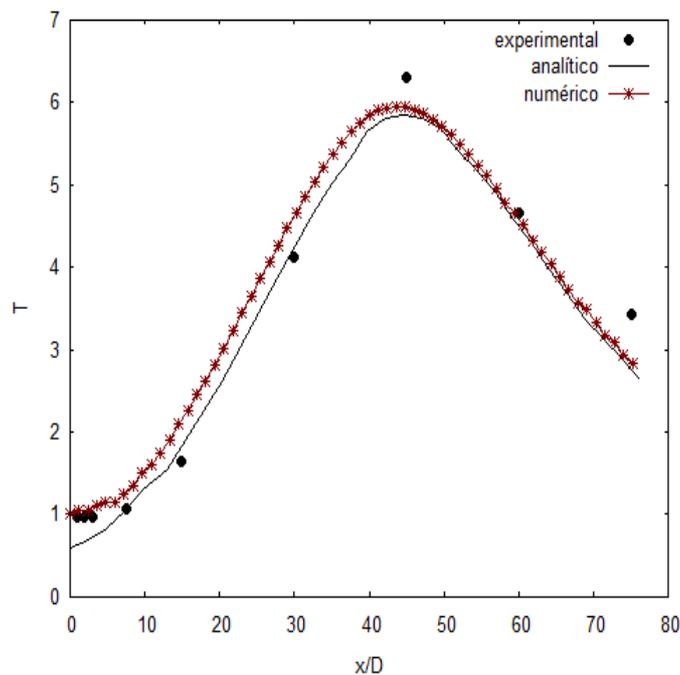


Figura 5.12: Temperatura ao longo do eixo de simetria para chama Sandia C

Conforme mostra a figura 5.12, a temperatura cresce até atingir o seu máximo (próximo a $x/D = 45$). É neste local onde ocorre a mistura estequiométrica, ou seja, onde o combustível e oxigênio são completamente consumidos.

Na figura 5.13 os perfis de temperatura radial são comparados nas posições $x/D = 15$, $x/D = 30$. Percebe-se certa discrepância, e isto ocorre devido a fato

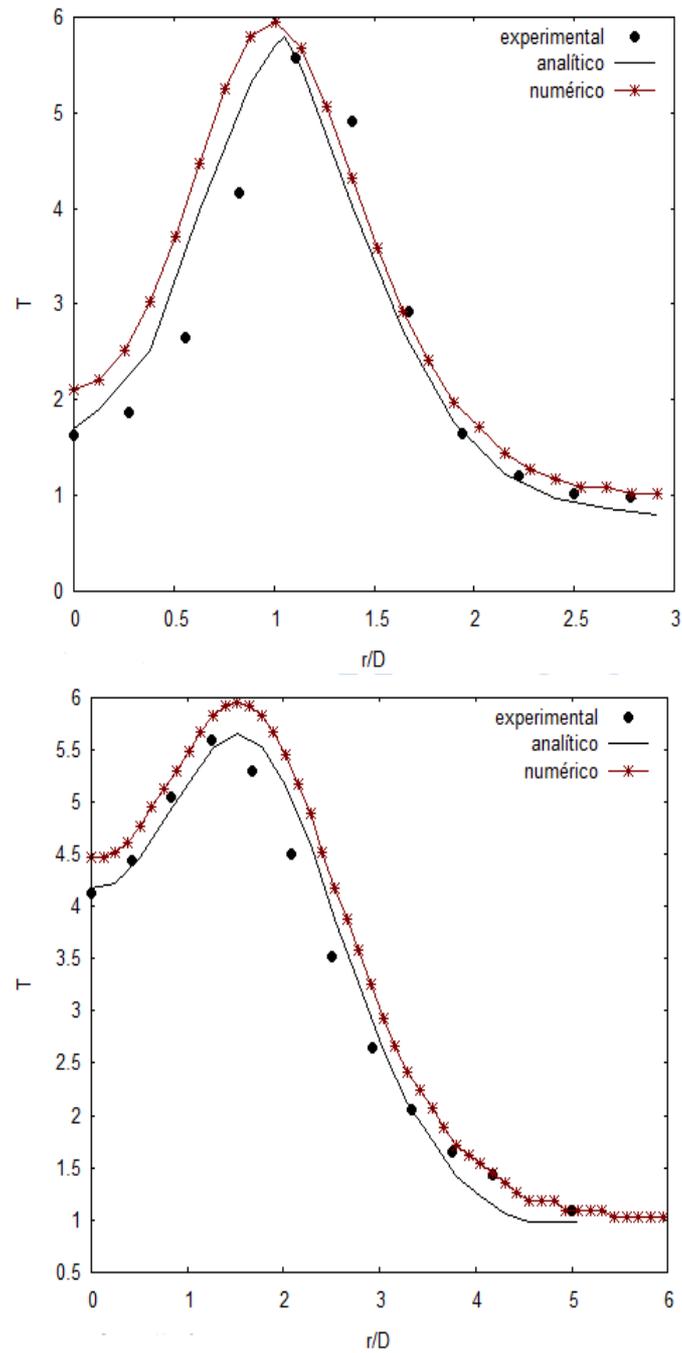


Figura 5.13: Temperatura nas secções radiais: (superior) $x/D = 15$, (inferior) $x/D = 30$ para chama Sandia C

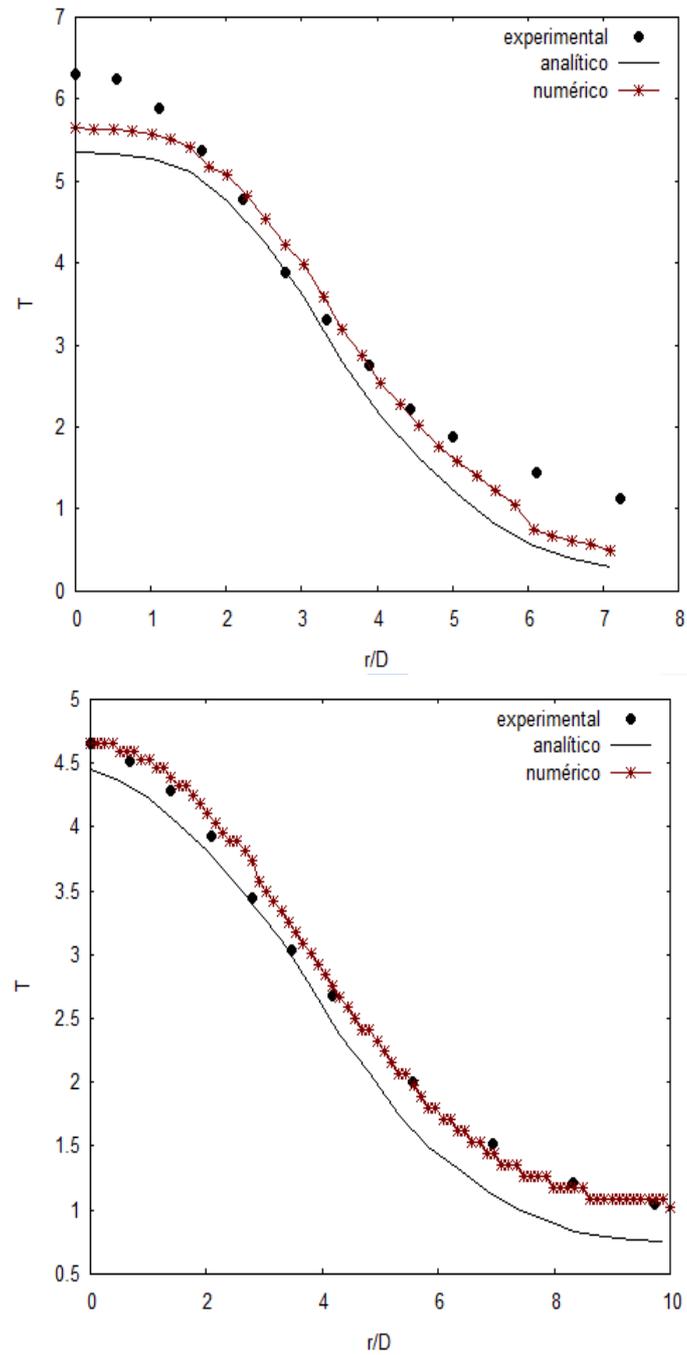


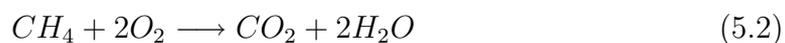
Figura 5.14: Temperatura nas secções radiais: (superior) $x/D = 45$, (inferior) $x/D = 60$ para chama Sandia C

da simulação numérica não levar em conta a perda de calor por radiação, além dos efeitos devido à malha e viscosidade mencionados anteriormente. O resultado numérico para a temperatura é semelhante ao experimental. Nas posições $x/D = 15$ e $x/D = 30$ a temperatura cresce e decresce atingindo o seu ponto máximo na condição estequiométrica.

A figura 5.14 apresenta os perfis de temperatura radial nas posições $x/D = 45$ e $x/D = 60$. Nestas posições a temperatura decresce logo após a posição onde ocorre a mistura estequiométrica. Como já foi mencionado no capítulo 3, o local de condição estequiométrica da chama é de maior importância na chama, pois nele ocorre efetivamente o processo de combustão de combustível e ar, de forma que suas espécies neste local são consumidas ou produzidas em maiores proporções, conforme indicaremos na sequência deste trabalho.

5.4 Frações mássicas de CH_4 , O_2 , CO_2 e H_2O

O comportamento das frações de massa das espécies em chamas de propano são semelhantes ao da chama C para Damköhler elevado. A seguir serão apresentados gráficos das concentrações de algumas espécies envolvidas no processo de combustão. Conforme foi estudado no capítulo 3, a equação (3.11) descreve a reação global da combustão:



A equação (5.2) indica que a reação de metano com oxigênio produz dióxido de carbono e vapor d'água, que é conhecida como um mecanismo de reações globais em uma única etapa. Representar a combustão das espécies envolvidas em uma

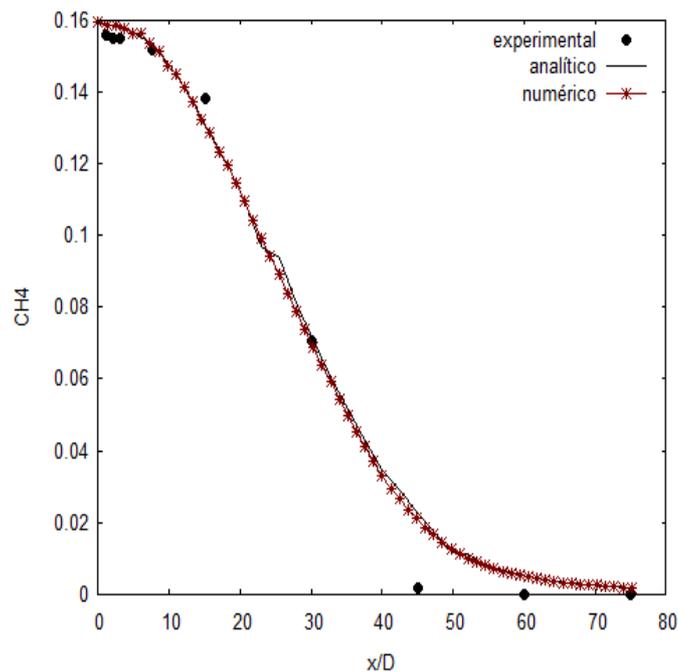
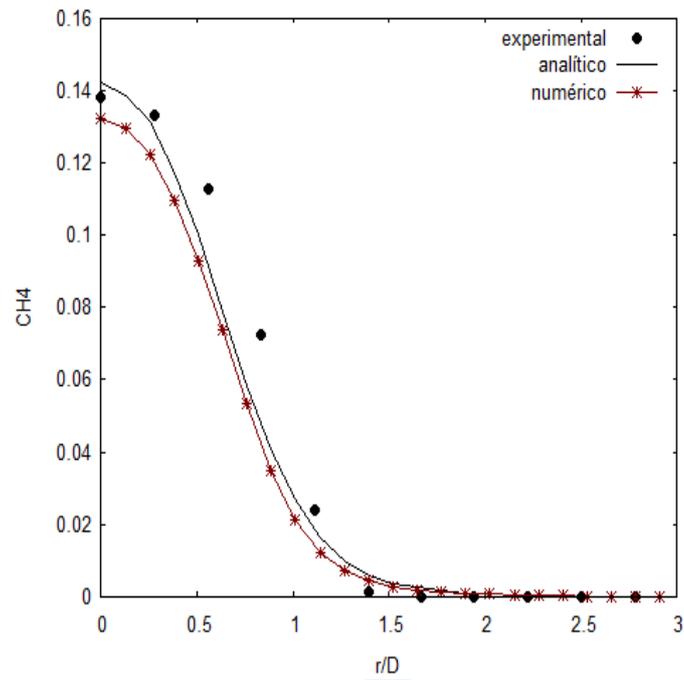
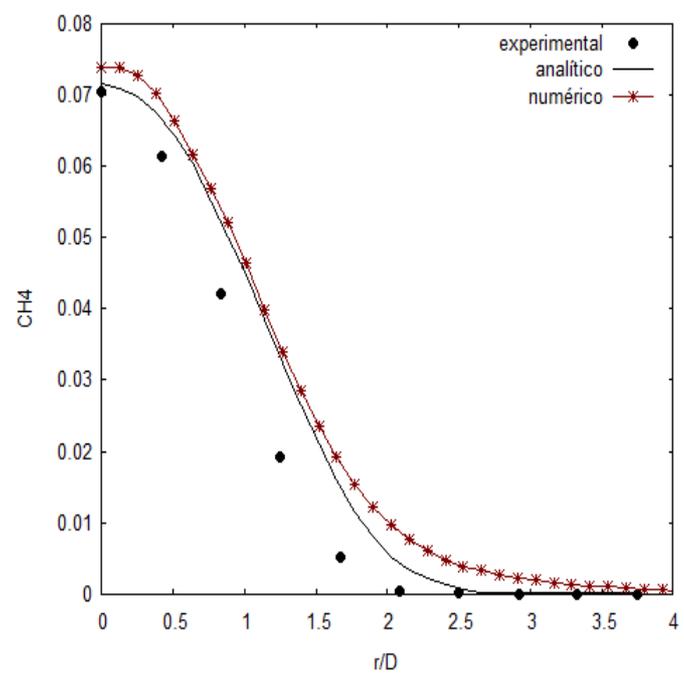


Figura 5.15: Fração mássica de CH_4 ao longo do eixo de simetria para a chama Sandia C

única etapa é uma aproximação bem simplificada do que realmente acontece, o que aumenta significativamente a estabilidade do método numérico.

A figura 5.15 apresenta o comportamento da fração de massa de CH_4 ao longo do eixo de simetria; o decréscimo é resultado do consumo do combustível à medida que o jato se desenvolve. Os resultados numéricos estão em boa concordância com os resultados experimentais.

A figura 5.16 mostra a fração de massa de CH_4 nas posição $x/D = 15$. Os resultados apresentam certa discrepância, mas o comportamento é o mesmo, ou seja, um decréscimo da fração de massa do metano até seu consumo. Fazendo uma comparação destes resultados com a evolução do metano na figura 5.15 verifica-se que os resultados são coerentes; por exemplo, na figura 5.16 onde $r = 0$, a fração de mistura está próxima a 0,14 e o mesmo ocorre na figura 5.15 na posição $x/D = 15$. Logo, os resultados para a evolução do metano estão bem reproduzidos.

Figura 5.16: Fração de massa de CH_4 em $x/D = 15$ Figura 5.17: Fração de massa de CH_4 em $x/D = 30$

A figura 5.17 mostra a fração de massa de CH_4 na posição $x/D = 30$; inicia-se com uma fração de massa de combustível em aproximadamente 0.075% e logo decresce como nos casos anteriores.

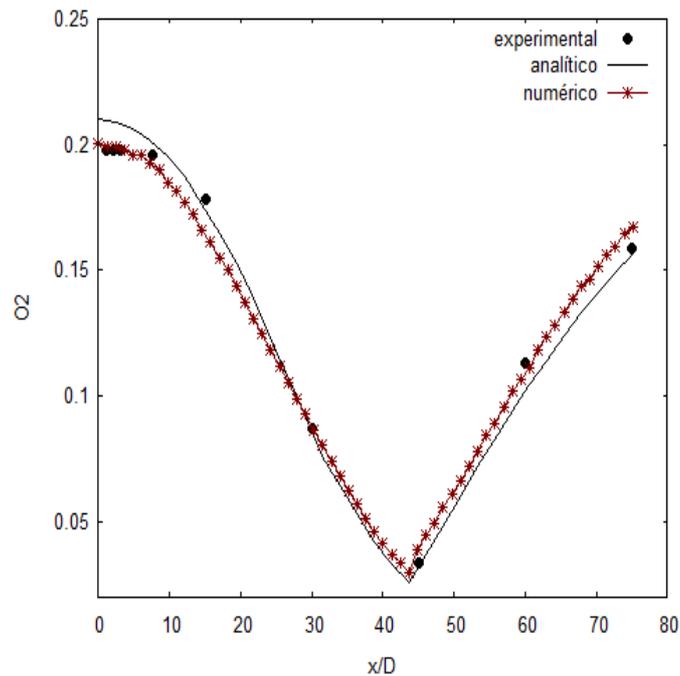


Figura 5.18: Fração mássica de O_2 ao longo do eixo de simetria

Na figura 5.18 mostramos a evolução da fração de massa de O_2 ao longo do eixo de simetria. Nota-se que há um decréscimo na fração de massa decorrente do consumo de oxigênio pela chama que atinge um ponto mínimo onde quase todo o oxigênio é consumido, esta é a condição estequiométrica. Logo após a fração de massa do oxigênio volta a crescer pois é onde há menos combustível e a mistura combustível-ar torna-se rica em oxigênio, porém pobre em combustível. Na figura 5.18 o resultado numérico obtido é coerente com a solução experimental. A seguir vamos indicar os resultados nas secções radiais para o O_2 , nas posições $x/D = 15$, $x/D = 30$, $x/D = 45$ e $x/D = 60$.

As figuras 5.19 e 5.20 apresentam os perfis de fração de massa radial de O_2 em $x/D = 15$ e 30 onde se verifica haver pequenas discrepâncias. Na figura 5.19 percebemos um decréscimo até a posição $r/D = 1,2$ aproximadamente, e seu mínimo ocorre na condição estequiométrica; logo após a fração de massa do oxigênio volta a crescer devido ao consumo do combustível.

A figura 5.20 tem um comportamento parecido com o resultado da figura anterior; o oxigênio decresce até atingir um mínimo na condição estequiométrica e após cresce devido ao consumo do combustível.

Nas figuras 5.21 e 5.22 não ocorre o decréscimo de O_2 pois, segundo a figura 5.18, a posição da condição estequiométrica ocorre aproximadamente em $x/D = 45$, e a partir desta posição a fração de massa do oxigênio tende a crescer, pois o combustível foi consumido.

No que segue vamos apresentar a fração de massa de CO_2 ao longo do eixo de simetria e ao longo do raio. A sua distribuição ao longo do eixo é mostrada na figura 5.23.

Conforme mostra a equação (5.1), o dióxido de carbono é produzido pela reação do metano com o oxigênio, e os resultados mostram que a fração de massa de CO_2 vai crescendo à medida que o jato se desenvolve, atingindo um valor máximo próximo a $x/D = 45$, que é a posição de condição estequiométrica; após atingir este valor máximo, a fração de massa passa a decrescer.

Na figuras 5.24 e 5.25 apresentamos a distribuição da fração de massa do dióxido de carbono em função do raio, nas posições $x/D = 45$ e $x/D = 60$.

O dióxido de carbono cresce até atingir a condição estequiométrica e logo após decresce. Ao longo do raio há somente decréscimo de CO_2 , e a concordância entre os resultados parece ser razoável.

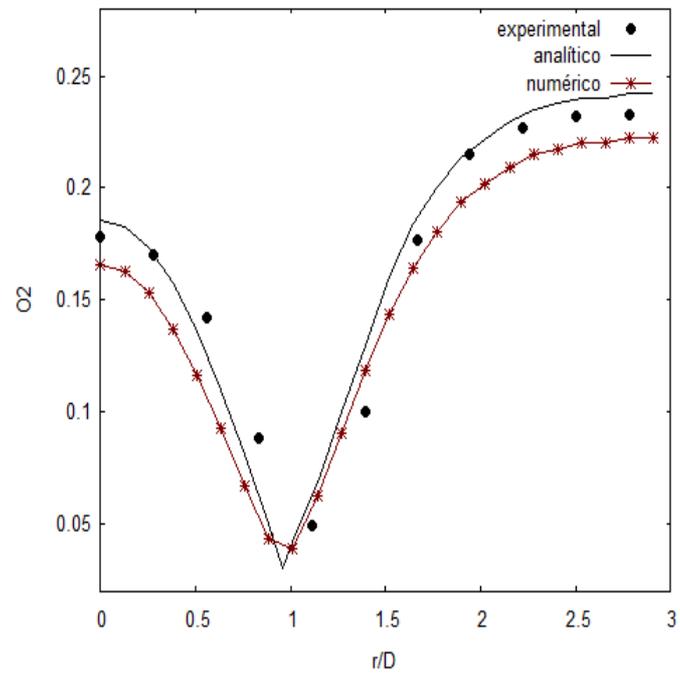


Figura 5.19: Fração mássica de O_2 em $x/D = 15$

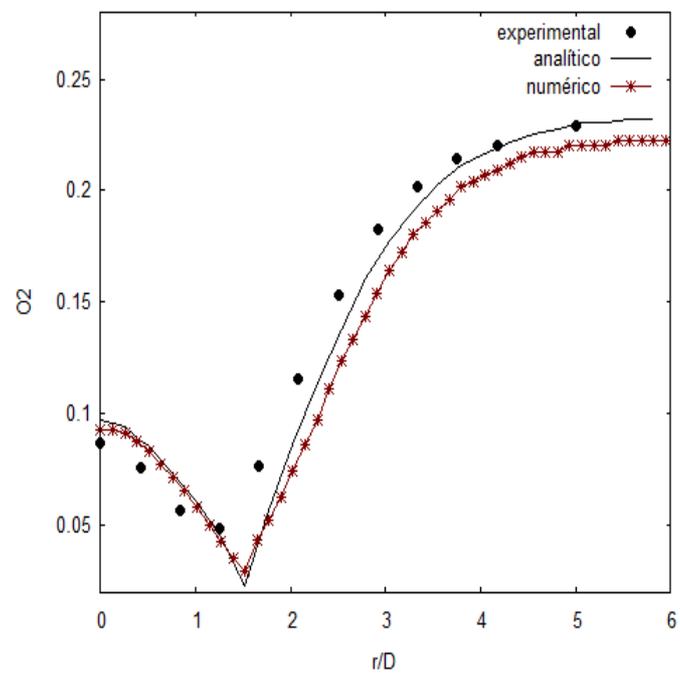


Figura 5.20: Fração mássica de O_2 em $x/D = 30$

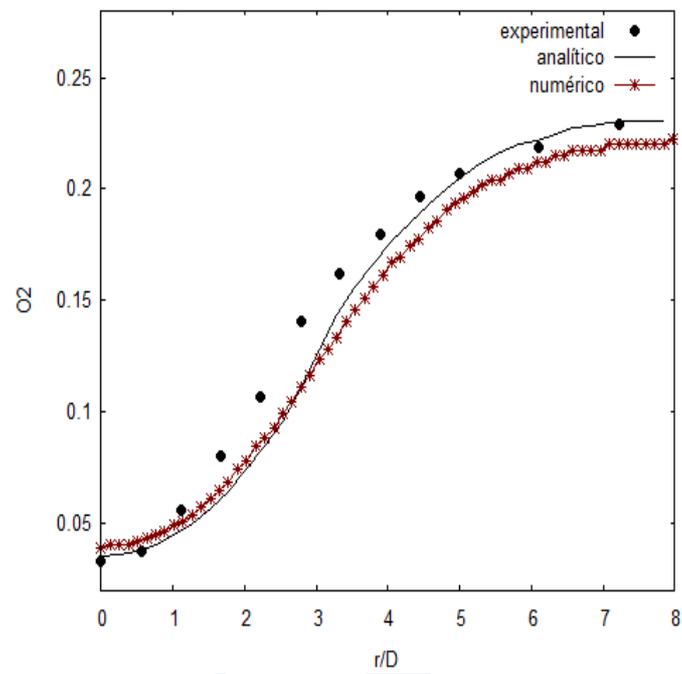


Figura 5.21: Fração mássica de O_2 em $x/D = 45$

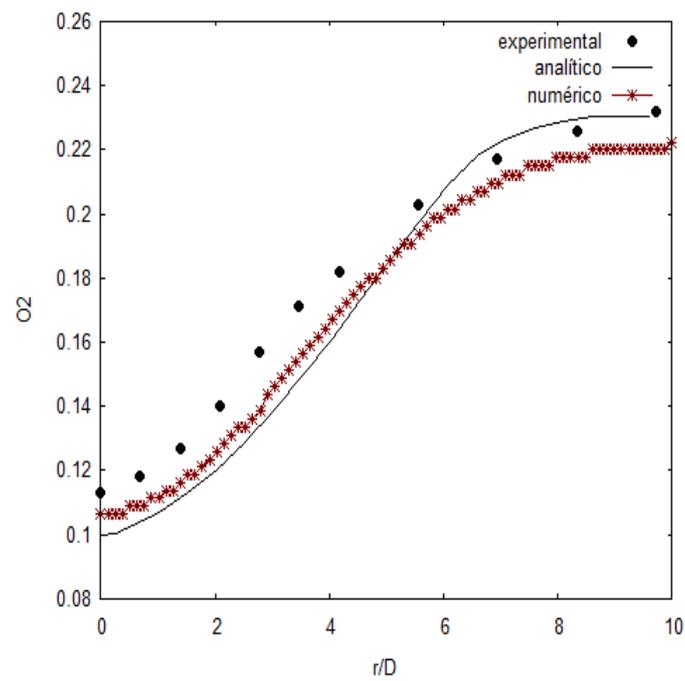


Figura 5.22: Fração mássica de O_2 em $x/D = 60$

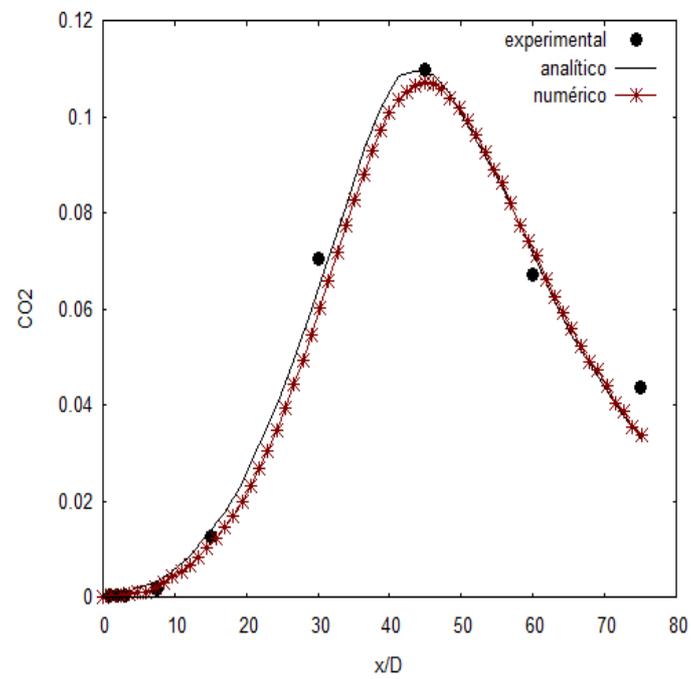


Figura 5.23: Fração de mistura de CO_2 ao longo do eixo de simetria

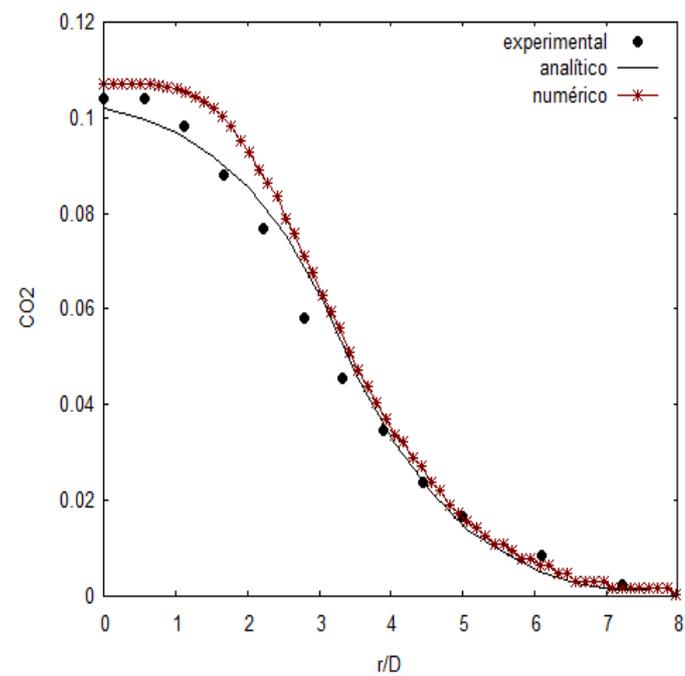


Figura 5.24: Fração mássica de CO_2 em $x/D = 45$

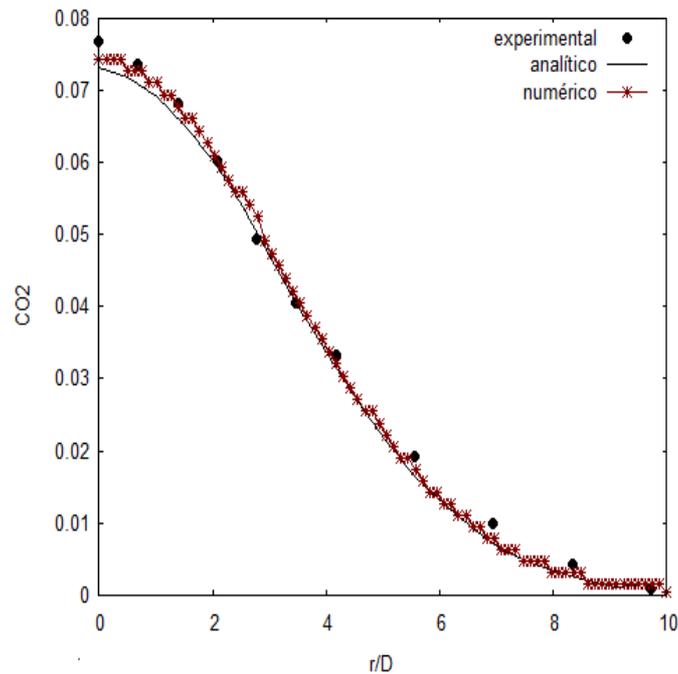


Figura 5.25: Fração mássica de CO_2 em $x/D = 60$

Para concluir o estudo do comportamento dos produtos mostrados na equação (5.2), vamos comparar os resultados da fração de massa de H_2O .

Para o H_2O (vapor d'água) o comportamento da fração de massa ao longo do eixo de simetria é semelhante ao CO_2 ; por simplicidade vamos mostrar somente os resultados da fração de massa de H_2O ao longo do raio nas posições $x/D = 15$ e $x/D = 30$, nas posições $x/D = 45$ e $x/D = 60$ os resultados são semelhantes aos apresentados para o CO_2 . Após atingir a posição aproximada de $x/D = 45$ a fração de mistura de H_2O só decresce, pelo mesmo motivo que o do CO_2 , conforme apresentaram as figuras 5.24 e 5.25. Assim, concluímos o presente trabalho com as comparações dos resultados experimentais, numérico e analítico para o jato de propano e a Chama Sandia C de metano, bem como indicamos as suas principais características. Segue no próximo capítulo as conclusões do trabalho.

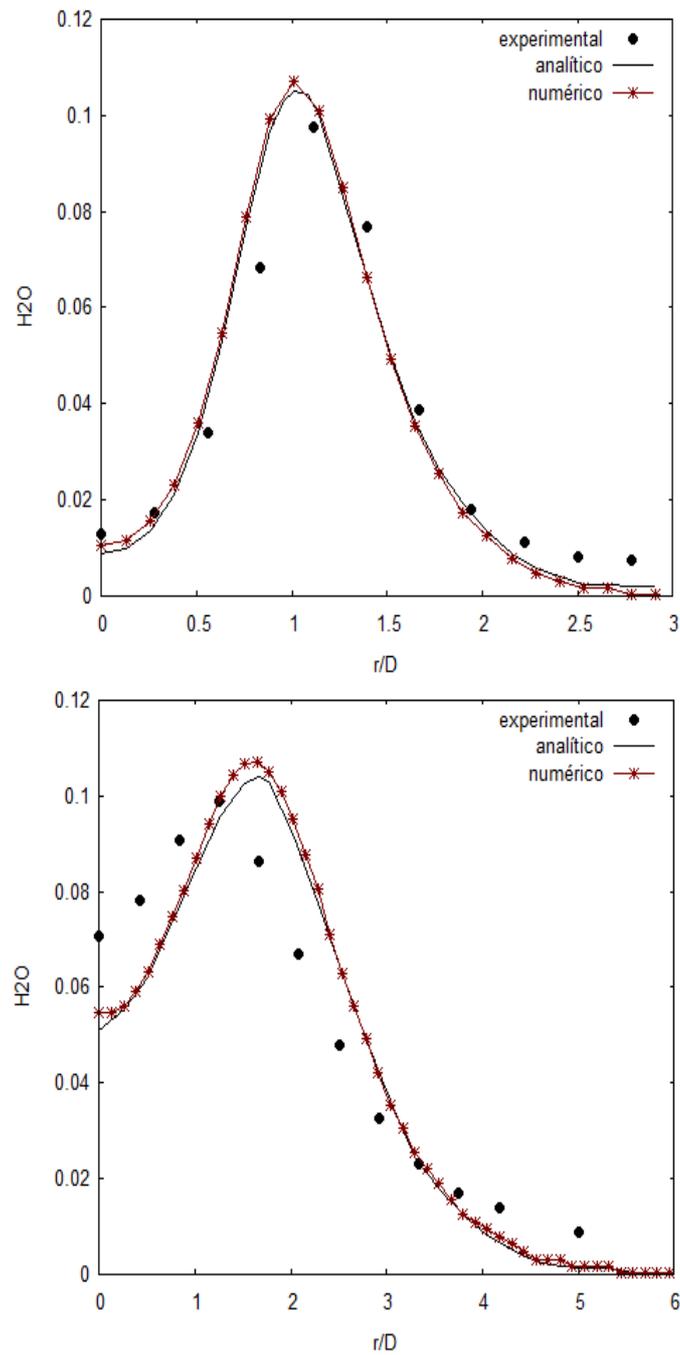


Figura 5.26: Fração mássica de H_2O : (superior) $x/D = 15$, (inferior) $x/D = 30$

6 CONCLUSÕES

O propósito do presente trabalho foi a simulação numérica de uma chama difusiva complementado com um estudo analítico e comparação com os dados experimentais encontrados na literatura para a validação das soluções. Embora as chamas de Propano e Chama Sandia C sejam turbulentas, suas propriedades fundamentais comportam-se como as de chamas laminares. Existem vários parâmetros adimensionais que classificam os tipos de chamas conforme as suas estruturas; no presente trabalho foi utilizado como parâmetro o número de Damköhler, que classifica as chamas comparando suas escalas de tempo turbulento com escalas de tempo das reações químicas. Como as chamas estudadas neste trabalho satisfazem a condição de Damköhler elevado e Reynolds moderado, foi possível comparar os resultados numéricos e analíticos de forma adequada.

O código computacional em desenvolvimento pelo grupo para a simulação de chamas demonstrou ser um modelo eficiente nas simulações feitas, pois os resultados numéricos, na maioria dos casos, apresentaram boa concordância com os dados experimentais e analíticos, além da simulação utilizando este código apresentar baixo custo computacional (10.000 iterações num tempo de aproximadamente 200 minutos). Este ganho computacional deve-se a simplicidade do método utilizado e pela geometria cartesiana da malha computacional.

Da literatura sabemos que esquemas de aproximação de primeira ordem (utilizadas neste trabalho), apresentam em geral forte difusão numérica. A maior dificuldade apresentada no presente trabalho foi implementar um esquema do tipo Total Variation Diminishing (TVD) com limitador de fluxo adequado para simulações em combustão.

Na simulação da chama algumas simplificações foram realizadas, por exemplo assumir como constantes algumas propriedades nos mecanismos de reações e trans-

porte, simplificações que não comprometeram a comparação dos resultados. No processo de combustão, existe uma grande variação de temperatura e concentração das espécies envolvidas; conseqüentemente, grande variação das suas propriedades. Para uma análise mais completa do modelo estudado, poderiam ser atribuídas também condições variáveis, mais complexas para a viscosidade.

Algumas discrepâncias observadas nos resultados apresentados no trabalho devem-se também a estas simplificações. Contudo, foram obtidos resultados satisfatórios para a chama difusiva que foi o propósito deste trabalho. Verificou-se que é possível a determinação das principais características de uma chama difusiva via métodos analíticos e numéricos de forma simplificada, o que se torna muito útil na análise de chamas difusivas mais complexas, como as chamas turbulentas. Um bom conhecimento dos mecanismos de chamas tem motivado novos estudos para melhor modelar os processos de combustão.

Bibliografía

- [1] ANSYS Company. **CFX Solver Theory Manual**. Oxfordshire: CFX, 2006.
- [2] BARLOW, R. S., FRANK, J. H., **Proc. Comb. Inst.**27:1087, 1998.
- [3] BICKLEY, W., **The plane jet**. Phil. Mag. Ser. pp. 727-731, 1993.
- [4] BORIS, J. P. **New Directions in Computational Fluid dynamics**. Annual Review Fluid Mechanics, Vol. 21, pp. 345-385, 1989.
- [5] BUCKMASTER, J., CLAVIN, P., LIÑÁN, A., MATALON, M., PETERS, N. SIWASHINSKY, G., WILLIAMS, F. A., **Combustion Theory and modeling**. Proceedings of the Combustion Institute, pp. 1-19, 2005.
- [6] BURCAT, A., **Thermochemical Data for Combustion Calculations, in Combustion Chemistry**. Gardiner jr., W.C., (Ed.), Springer-Verlag, 1984.
- [7] BURKE, S. P., SHUMANN, T. E. W. **Diffusion Flames**.1st Symp. (Int) on Combustion, The Combustion Institute, 1928.
- [8] CHEN, L. D., VILIMPOC, V., GOSS, L. P., DAVID, R. W., MOORE, E. F., ROQUEMORE, W. M., **Time evolution of a buoyant jet diffusion flame**. In: Symposium (Int.) on Combustion, 24., 1992, Sydney, Australia, PA: The Combustion Institute, pp. 303-310, 1992.
- [9] CHUNG, T. J. **Computational Fluid Dynamics**, Cambridge Universit Press, 2002.
- [10] CURRAN, H. J., GAFFURI, P., PITZ, W. J., WEST BROOK, C. K., **A comprehensive Modeling Study of Iso-Octane oxidation**. Combustion and Flame 129(3), 2002, 253-280.

- [11] CRISTALDO, C. F. C., DE BORTOLI, A. L., **Estimativa das principais características de uma chama difusiva**. SBA. Seminário Brasileiro de Análise, Novembro 2008, p. 8.
- [12] DAMKÖHLER, G., **Tecnical Memorials**, Nro 112. . NACA, 1947.
- [13] DE BORTOLI, A. L., **Large eddy simulation of a confined jet diffusion flame using a finite difference method**. Latin American Applied Research. An international Journal, (por aparecer).
- [14] DE BORTOLI, A. L., **Simulation of a Confined Turbulent Non-premixed Piloted Methane Jet Flame**. Engineering Applications of Computational Fluid Mechanics Vol. 1, N.4, pp. 337 - 349, 2007.
- [15] DIBBLE, R. W., HARTMANN, V., SCHEFER, R. W., KOLLMANN, W., **Conditional Sampling of Velocity and Scalars in Turbulent Flames using Simultaneous LDV-Raman Scattering**. Exper. Fluids 5, pp. 103-113, 1987.
- [16] DIBBLE, R. W., KOLLMANN, W., SCHEFER, R. W., **Conserved Scalar Fluxes Measured in a Turbulent Nonpremixed Flame by Combined Laser Doppler Velocimetry and Laser Raman Scattering**. Combust. Flame 55, pp. 307-321, 1984.
- [17] DIBBLE, R. W., KOLLMANN, W., SCHEFER, R. W., **Scalar Dissipation in Turbulent Reacting Flows: Measurements and Numerical Model Predictions**. Twentieth Symposium (International) on Combustion, The Combustion Institute, Pittsburgh, 1985.
- [18] EVANS, L. **Partial differential equations**. American Mathematical Society, Providence, 1998.
- [19] FORTUNA, A. O., **Técnicas Computacionais para Dinâmica dos Fluidos: Conceitos Básicos e Aplicações**. Edusp, 2000.

- [20] GAYDON, A. G., WOLFARD, H. G., **Flames: Their Structure, Radiation and Temperature**. 4th edition, Chapman and Hall, pp 7-176, London, 1979.
- [21] GLASSMAN, I., **Combustion**, Academic Press, In., New York, 1977.
- [22] GOULDIN, F. C., SCHEFER, R. W., JOHNSTON, S. C., KOLLMANN, W., **Nonreacting Turbulent Mixing Flows**. Prog. Energy Combust. Sci. 12, pp. 257-303, 1986.
- [23] KANURY, A. M., **Introduction to Combustion Phenomena**. Gordon and Beach Science Puplicher, 1975.
- [24] KONSEN, P. H. A., **Estudo Numérico de um Modelo Conectivo-Difusivo-Reativo em Combustão baseado no Método de Elementos Finitos**. Dissertação de mestrado, UFRGS, PPGMAp, 2006.
- [25] KOUTMOS, P., **Damköhler Number Description of Local Extinction in Turbulent Methane Jet Diffusion Flames**. Journal of Fuel, No 78, pp. 623-626, 1999.
- [26] KRULL, R. P., **Efeitos do número de Reynolds e da Razão de equivalência na emissão de NO_x em chama difusa turbulenta**. Dissertação de Mestrado, INPE-14408-TDI/1128, 2006.
- [27] KUO, K. K., **Principles of combustion**. Wiley-Interscience, John Wiley and Sons, New York, 1986.
- [28] LIBBY, P. A., WILLIAMS, F. A., **Turbulent Reating Flows**. Academic Press, 1994.
- [29] LIN, Y., LAU, K. S., CHAN, C. K., GUO, Y.C., LIN, W.Y., **Structures of Scalar Transport in 2D Transitional Jet Diffusion Flames by LES**. International Journal of Heat and Mass Transfer, pp. 3841-3851, 2003.

- [30] LIEW, S. K., BRAY, K. C., MOSS, J. B., **A flamelet model of turbulent non-premixed combustion.** Combust. Sci. and Tech., 1981.
- [31] LIÑÁN, A., **On the Internal Structure of Laminar Diffusion Flames.** Technical Note, Instituto Nacional del Tecnologia Aeronautica, Esteban Terradas, Madrid, Spain, 1961.
- [32] LIÑÁN, A., WILLIAMS, F. A., **Fundamental aspects of combustion.** Oxford: University Press, 1993.
- [33] MASRI, A. R., DIBBLE, R. W., BARLOW, R. S., **The Structure of Turbulent Nonpremixed Flames Revealed by Raman-Rayleigh-Lif Measurements.** Prog. Energy Combust. Sci., pp. 307-362, 1996.
- [34] NETO, A. S., **Fundamentos de turbulência nos fluidos.** In: Turbulência. Rio de Janeiro, RJ: Associação Brasileira de Ciências Mecânicas ABCM, (Coleção Cadernos de Turbulência, Vol. 1), pp. 1-48, 2002.
- [35] PETERS, N., **Fifteen lectures on laminar and turbulent combustion.** RWTH Aachen, 1993.
- [36] PETERS, N., **Laminar flamelet concepts in turbulent combustion.** In Proceedings of the Twenty-First Symposium (International) on Combustion, 1986.
- [37] PETERS, N., **Laminar diffusion flamelet models in non-premixed turbulent combustion.** Progress in Energy and Combustion Science, 1984.
- [38] PETERS, N., **Turbulent Combustion.** Cambridge University Press, 2000.
- [39] PITSCH, H., PETERS, N., **A Consistent Flamelet Formulation for Non-Premixed Combustion Considering Differential Diffusion Effects.** Combustion and Flame, pp. 26-40, 1998.

- [40] POINSOT, T., VEYNANTE, D., **Theoretical and numerical combustion**. Edward, Inc., Philadelphia, 2005.
- [41] POPE, S. B., **Turbulent Flows**. Cambridge, 2000.
- [42] SCHEFER, R. W., DIBBLE, R. W., **Rayleigh Scattering Measurements of Mixture Fraction in a Turbulent Nonreacting Propane Jet**. Paper No. AIAA-86-0278, presented at AIAA 24th Aerospace Sciences Meeting, Reno, Nevada, January, pp. 6-9, 1986.
- [43] SCHEFER, R. W., HARTMANN, V., DIBBLE, R. W., **Conditional Sampling of Velocity in a Turbulent Nonpremixed Propane Jet**. Sandia Report SAND87-8610, February, 1987.
- [44] SCHEFER, R. W., JOHNSTON, S. C., DIBBLE, R. W., GOULDIN, F. C., KOLLMANN, W., **Nonreacting Turbulent Mixing Flows: A Literature Survey and Data Base**. Sandia Report SAND86-8217, Sandia National Laboratories, Livermore, CA, 1985.
- [45] SCHLICHTING, H., **Boundary Layer Theory**. McGraw-Hill, New York, 1995.
- [46] SCHLICHTING, H., **Laminare Strahlenausbreitung**. ZAMM 13, pp. 260-263, 1993.
- [47] SOUZA, A. H., **Estudo numérico da termo-aerodinâmica de câmaras de combustão para turbinas a gás: aplicação ao caso das micro turbinas**. Tese de Doutorado, UNIFEI, PPGEM, 2006.
- [48] STARNER, S. H., BILGER, R. W., **Characteristics of a piloted diffusion flame designed for study of combustion turbulence interactions**. Combustion and Flame, pp. 29-38, 1985.
- [49] STREHLOW, R. A., **Fundamentals of combustion**. Scranton, Pennsylvania, 1968.

- [50] TNF WORKSHOP, <http://www.ca.sandia.gov/TNF>, R. Barlow, Eds., Sandia National Laboratories.
- [51] WARNATZ, J., MAAS, U., DIBBLE, R. W., **Combustion physical and chemical fundamentals, modeling and simulation, experiments, pollutant formation**. 3rd ed. New York, Springer, 2001.
- [52] WILLIAMS, F. A., **Turbulent mixing in nonreactive and reactive flows**, Plenum Press, New York, 1975.
- [53] ZELDOVICH, Y. B., BARENBLATT, G. I., LIBROVICH, V. B., MAKHVILADZE, G. M., **The mathematical Theory of Combustion and Explosions**. Consultants Bureau-Plenum Publishing Corporation, New York, 1985.

Apêndice A

A.1 Critérios de convergência do método de Gauss-Seidel

Um método é dito iterativo quando fornece uma seqüência de aproximações da solução, cada uma das quais obtidas das anteriores pela repetição do mesmo tipo de processo.

Dado o sistema linear $Ax = b$, definimos L, IeR por:

$$l_{i,j} = \begin{cases} a_{i,j}, & \text{se } i > j \\ 0, & \text{se } i \leq j \end{cases} \quad d_{i,j} = \begin{cases} a_{i,j}, & \text{se } i = j \\ 0, & \text{se } i \neq j \end{cases} \quad r_{i,j} = \begin{cases} a_{i,j}, & \text{se } i < j \\ 0, & \text{se } i \geq j \end{cases}.$$

Podemos então escrever:

$A = L + D + R$ que resulta em

$$(L + D + R)x = b$$

$$(L + D)x = -Rx + b$$

$$x = -(L + D)^{-1}Rx + (L + D)^{-1}b.$$

O processo iterativo definido por:

$$X^{k+1} = -(L + D)^{-1}RX^{(k)} + (L + D)^{-1}b$$

é chamado de Gauss-Seidel.

Explicitando as componentes, usando para isso a equação do processo na forma:

$$(L + D)X^{(k+1)} = -RX^{(k)} + b$$

ou

$$DX^{(k+1)} = -LX^{(K+1)} - RX^{(k)} + b$$

resulta que o método de Gauss-Seidel consiste na determinação de uma sequência de aproximadores de índice K da forma [1,2,3]

$$X_1^{(k)}, X_2^{(k)}, \dots, X_n^{(k)}, k = 1, 2, 3, \dots$$

A partir de valores iniciais

$$X_1^{(0)}, X_2^{(0)}, \dots, X_n^{(0)},$$

através do processo iterativo definido por

$$\begin{aligned} X_1^{(k+1)} &= 0 - a_{12}X_2^{(k)} - \dots - a_{1n}X_n^{(k)} + b_1 \\ X_2^{(k+1)} &= -a_{21}X_1^{(k+1)} - 0 - a_{23}X_3^{(k)} - \dots - a_{2n}X_n^{(k)} + b_2 \\ X_3^{(k+1)} &= -a_{31}X_1^{(k+1)} - a_{32}X_2^{(k+1)} - 0 - \dots - a_{3n}X_n^{(k)} + b_3 \\ &\vdots \\ X_n^{(k+1)} &= -a_{n1}X_1^{(k+1)} - a_{n2}X_2^{(k+1)} - a_{n3}X_3^{(k+1)} \dots - 0 + b_n \end{aligned}$$

tem-se que as componentes de X^{k+1} são calculadas sucessivamente sem a necessidade de se calcular $(L + D)^{-1}$.

A seguir apresenta-se os critérios de convergência do método iterativo de Gauss-Seidel.

A.1.1 Critério de Sassenfeld

[1,2,3] Aplicando o critério geral de convergência, calculemos:

$$\|B\|_\infty = \|(L + D)^{-1}R\|_\infty$$

onde $\|B\|_\infty = \min k$. Portanto, se k satisfaz a desigualdade $\|Bx\|_\infty \leq k\|x\|_\infty$ teremos $\|B\|_\infty \leq k$.

Seja $y = Bx$

$$y = -(L + D)^{-1}Rx$$

$$(L + D)y = -Rx$$

ou

$$y = -Ly - Rx.$$

Assim o vetor y é obtido de x a partir das equações:

$$(I) \begin{cases} y_1 = 0 - a_{12}X_2 - a_{13}X_3 - \dots - a_{1n}X_n \\ y_2 = -a_{21}y_1 - 0 - a_{23}X_3 - \dots - a_{2n}X_n \\ y_3 = -a_{31}y_1 - a_{31}X_2 - 0 - \dots - a_{3n}X_n \\ \vdots \\ y_n = -a_{n1}y_1 - a_{n2}y_2 - a_{n3}y_3 - \dots - 0 \end{cases} .$$

Calculemos $\|y\|_\infty = \|Bx\|_\infty$ como

$$\|y\|_\infty = \max_i \|y_i\|.$$

A partir das equações (I) obtemos as seguintes majorações:

$$\begin{aligned} \|y_1\| &= \left| \sum_{j=2}^n a_{1j}x_j \right| \leq \sum_{j=2}^n |a_{1j}| |a_j| \leq \sum_{j=2}^n |a_{1j}| \max_j |x_j| \\ &= \beta_1 \|x\|_\infty \end{aligned}$$

onde

$$\beta_1 = \sum_{j=2}^n |a_{1j}|$$

$$\begin{aligned}
& \therefore \|y\| \leq \|x\|_\infty \\
\|y_2\| &= |a_{21}y_1 + \sum_{j=3}^n a_{2j}x_j| \leq \beta_1|a_{21}||x|_\infty + \sum_{j=3}^n |a_{2j}||x_j| \\
&\leq \beta_1|a_{21}||x|_\infty + \sum_{j=3}^n |a_{2j}| \max |x_j| \\
&= \beta_1|a_{21}||x|_\infty + \sum_{j=3}^n |a_{2j}||x_j|_\infty \\
&= (\beta_1|a_{21}| + \sum_{j=3}^n |a_{2j}|)||x|_\infty = \beta_2\|x\|_\infty
\end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned}
\beta_2 &= (\beta_1|a_{21}| + \sum_{j=3}^n |a_{2j}|) \\
&\therefore |y_2| \leq \beta_2\|x\|_\infty.
\end{aligned}$$

Analogamente, obtemos:

$$\begin{aligned}
|y_i| &\leq \sum_{j=1}^{i-1} \beta_j|a_{ij}||x|_\infty + \sum_{j=i+1}^n |a_{ij}||x_j| \\
&\leq \sum_{j=1}^{i-1} \beta_j|a_{ij}||x|_\infty + \sum_{j=i+1}^n |a_{ij}| \max_j |x_j| \\
&= (\sum_{j=1}^{i-1} \beta_j|a_{ij}| + \sum_{j=i+1}^n |a_{ij}|)||x|_\infty = \beta_i\|x\|_\infty
\end{aligned}$$

onde

$$\begin{aligned}
\beta_i &= (\sum_{j=1}^{i-1} \beta_j|a_{ij}| + \sum_{j=i+1}^n |a_{ij}|) \\
&\therefore |y_i| \leq \beta_i\|x\|_\infty
\end{aligned}$$

Portanto,

$$\|Bx\|_\infty = \|y\|_\infty = \max_i |y_i| \leq \max_i \beta_i\|x\|_\infty$$

onde

$$\|B\|_\infty = \|y\|_\infty = \max_i \beta_i.$$

Podemos enunciar agora o Critério de Sassenfeld conforme:

O método de Gauss-Seidel converge se:

$$\max_i \beta_i < 1$$

onde os β_i são calculados por recorrência através de:

$$\beta_i = \sum_{j=1}^{i-1} |a_{ij}| \beta_j + \sum_{j=i+1}^n |a_{ij}|.$$

A seguir apresenta-se mais um critério de convergência do método iterativo de Gauss-Seidel.

A.1.2 Critério das linhas

O método de Gauss-Seidel converge se o critério das linhas for satisfeito [1,2,3], isto é, se:

$$\max_i \sum_{j=1}^n |a_{ij}| < 1$$

implica que $\beta_i < 1$ $i = 1, 2, 3, \dots, n$.

De fato,

para $i = 1$, temos:

$$\beta_i = \sum_{j=2}^n |a_{ij}| \leq \max_i \sum_{j=1, j \neq 1}^n |a_{ij}| < 1$$

considere $\beta_j < 1$ para $j = 1, 2, 3, \dots, i - 1$. Então

$$\beta_i = \sum_{j=1}^{i-1} |a_{ij}| \beta_j + \sum_{j=1, j \neq 1}^n |a_{ij}| \leq \max_i \sum_{j=1, j \neq 1}^n |a_{ij}| < 1.$$

Portanto, $\max \beta_i < 1$ e o critério de Sassenfeld é verificado.

REFERÊNCIAS

[1] BARROSO, L. C., **Cálculo numérico**. Ed. Harper, 1983.

[2]CHAPRA, C., **Numerical Methods for Engineers**. Ed. McGraw-Hill, 2003.

[3]RUGGIERO, L., **Cálculo numérico**. Makron Books, 1997.