

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

# **Técnicas de Estabilização de Chamas Difusivas Turbulentas**

por

Charles Quevedo Carpes

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

Prof. Dr. Álvaro Luiz de Bortoli  
Orientador

Porto Alegre, fevereiro de 2012.

## CIP - CATALOGAÇÃO NA PUBLICAÇÃO

Carpes, Charles Quevedo

Técnicas de Estabilização de Chamas Difusivas Turbulentas / Charles Quevedo Carpes.—Porto Alegre: PPGMAp da UFRGS, 2012.

115 p.: il.

Dissertação (mestrado) —Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada, Porto Alegre, 2012.

Orientador: de Bortoli, Álvaro Luiz

Dissertação: Matemática Aplicada,  
Estabilização de Chamas, Combustão, Dinâmica dos Fluidos

# Técnicas de Estabilização de Chamas Difusivas Turbulentas

por

Charles Quevedo Carpes

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

## Mestre em Matemática Aplicada

Linha de Pesquisa: Dinâmica dos Fluidos

Orientador: Prof. Dr. Álvaro Luiz de Bortoli

Banca examinadora:

Prof. Dr. João Batista da Paz Carvalho  
PPGMap-UFRGS

Prof. Dr. Nilson Romeu Marcilio  
PPGEQ-UFRGS

Profa. Dra. Eliete Biasotto Hauser  
FAMAT-PUCRS

Prof. Dr. Sebastião Cícero Pinheiro Gomes  
DMAT-FURG

Dissertação apresentada e aprovada em  
27 de fevereiro de 2012.

Profa. Dra. Maria Cristina Varriale  
Coordenadora

# Sumário

<b>LISTA DE FIGURAS</b> . . . . .	<b>vi</b>
<b>LISTA DE TABELAS</b> . . . . .	<b>ix</b>
<b>LISTA DE SIGLAS E SÍMBOLOS</b> . . . . .	<b>x</b>
<b>RESUMO</b> . . . . .	<b>xvi</b>
<b>ABSTRACT</b> . . . . .	<b>xvii</b>
<b>1 INTRODUÇÃO</b> . . . . .	<b>1</b>
1.1 Técnicas de Estabilização . . . . .	3
1.2 Objetivo do Trabalho . . . . .	6
<b>2 EQUAÇÕES GOVERNANTES</b> . . . . .	<b>8</b>
2.1 Variáveis Primitivas . . . . .	8
2.1.1 Fração de Massa . . . . .	9
2.1.2 Energia e Entalpia . . . . .	10
2.1.3 Tensor Viscosidade . . . . .	12
2.1.4 Razão de Equivalência . . . . .	13
2.1.5 Fração de Mistura . . . . .	15
2.2 Equações de Conservação . . . . .	17
2.2.1 Conservação da Massa . . . . .	18
2.2.2 Conservação da Quantidade de Movimento . . . . .	19
2.2.3 Conservação de Energia . . . . .	22
2.2.4 Conservação das Espécies . . . . .	23
2.3 Simplificações Usuais em Problemas de Combustão . . . . .	24
2.3.1 Números Adimensionais . . . . .	24
2.3.2 Pressão Constante . . . . .	27

2.3.3	Capacidade Calorífica Igual Para Todas as Espécies . . . . .	28
<b>3</b>	<b>TEORIA DE SEMENOV E TRATAMENTO DO TERMO RE- ATIVO . . . . .</b>	<b>30</b>
<b>4</b>	<b>TÉCNICAS DE ESTABILIZAÇÃO . . . . .</b>	<b>38</b>
4.1	Chamas estabilizadas na camada de mistura . . . . .	40
4.2	Chamas triplas para estabilização . . . . .	42
4.3	Auto-Ignição para estabilização . . . . .	43
4.4	Geometria da Câmara . . . . .	44
4.5	Chamas estabilizadas por rotação . . . . .	46
4.6	Chamas com <i>Pilot</i> . . . . .	48
4.7	Faísca Elétrica . . . . .	53
4.8	Atuadores de Plasma . . . . .	55
4.9	Resumo Geral das Técnicas de Estabilização . . . . .	56
<b>5</b>	<b>IMPLEMENTAÇÃO NUMÉRICA . . . . .</b>	<b>59</b>
5.1	Equação para a Pressão . . . . .	61
5.2	Adimensionalização das Equações Governantes . . . . .	62
5.3	Simulação de Grandes Escalas - LES . . . . .	64
5.4	Discretização das Equações Governantes . . . . .	68
<b>6</b>	<b>RESULTADOS NUMÉRICOS . . . . .</b>	<b>74</b>
6.1	Perfil de Vorticidade . . . . .	75
6.2	Comparação de Chamas com <i>Pilot</i> . . . . .	78
6.3	Comparação de Chamas com Rotação . . . . .	92
<b>7</b>	<b>CONSIDERAÇÕES FINAIS E CONCLUSÕES . . . . .</b>	<b>108</b>
	<b>REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS . . . . .</b>	<b>110</b>

## Lista de Figuras

Figura 1.1	<i>Comportamento do jato de combustível no interior da câmara.</i> . . . . .	7
Figura 1.2	<i>Representação esquemática da câmara de combustão.</i> . . . . .	7
Figura 2.1	<i>À esquerda, perfil das frações de massa do combustível e do oxidante sem queima. À direita, perfil das frações de massa do combustível, do oxidante e dos produtos após a queima.</i> . . . . .	16
Figura 2.2	<i>Volume de controle para as equações de conservação.</i> . . . . .	18
Figura 2.3	<i>Vista frontal do volume de controle</i> . . . . .	18
Figura 3.1	<i>Competição entre a perda de calor e a geração de energia química [21].</i> . . . . .	34
Figura 4.1	<i>Câmara de combustão com coflow e chama ancorada na saída do injetor.</i> . . . . .	41
Figura 4.2	<i>Estabilização de uma chama difusiva com chama tripla.</i> . . . . .	42
Figura 4.3	<i>Estabilização de uma chama turbulenta não pré-misturada pelo mecanismo de auto-ignição.</i> . . . . .	44
Figura 4.4	<i>Estabilização de uma chama turbulenta não pré-misturada por zonas de recirculação.</i> . . . . .	46
Figura 4.5	<i>Estabilização de uma chama turbulenta não pré-misturada prevista por um modelo clássico usando a hipótese de equilíbrio químico.</i> . . . . .	47
Figura 4.6	<i>Fluxo rotacional não reativo em uma câmara de combustão. Esquema das zonas de recirculação correspondentes com acréscimo na intensidade do vórtice.</i> . . . . .	48
Figura 4.7	<i>Esquema de utilização de chamas pilot no bordo do injetor de combustível.</i> . . . . .	49
Figura 4.8	<i>Esquema de eletrodos com isolamento.</i> . . . . .	53
Figura 4.9	<i>Esquema de um atuador de plasma.</i> . . . . .	56
Figura 4.10	<i>Atuadores de plasma no bordo do injetor.</i> . . . . .	56
Figura 5.1	<i>Algoritmo de solução do problema de combustão.</i> . . . . .	73

Figura 6.1	<i>Distribuição da fração de mistura para os instantes de tempo (a) 40s, (b) 41s, (c) 42,5s, conforme Gokarn et al.[15]. . . . .</i>	76
Figura 6.2	<i>Escoamento obtido neste trabalho para <math>t = 40s</math>, <math>t = 42,5s</math> e <math>t = 45s</math>. . . . .</i>	77
Figura 6.3	<i>Representação do queimador utilizado na simulação. . . . .</i>	79
Figura 6.4	<i>Fotografia da chama Sandia-D onde vê-se os pilots [3]. . . . .</i>	79
Figura 6.5	<i>Comparação da fração de mistura em <math>x/d = 15</math>. . . . .</i>	80
Figura 6.6	<i>Comparação da fração de mistura em <math>x/d = 30</math>. . . . .</i>	81
Figura 6.7	<i>Comparação da fração de mistura em <math>x/d = 45</math>. . . . .</i>	82
Figura 6.8	<i>Comparação da fração de mistura em <math>x/d = 60</math>. . . . .</i>	83
Figura 6.9	<i>Comparação da fração de mistura na direção axial. . . . .</i>	84
Figura 6.10	<i>Comparação da fração de massa de <math>H_2O</math> em <math>x/d = 30</math>. . . . .</i>	85
Figura 6.11	<i>Comparação da fração de massa de <math>H_2O</math> em <math>x/d = 45</math>. . . . .</i>	85
Figura 6.12	<i>Comparação da fração de massa de <math>CO_2</math> em <math>x/d = 30</math>. . . . .</i>	86
Figura 6.13	<i>Comparação da fração de massa de <math>CO_2</math> em <math>x/d = 60</math>. . . . .</i>	87
Figura 6.14	<i>Comparação da fração de massa de <math>O_2</math> em <math>x/d = 30</math>. . . . .</i>	88
Figura 6.15	<i>Comparação da fração de massa de <math>O_2</math> na direção axial. . . . .</i>	88
Figura 6.16	<i>Comparação da fração de massa de <math>CH_4</math> em <math>x/d = 15</math>. . . . .</i>	89
Figura 6.17	<i>Comparação da fração de massa de <math>CH_4</math> na direção axial. . . . .</i>	90
Figura 6.18	<i>Comparação da temperatura adimensional em <math>x/d = 15</math>. . . . .</i>	91
Figura 6.19	<i>Comparação da temperatura adimensional na direção axial. . . . .</i>	91
Figura 6.20	<i>Representação esquemática do queimador utilizado na chama Sandia-H. . . . .</i>	94
Figura 6.21	<i>Fotografia da chama Sandia-H onde vê-se a saída do injetor [23]. . . . .</i>	94
Figura 6.22	<i>Comparação da fração de mistura em <math>x/d = 10</math>. . . . .</i>	95
Figura 6.23	<i>Comparação da fração de mistura em <math>x/d = 25</math>. . . . .</i>	96
Figura 6.24	<i>Comparação da fração de mistura em <math>x/d = 50</math>. . . . .</i>	97

Figura 6.25	<i>Comparação da fração de mistura em <math>x/d = 75</math>.</i>	97
Figura 6.26	<i>Comparação da fração de mistura em <math>x/d = 90</math>.</i>	98
Figura 6.27	<i>Comparação da fração de mistura em <math>x/d = 120</math>.</i>	98
Figura 6.28	<i>Comparação da temperatura em <math>x/d = 10</math>.</i>	99
Figura 6.29	<i>Comparação da temperatura em <math>x/d = 50</math>.</i>	100
Figura 6.30	<i>Comparação da temperatura em <math>x/d = 90</math>.</i>	101
Figura 6.31	<i>Comparação da temperatura em <math>x/d = 120</math>.</i>	101
Figura 6.32	<i>Comparação da fração de massa de <math>H_2O</math> em <math>x/d = 10</math>.</i>	102
Figura 6.33	<i>Comparação da fração de massa de <math>H_2O</math> em <math>x/d = 50</math>.</i>	103
Figura 6.34	<i>Comparação da fração de massa de <math>H_2O</math> em <math>x/d = 90</math>.</i>	103
Figura 6.35	<i>Comparação da fração de massa de <math>H_2O</math> em <math>x/d = 120</math>.</i>	104
Figura 6.36	<i>Comparação da fração de massa de <math>CO_2</math> em <math>x/d = 10</math>.</i>	105
Figura 6.37	<i>Comparação da fração de massa de <math>CO_2</math> em <math>x/d = 50</math>.</i>	106
Figura 6.38	<i>Comparação da fração de massa de <math>CO_2</math> em <math>x/d = 90</math>.</i>	106
Figura 6.39	<i>Comparação da fração de massa de <math>CO_2</math> em <math>x/d = 120</math>.</i>	107

## Lista de Tabelas

Tabela 2.1	Diferentes formas de energia e entalpia para as espécies químicas [40]. . . . .	11
Tabela 3.1	Temperatura de auto-ignição a $25^{\circ}C$ e $1atm$ para mistura estequiométrica com o ar como oxidante [41]. . . . .	37
Tabela 4.1	Principais técnicas de estabilização em função da velocidade dos reagentes [40]. . . . .	39
Tabela 6.1	Parâmetros do escoamento considerado pelo autor Gokarn et al [15]. . . . .	75
Tabela 6.2	Parâmetros experimentais para a chama Sandia-D. . . . .	78
Tabela 6.3	Parâmetros experimentais para a chama Sandia-H. . . . .	93

## LISTA DE SIGLAS E SÍMBOLOS

$a_c$	Espessura crítica da chama <i>pilot</i>
$A_0$	Fator de frequência
$c$	Velocidade do som no meio
$c_s$	Constante de Smagorinsky
$c_{pk}$	Calor específico à pressão constante da espécie $k$
$c_{V_k}$	Calor específico a volume constante da espécie $k$
$c_{pk}^m$	Calor específico molar a pressão constante da espécie $k$
$c_{V_k}^m$	Calor específico molar a volume constante da espécie $k$
$C$	Capacitância do condensador
$C_k$	Concentração da espécie $k$
$d_E$	Distância de extinção
$Da$	Número de Damköhler
$Da_{inf}$	Cota inferior para o número de Damköhler
$Da_{sup}$	Cota superior para o número de Damköhler
$D_k$	Coefficiente de difusão da espécie $k$ na mistura combustível
$D_t$	Difusividade turbulenta
$D_{kj}$	Coefficiente de difusão da espécie $k$ na espécie $j$
$D_{th}$	Segundo coeficiente de difusão de calor
$E_a$	Energia de ativação

$E_{min}$	Energia mínima necessária para a ignição
$\bar{f}$	Média de Reynolds da função $f$
$\tilde{f}$	Média de Favre da função $f$
$h$	Coefficiente de transferência de calor convectivo
$h_k$	Entalpia da espécie $k$
$h_{sk}$	Entalpia sensível da espécie $k$
$k$	Razão entre os calores específicos ( $c_p/c_V$ )
$L$	Comprimento característico
$Le$	Número de Lewis
$Le_k$	Número de Lewis da espécie $k$
$m$	Massa
$m_k$	Massa da espécie $k$ contida em um volume $V$
$\dot{m}_k$	Fluxo de massa da espécie $k$
$\dot{m}^i$	Fluxo de massa entrando pelo injetor $i$
$\dot{m}_k^i$	Fluxo de massa da espécie $k$ entrando pelo injetor $i$
$\dot{m}_{F,r}'''$	Taxa global da reação
$Ma$	Número de Mach
$p$	Pressão
$p_k$	Pressão parcial da espécie $k$
$Pr$	Número de Prandtl

$Pr_t$	Número de Prandtl turbulento
$\dot{Q}$	Termo de geração de calor
$\dot{Q}_L$	Termo de perda de calor através da superfície do volume de controle
$\dot{Q}_R$	Termo de geração de energia devido à reação química
$r/d$	Razão da distância radial pelo diâmetro do injetor
$R$	Constante universal dos gases
$Re$	Número de Reynolds
$Re_c$	Número de Reynolds crítico
$s$	Razão estequiométrica mássica
$s_L$	Espessura da chama laminar
$s_L^0$	Velocidade da chama pré-misturada laminar
$S$	Área superficial do volume de controle
$Sc_t$	Número de Schimidt turbulento
$T$	Temperatura em kelvin
$T_a$	Temperatura de ativação
$T_c$	Temperatura crítica ou temperatura de auto-ignição
$T_f$	Temperatura adiabática da chama
$u$	Vetor velocidade
$u_i$	Componente do vetor velocidade na direção $i$
$V$	Volume

$V_1$	Voltagem antes da descarga do condensador
$V_2$	Voltagem após a descarga do condensador
$\dot{w}_k$	Taxa da reação $k$
$\dot{w}_t$	Taxa de geração de calor
$W$	Peso molecular médio da mistura
$W_k$	Peso molecular da espécie $k$
$\dot{W}_A'''$	Taxa de reação
$x_i$	Vetor posição na direção $i$
$X/d$	Distância axial pelo diâmetro do injetor
$Y_k$	Fração de massa da espécie $k$
$Y_j^i$	Fração de massa da espécie $j$ entrando pelo injetor $i$
$Y_{k,b}$	Fração de massa da espécie $k$ que já foi queimada
$Y_{k,i}$	Fração de massa inicial da espécie $k$
$Y_{k,u}$	Fração de massa da espécie $k$ antes da queima
$Z$	Fração de mistura
$Z_{st}$	Fração de mistura estequiométrica
$Ze$	Número de Zel'dovich

### Símbolos Gregos

$\delta$	Tamanho do filtro
$\delta_i$	Distância de ignição

$\delta_{ij}$	Símbolo de Kronecker
$\Delta h_c$	Calor de combustão
$\Delta h_{f,k}^0$	Entalpia de formação mássica da espécie $k$ à temperatura $T_0$
$\Delta h_{f,k}^{0m}$	Entalpia de formação molar da espécie $k$ à temperatura $T_0$
$\Delta x_k$	Espaçamento ou comprimento infinitesimal na direção $k$
$\Delta H$	Calor de reação
$\epsilon_k$	Energia da espécie $k$
$\epsilon_{sk}$	Energia sensível da espécie $k$
$\theta$	Temperatura adimensional
$\kappa$	Constante de proporcionalidade
$\lambda$	Coefficiente de difusão de calor
$\mu$	Viscosidade dinâmica
$\nu$	Viscosidade cinemática ( $\nu = \mu/\rho$ )
$\nu_{eff}$	Viscosidade efetiva
$\nu_F$	Coefficiente estequiométrico do combustível
$\nu_O$	Coefficiente estequiométrico do oxidante
$\nu_t$	Viscosidade turbulenta
$\rho$	Massa específica
$\rho_k$	Massa específica da espécie $k$
$\sigma_{ij}$	Tensor das tensões

$\sigma_{ij}^{sgs}$	Tensor das tensões de Reynolds na escala subgrid
$\tau$	Tempo adimensional ou tensão total
$\tau_c$	Escala de tempo da reação química
$\tau_t$	Escala de tempo do turbulência
$\tau_{ij}$	Tensor viscoso
$\tau^L$	Tensor de tensões laminar
$\tau^T$	Tensor de tensões turbulento
$\phi$	Razão de equivalência
$\phi_g$	Razão de equivalência global
$\Phi(r_i)$	Limitador de fluxo
$\Omega$	Domínio do problema

### **Lista de Siglas**

<i>NASA</i>	National Aeronautics and Space Administration
<i>LES</i>	Large Eddy Simulation
<i>TVD</i>	Total Variation Diminishing

## RESUMO

O objetivo principal deste trabalho é desenvolver uma metodologia capaz de descrever o fenômeno de combustão em escoamentos turbulentos. Para atingir este objetivo, é feita uma revisão bibliográfica sobre as principais técnicas de estabilização de chamas difusivas uma vez que a turbulência, normalmente, torna chamas deste tipo instáveis. Seguindo o critério de maior aplicabilidade prática foram escolhidas, dentre as técnicas de estabilização na camada de mistura, estabilização através do uso de chamas triplas, através da auto-ignição, da modificação da geometria da câmara, da rotação dos reagentes, do uso de chamas *Pilot*, do uso de faíscas elétricas e do uso de atuadores de plasma, duas para serem simuladas numericamente. As técnicas escolhidas para simulação utilizam rotação dos reagentes e chamas *Pilot* para estabilização de uma chama de metano/ar no interior de uma câmara de combustão retangular. Estas duas técnicas são consideradas as mais representativas dentre as demais técnicas apresentadas. A introdução ao assunto é feita através da dedução das equações governantes para a combustão. Utiliza-se a teoria de Semenov para determinar os principais parâmetros de ignição de uma chama e então são apresentadas as oito técnicas de estabilização, consideradas mais relevantes, e suas principais características com relação ao mecanismo de estabilização que cada uma utiliza. Descreve-se a forma de discretização e de implementação numérica das equações governantes do problema. Devido ao caráter turbulento do escoamento, faz-se uso da técnica de simulação de grandes escalas (**LES**) através do método de discretização em diferenças finitas, considerando um domínio tridimensional. Os resultados obtidos apresentam boa concordância com dados experimentais presentes na literatura.

# ABSTRACT

The principal objective of this work is to develop a method capable to describe the phenomenon of combustion in turbulent flows. To achieve this goal, a review on the main diffusion flame stabilization techniques is made because the turbulence normally turns such flames unstable. According to the criterium of practical applications it was chosen, among eight techniques, only two to be simulated numerically. The techniques chosen were the swirl and the pilot flames to stabilize the flame of methane/air in a rectangular combustion chamber. These two techniques are considered the most representative among the other presented. The introduction to the subject is made through the deduction of the governing equations for combustion. We use the theory of Semenov to determine the main ignition parameters of a flame and introduce eight of the most relevant stabilization techniques and their main characteristics, with respect to the mechanism of stabilization that each one uses. We describe the discretization process and the numerical implementation of the governing equations of the problem. Due to the turbulent nature of the flow, we make use of the large eddy simulation technique (**LES**) with the discretization based on the finite differences method over a three-dimensional domain. The results show good agreement with experimental data found in the literature.

# 1 INTRODUÇÃO

Não é de hoje que “pensar no futuro” significa “pensar em energia”. Desde meados do século XVIII, com o início da revolução industrial, a humanidade busca formas cada vez eficientes de obtê-la. Desde que John Dalton publicou a primeira teoria atômica moderna em 1803, ou seja, no século XIX, diversas formas de conversão de energia tem sido desenvolvidas, sobretudo, buscando obter-se energia elétrica. Neste mesmo século, mais precisamente em 1873, o engenheiro eletricitista Willoughby Smith construiu, “acidentalmente”, a primeira célula fotovoltaica, que ainda hoje é uma grande promessa de fonte de energia limpa.

Entretanto, a utilização da energia eólica é ainda mais antiga. Existem registros históricos datando de 200 a.c. que descrevem a utilização de moinhos, na Pérsia, para bombeamento de água e moagem de grãos. Porém, apenas em 1888 Charles F. Brush construiu o primeiro aerogerador na cidade de Cleveland, Ohio - EUA, que fornecia 12kW em corrente contínua [46]. Os aerogeradores modernos são apenas um melhoramento do “moinho de vento” de Charles Brush.

Alguns anos se passaram até que em 1911 Ernest Rutherford divulgou um trabalho onde defendia que “... os átomos têm sua carga positiva concentrada em um pequeno núcleo”. Este trabalho concede a Rutherford, posteriormente, o título de “Descobridor do núcleo atômico”. Neste período, já se conheciam alguns fenômenos radioativos, porém, após esta publicação, diversos cientistas começaram a tentar compreender melhor o que acontecia no interior do átomo. A fissão nuclear foi então descoberta em 1938 por Otto Hahn e Fritz Strassman, e explicada por Lise Meitner e Otto Frisch. Em 2 de dezembro de 1942 iniciou-se a “Era Nuclear”, com a entrada em funcionamento do primeiro reator nuclear na Universidade de Chicago - EUA [2]. Assim, a humanidade desenvolveu mais uma forma de obtenção de energia,

que hoje em dia não parece mais tão interessante devido às proporções de possíveis acidentes.

Diversas outras formas de conversão de energia se desenvolveram ao longo dos últimos três séculos, a partir da revolução industrial. Entretanto, uma delas sustenta, com folga, a liderança entre as mais utilizadas a mais de 10 mil anos, desde que o *homo sapiens* adquiriu capacidade intelectual suficiente para dominá-la. O fogo foi, durante muito tempo, a única fonte de luz e calor e, conseqüentemente, de energia disponível para a humanidade.

Atualmente, cerca de 80% de toda a energia produzida no mundo é proveniente da queima de algum tipo de combustível (Carvão, Óleo, Gás Natural, etc.)[1]. Embora as pressões climáticas exijam uma mudança drástica neste comportamento, é evidente que este perfil se manterá durante as próximas décadas devido a nossa ineficiência em promover a utilização de outras fontes de energia que sejam menos agressivas ao meio ambiente.

De posse dessa consciência, cabe a ciência buscar formas cada vez mais eficientes de promover a combustão destes materiais de modo a se converter o máximo possível de energia, com o mínimo possível de geração de poluentes. Este conhecimento torna-se cada vez mais vital tanto para a manutenção das reservas atuais de combustíveis não renováveis, como o petróleo, quanto para uma utilização viável de combustíveis renováveis como o etanol, biodiesel, biogás, etc.

Em geral, o estudo dos processos de combustão é bastante complexo. Deste modo, alguns autores dividem o estudo de chamas entre **Chamas Pré-misturas** e **Chamas não Pré-misturadas**, esta última categoria também chamada de **Chama Difusiva** [50]. Esta classificação está relacionada com a maneira como os reagentes (combustível e comburente) são inseridos na região de combustão. Em uma chama pré-misturada os elementos misturam-se antes que ocorra a ignição, tal pré-mistura só é possível a temperaturas suficientemente baixas de modo que os

mecanismos de ramificação das cadeias sejam incapazes de competir com os mecanismos de quebra das cadeias [37]. Por outro lado, em uma chama não pré-misturada, os reagentes estão inicialmente separados e entram em contato por processos de difusão molecular e de movimentos convectivos no instante da combustão [30].

Este trabalho concentra-se no tratamento de chamas difusivas, e daqui para frente usa-se esta expressão como um sinônimo para chamas não pré-misturadas, devido à ampla variedade de processos que apresentam esta configuração. Alguns exemplos de chamas difusivas são: um recipiente de óleo queimando ao ar livre, uma vela acesa, um incêndio florestal, uma gota de combustível queimando em um motor de foguete, etc. Estes processos podem envolver situações de fluxos instáveis, fluxos a altas velocidades e com movimentos altamente turbulentos [55].

Em geral, a presença da turbulência em uma chama difusiva provoca uma grande dissipação de energia. Isto torna o processo de combustão instável e pode fazer com que a chama se apague. Esta instabilidade é indesejável, por diversos motivos, e alguns mecanismos e técnicas de estabilização têm sido desenvolvidos ao longo dos anos com o intuito de garantir que chamas turbulentas possam permanecer acesas, mesmo quando estas estão sujeitas às mais diversas condições de operação.

## 1.1 Técnicas de Estabilização

Um dos primeiros modelos utilizados para descrever o comportamento de chamas difusivas foi proposto por Burke e Schumann em 1928 [7]. Este modelo utiliza a hipótese de que o tempo de mistura é grande comparado com o tempo de reação e, conseqüentemente, a cinética é muito rápida e a espessura da chama é extremamente fina.

Em 1966, Kirkbey e Schmitz iniciam os estudos de estabilidade das chamas difusivas através do tratamento numérico das equações governantes de transferência de calor e das reações químicas, considerando as taxas de reação como sendo finitas [26]. Kirkbey e Schmitz analisaram soluções para o estado estacionário, investigaram a estabilidade da chama com respeito a pequenos distúrbios e obtiveram, ainda, soluções completas para o estado transiente.

Com objetivo de uniformizar os critérios de desenvolvimento de veículos espaciais, a NASA (*National Aeronautics and Space Administration*) divulgou em novembro de 1974 um relatório sobre os principais mecanismos, existentes até aquele momento, de controle das instabilidades da combustão dos motores de foguetes à propelentes líquidos. Neste documento, são descritos procedimentos e métodos capazes de modificar os processos de combustão de modo a serem desenvolvidas câmaras de combustão mais eficientes do ponto de vista da estabilidade da queima [10].

Em 1980, Mitchell et al. [33] divulgaram um estudo experimental e numérico sobre os efeitos de diversos parâmetros sobre a estabilidade de chamas difusivas confinadas. Mitchell et al. [33] analisaram a taxa de escoamento dos reagentes, a razão de equivalência da mistura, o pré-aquecimento do ar e do combustível e o tamanho do injetor, e como estes afetam os campos térmico e aerodinâmico da chama. Seu modelo conseguiu caracterizar com boa habilidade as estruturas macroscópicas da chama levando-se em consideração a capacidade computacional da época.

Entre o final da década de 90 e o início dos anos 2000 os esforços se concentraram no desenvolvimento experimental de novas técnicas de estabilização. Alguns autores citam a utilização de meios porosos para facilitar a estabilização da chama. Em um dos estudos numéricos encontrados, Vance et al. [51] usam um modelo unidimensional para descrever o comportamento de uma chama em geometria de contra-corrente, onde tanto o combustível quanto o oxidante estão separados da

zona de reação por paredes porosas. Este estudo, apesar de interessante, possui todas as limitações relativas à um modelo unidimensional.

Um dos métodos mais comuns de estabilização em meio poroso é apresentado por Trimis e Wawrzinek [49]. Eles analisaram experimentalmente a estabilização de uma chama ocorrendo no interior de um meio poroso inerte aquecido. Trimis e Wawrzinek demonstraram a habilidade deste sistema em estabilizar chamas de gases altamente difusivos. Embora a utilização de queimadores que utilizem meios porosos não seja nova, ainda existem muitos estudos que buscam avaliar a interferência do meio poroso sobre a reação de combustão analisando parâmetros como a porosidade do meio, atividade catalítica, entre outros.

O uso de gases diluentes e mesmo inibidores de chama, também tem sido estudado nos últimos anos. O gás diluente que é mais utilizado para esta finalidade é o nitrogênio [36], devido ao baixo custo. A utilização de inibidores de chama, como o bromotrifluorometano [48], serve para manter a chama em uma região específica do queimador e impedir que ela perca muito calor para as paredes.

Técnicas mais modernas utilizam dispositivos elétricos e eletromagnéticos como aqueles descritos por Wisman et al [56], ou Belhi et al [4], ou Kurimoto et al [29]. A utilização de plasma proveniente de diversas fontes é utilizada por Kim et al. [24]. Os autores analisaram diversos fatores como intensidade, frequência e localização das descargas de plasma, provenientes de três tipos de fontes distintas, e sua influência sobre o comportamento da chama.

A seguir, serão descritos os problemas abordados neste trabalho, as hipóteses utilizadas e os objetivos que devem ser alcançados. No próximo capítulo, são mostradas as equações governantes do problema, algumas deduções e as simplificações necessárias para se obter uma solução. No capítulo 3, é apresentada a teoria de Semenov que é utilizada para fazer as estimativas teóricas de alguns parâmetros que aparecem nas técnicas de estabilização. No capítulo 4, estão listadas as princi-

país técnicas de estabilização encontradas na literatura e suas características mais relevantes.

No capítulo 5, é apresentada a normalização e discretização das equações governantes e os procedimentos de implementação numérica. No capítulo 6, são apresentados os resultados obtidos por algumas técnicas de estabilização. São implementadas as técnicas consideradas mais relevantes do ponto de vista da utilização prática. No capítulo 7, aparecem as conclusões e considerações finais sobre o trabalho. Por fim, são listadas as referências bibliográficas que propiciaram o embasamento teórico, os dados experimentais e numéricos para a realização deste trabalho.

## 1.2 Objetivo do Trabalho

O objetivo deste trabalho consiste em analisar, via métodos numéricos, algumas técnicas de estabilização de chamas difusivas. Devido ao grande número de técnicas existentes, foram escolhidas aquelas consideradas mais representativas utilizando-se os critérios de: maior número de trabalhos publicados sobre a técnica, aplicabilidade prática em dispositivos reais e relevância teórica do mecanismo de estabilização envolvido. Deste modo, são simuladas numericamente apenas as técnicas que utilizam rotação dos reagentes e chamas *Pilot*.

Para atingir este objetivo, foi definido um domínio computacional tridimensional no qual foi simulada a queima de um jato de combustível na presença de ar atmosférico. A representação esquemática da câmara de combustão e o comportamento do jato de combustível no interior desta câmara são mostradas nas figuras 1.1 e 1.2. As equações governantes do problema foram discretizadas através do método de diferenças finitas e implementadas em linguagem Fortran 90, para se obter uma solução aproximada destas equações.

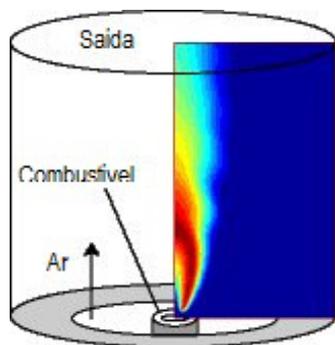


Figura 1.1: *Comportamento do jato de combustível no interior da câmara.*

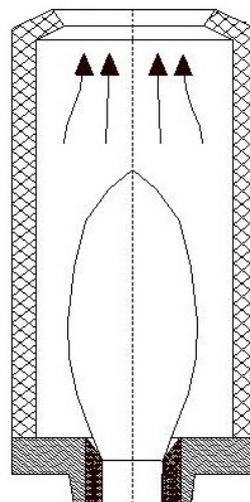


Figura 1.2: *Representação esquemática da câmara de combustão.*

Devido à não linearidade das equações utilizadas para descrever os campos de velocidade e a característica de rigidez do sistema de reações químicas, que descrevem a combustão, foi necessária a utilização de técnicas numéricas como subrelaxação.

Para cada método de estabilização, foi analisada a sua influência sobre os campos de velocidade, pressão e térmico. Os resultados são apresentados na forma de gráficos e tabelas, conforme a conveniência e, sempre que possível, comparados com dados da literatura existentes nesta área.

## 2 EQUAÇÕES GOVERNANTES

O estudo dos fenômenos de combustão, sobretudo aqueles que envolvem chamas difusivas, é uma aplicação direta dos conhecimentos de mecânica dos fluidos. Este capítulo é dedicado à apresentação dos fundamentos da mecânica dos fluidos partindo de leis físicas fundamentais a partir das quais são deduzidas as equações governantes da combustão de uma chama difusiva.

Primeiramente, é feita uma breve introdução onde são definidas algumas variáveis de interesse e alguns conceitos sobre reações químicas, estequiometria, fração de mistura, etc. Por fim, são deduzidas as equações de conservação para o sistema.

### 2.1 Variáveis Primitivas

Durante o texto, são destacadas algumas diferenças existentes entre as equações da combustão e as equações equivalentes para sistemas não reativos. As deduções aqui apresentadas seguem as que aparecem nos livros texto clássicos sobre combustão como o Kanury [21], o Willians [55], o Turns [50], o Poinot [40], entre outros. Antes disso, nesta seção são definidas as variáveis primitivas do problema.

As variáveis utilizadas para descrever um escoamento compressível relativo são:

- a massa específica  $\rho = m/V$ ;
- as três componentes da velocidade;
- uma variável para energia que pode ser a pressão, a entalpia ou a temperatura;

- a fração de massa das espécies químicas.

A seguir cada uma destas variáveis é descrita no contexto de escoamentos reativos turbulentos.

### 2.1.1 Fração de Massa

O fenômeno da combustão envolve uma grande quantidade de espécies químicas que reagem e, conseqüentemente, interagem por meio de um grande número de reações químicas [40]. Ao aplicar as equações de Navier-Stokes à estas espécies, alguns termos precisam ser adicionados para se obter uma descrição mais precisa do fenômeno.

Uma das variáveis utilizadas nesta nova formulação é a fração de massa dos elementos que é definida como:

$$Y_k = \frac{m_k}{m}, \quad (2.1)$$

onde  $k = 1, \dots, N$ , e  $N$  representa o número total de espécies químicas,  $m_k$  é a massa da espécie  $k$  contida em um volume  $V$  e  $m$  é a massa total contida neste mesmo volume de controle.

Aqui, percebe-se uma diferença considerável na modelagem de um problema não reativo para um problema reativo. Considerando  $N$  espécies, o número de equações que devem ser resolvidas em um sistema reativo é igual a  $N + 5$ , em contraste com os sistemas não reativos onde devem ser resolvidas apenas 5 equações (3 equações para as componentes da velocidade, 1 equação para a variável de energia e 1 equação para a massa específica). O número de espécies químicas relevantes é normalmente da ordem de  $N = 50$ .

### 2.1.2 Energia e Entalpia

Em um sistema com  $N$  espécies químicas, a pressão total pode ser definida como a soma das pressões parciais de cada um dos elementos, isto é,

$$p = \sum_{k=1}^N p_k \quad \text{onde} \quad p_k = \rho_k \frac{RT}{W_k} \quad (2.2)$$

sendo  $T$  a temperatura em Kelvin,  $R$  é a constante universal dos gases ( $R = 8,314J/molK$ ),  $\rho_k = \rho Y_k$  é a massa específica da espécie  $k$  e  $W_k$  é o peso molecular da espécie  $k$ . Analogamente, a massa específica da mistura é:

$$\rho = \sum_{k=1}^N \frac{\rho_k}{N}. \quad (2.3)$$

Pressão, temperatura e massa específica estão relacionadas pela lei dos gases ideais,

$$p = \rho \frac{RT}{W}, \quad (2.4)$$

onde  $W$  é o peso molecular médio da mistura, ou seja,

$$\frac{1}{W} = \sum_{k=1}^N \frac{Y_k}{W_k}. \quad (2.5)$$

Convém ressaltar que, apesar da equação (2.4) ser válida para gases **ideais**, observa-se experimentalmente que esta equação descreve com boa aproximação o comportamento da maioria dos gases **reais** utilizados ou presentes em um processo de combustão.

Para um escoamento reativo, podem ser utilizadas diversas variáveis para representar a energia ou a entalpia do sistema. Neste trabalho, a variável que será utilizada para este fim é a temperatura absoluta, ou seja, a temperatura em Kelvin. Entretanto, a título ilustrativo, serão apresentadas outras variáveis de energia que também poderiam ter sido utilizadas, seguindo a mesma linha de raciocínio apresentada no livro do Poinot [40].

Desta forma, definem-se as variáveis *energia* ( $\epsilon_k$ ), *entalpia* ( $h_k$ ), *energia sensível* ( $\epsilon_{sk}$ ) e *entalpia sensível* ( $h_{sk}$ ), para cada uma das espécies, conforme a tabela (2.1) retirada da referência [40]. Energia e entalpia estão relacionadas por  $\epsilon_{sk} = h_{sk} - \frac{p_k}{\rho_k}$  e  $\epsilon_k = h_k - \frac{p_k}{\rho_k}$ .

A entalpia de formação mássica da espécie  $k$  à temperatura  $T_0$  é escrita como  $\Delta h_{f,k}^0$ . Toma-se um valor inicial de referência que geralmente é definido para  $T = 298,15K$ . Assim, utilizando uma temperatura de referência  $T_0$ , a entalpia, ou a energia, podem ser determinadas em função da primeira variável. Portanto, para  $T \neq T_0$  a entalpia  $h_k$  é dada por:

$$h_k = \underbrace{\int_{T_0}^T c_{pk} dT}_{\text{sensível}} + \underbrace{\Delta h_{f,k}^0}_{\text{química}} \quad (2.6)$$

e para todas estas formas de energia e entalpia os valores são quantidades mássicas, ou seja, a entalpia de formação  $\Delta h_{f,k}^0$  representa a entalpia necessária para formar 1 kg da espécie  $k$  à temperatura de referência  $T_0 = 298,15K$ .

Tabela 2.1: Diferentes formas de energia e entalpia para as espécies químicas [40].

Forma	Energia	Entalpia
Sensível,	$\epsilon_{sk} = \int_{T_0}^T c_{V_k} dT - \frac{RT_0}{W_k}$	$h_{sk} = \int_{T_0}^T c_{p_k} dT$
Sensível + química	$\epsilon_k = \epsilon_{sk} + \Delta h_{f,k}^0$	$h_k = h_{sk} + \Delta h_{f,k}^0$

Obtém-se os valores molares a partir das variáveis mássicas através da relação

$$\Delta h_{f,k}^0 = \frac{\Delta h_{f,k}^{0,m}}{W_k}. \quad (2.7)$$

A capacidade calorífica a pressão constante da espécie  $k$  ( $c_{pk}$ ) também é uma quantidade mássica e é relacionada com a variável molar ( $c_{pk}^m$ ) por  $c_{pk} = c_{pk}^m / W_k$ . Os valores de  $c_{pk}^m$  variam com a temperatura e são normalmente tabelados, ou calculados através de polinômios específicos para este fim.

A capacidade calorífica mássica a volume constante  $c_{V_k}$  pode ser calculada em função de  $c_{p_k}$  através da equação

$$c_{p_k} - c_{V_k} = \frac{R}{W_k}. \quad (2.8)$$

A capacidade calorífica a pressão constante da mistura é, então,

$$c_p = \sum_{k=1}^N c_{p_k} Y_k = \sum_{k=1}^N c_{p_k}^m \frac{Y_k}{W_k}. \quad (2.9)$$

Como mostra a equação (2.9),  $c_p$  é função da composição. Em chamadas difusivas, a composição da mistura ( $Y_k$ ) varia bastante de uma região para outra do escoamento; conseqüentemente,  $c_p$  pode variar significativamente de um ponto para outro.

Analogamente, utilizando a relação (2.8), calcula-se a capacidade calorífica, a volume constante, da mistura através da equação

$$c_V = \sum_{k=1}^N c_{V_k} Y_k = \sum_{k=1}^N c_{V_k}^m \frac{Y_k}{W_k}. \quad (2.10)$$

### 2.1.3 Tensor Viscosidade

Para facilitar a notação, as componentes da velocidade nas direções  $x$ ,  $y$  e  $z$  serão denotadas por  $u_i$  para  $i = 1, 2$  e  $3$ , respectivamente. Usando esta notação, o tensor viscoso pode ser definido como:

$$\tau_{ij} = -\frac{2}{3}\mu \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} + \mu \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right), \quad (2.11)$$

onde  $p$  é a pressão,  $\mu$  é a viscosidade dinâmica,  $\delta_{ij}$  é o chamado símbolo de Kronecker ( $\delta_{ij} = 1$  se  $i = j$  e  $0$  caso contrário).

Normalmente, os tensores de pressão e viscosidade são combinados em um tensor  $\sigma_{ij}$  pela relação:

$$\sigma_{ij} = \tau_{ij} - p\delta_{ij} = -p\delta_{ij} - \frac{2}{3}\mu \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} + \mu \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right). \quad (2.12)$$

#### 2.1.4 Razão de Equivalência

Um número consideravelmente grande de espécies químicas está presente em uma reação de combustão; no entanto, certas espécies são mais importantes do que outras para caracterizar este regime [40]. As frações mássicas de combustível e oxidante são, logicamente, as quantidades mais significativas e suas razões são normalmente utilizadas para caracterizar a chama. Nesta seção será definida a variável chamada de razão de equivalência, que depende da configuração do queimador, isto é, se a chama é pré-misturada ou difusiva. Na próxima seção será definida outra variável, a fração de mistura, que é a variável que realmente é utilizada neste trabalho.

Em um queimador que opere com chamas pré-misturadas, o combustível e o oxidante são misturados antes de ingressar na câmara de combustão. Se  $\nu_F$  e  $\nu_O$  são os coeficientes estequiométricos do combustível e do oxidante, respectivamente, e considerando uma reação global dada por



a relação entre a fração mássica de combustível e oxidante correspondente à condição estequiométrica é

$$\left( \frac{Y_O}{Y_F} \right)_{st} = \frac{\nu_O W_O}{\nu_F W_F} = s. \quad (2.14)$$

O termo  $s$  é chamado de razão estequiométrica mássica. Desta forma, a razão de equivalência de certa mistura é:

$$\phi = s \frac{Y_F}{Y_O} = \left[ \frac{(Y_F/Y_O)}{(Y_F/Y_O)_{st}} \right]. \quad (2.15)$$

A equação (2.15), também pode ser escrita como:

$$\phi = s \frac{\dot{m}_F}{\dot{m}_O}, \quad (2.16)$$

onde  $\dot{m}_F$  e  $\dot{m}_O$  são os fluxos de massa de combustível e oxidante, respectivamente.

Em função da razão de equivalência, são definidos dois tipos de regimes de queima. A queima é dita *rica em combustível* se  $\phi > 1$ , ou seja, há combustível em excesso. Por outro lado, a queima é dita pobre em combustível quando  $\phi < 1$ , isto é, há excesso de oxidante.

Na prática, a maioria dos queimadores trabalha com uma condição de queima pobre em combustível, uma vez que é economicamente interessante que hajam garantias de que todo o combustível será realmente queimado.

Em chamas difusivas, o combustível e o oxidante são inseridos na câmara de combustão através de injetores distintos de modo que os seus fluxos e frações de massa possam ser controlados separadamente. A mistura irá ocorrer, então, apenas no interior da câmara e não antes.

Considerando-se uma câmara de combustão com apenas dois injetores, sendo um deles para a corrente de combustível com fração mássica  $Y_F^1$  e o outro para a corrente de oxidante com fração mássica  $Y_O^2$ , a razão de equivalência pode ser definida por:

$$\phi = s \frac{Y_F^1}{Y_O^2}. \quad (2.17)$$

Esta razão caracteriza a estrutura local de uma chama formada quando duas correntes, de combustível e oxidante, interagem. Entretanto, isto não representa o comportamento global no combustor, para o qual, uma razão de equivalência global pode ser introduzida:

$$\phi_g = s \frac{\dot{m}_F^1}{\dot{m}_O^2}, \quad (2.18)$$

onde  $\dot{m}_F^1$  e  $\dot{m}_O^2$  são os fluxos de combustível no primeiro injetor e de oxidante no segundo injetor, respectivamente. As variáveis  $\phi_g$  e  $\phi$  são relacionadas por:

$$\phi_g = \phi \frac{\dot{m}^1}{\dot{m}^2}, \quad (2.19)$$

onde  $\dot{m}^1$  e  $\dot{m}^2$  são os fluxos totais entrando pelos injetores 1 e 2, respectivamente. Note que, normalmente o oxidante utilizado é o ar atmosférico, que possui aproxi-

madamente 23% de oxigênio. Os outros 77% são gases inertes como o nitrogênio. Neste caso poderíamos ter  $\dot{m}^2 = 1$  e  $\dot{m}_O^2 = 0,23$ .

Para chamas pré-misturadas, o combustível e o oxidante são transportados pela mesma corrente, então  $\dot{m}^1 = \dot{m}^2$  e, conseqüentemente,  $\phi_g = \phi$ . Para chamas difusivas estes valores podem ser bem diferentes.

### 2.1.5 Fração de Mistura

Utilizando a mesma notação da seção anterior, onde  $\dot{m}^1$  é o fluxo de massa de combustível e  $\dot{m}^2$  é o fluxo de massa de oxidante, a fração de mistura pode ser definida como

$$Z = \frac{\dot{m}^1}{\dot{m}^1 + \dot{m}^2}. \quad (2.20)$$

A fração de massa de combustível não queimado ( $Y_{F,u}$ ) deve ser uma fração da quantidade original de combustível. Uma vez que a fração de mistura relaciona a massa de combustível com a massa total no interior de um volume de controle, pode-se escrever

$$Y_{F,u} = Y_{F,i}Z, \quad (2.21)$$

onde  $Y_{F,i}$  é a fração de massa inicial do combustível. Analogamente, para o oxidante tem-se que  $(1 - Z)$  representa a fração de massa de oxidante não queimada, isto é

$$Y_{O,u} = Y_{O,i}(1 - Z). \quad (2.22)$$

Integrando-se a equação (2.14) do estado inicial, não queimado, até um instante qualquer, tem-se:

$$\int_{O,u}^O \frac{dY_O}{\nu_O W_O} = \int_{F,u}^F \frac{dY_F}{\nu_F W_F}, \quad (2.23)$$

o que resulta em

$$sY_F - Y_O = sY_{F,u} - Y_{O,u}. \quad (2.24)$$

Combinando as equações (2.24), (2.22) e (2.21), obtém-se a fração de mistura

$$Z = \frac{sY_F - Y_O + Y_{O,i}}{sY_{F,i} + Y_{O,i}}. \quad (2.25)$$

Supondo que na mistura estequiométrica tem-se  $Y_{O,u} = 0$  e  $Y_{F,u} = 0$ , pela relação (2.24) pode-se escrever  $Y_O = sY_F$ . Assim, a fração de mistura estequiométrica é dada por

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

Analogamente ao que ocorre na razão de equivalência, se  $Z < Z_{st}$  tem-se pouco combustível e a mistura é chamada de pobre. Nesta condição, a combustão termina com todo o combustível consumido ( $Y_{F,b} = 0$ ) e a fração de massa restante de oxigênio é dada por

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

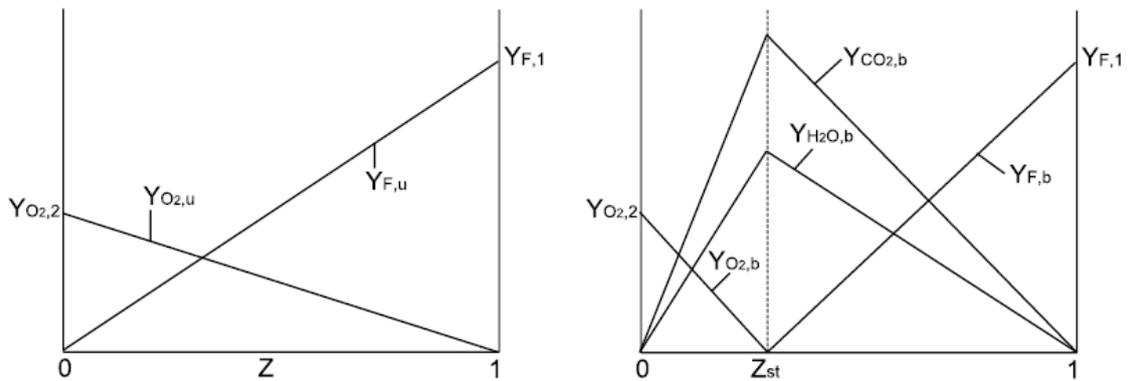


Figura 2.1: À esquerda, perfil das frações de massa do combustível e do oxidante sem queima. À direita, perfil das frações de massa do combustível, do oxidante e dos produtos após a queima.

Do mesmo modo, se  $Z > Z_{st}$  tem-se uma mistura rica em combustível e o oxigênio é totalmente consumido ( $Y_{O,b} = 0$ ), o que resulta em

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

Os perfis da fração de massa do combustível e do oxidante em função da fração de mistura são mostrados na figura 2.1 para situações onde há queima e onde a queima não ocorre.

Na situação onde não ocorre a reação química, a fração de massa do combustível, por exemplo, decai linearmente da região onde  $Z = 1$ , que é a região de injeção do combustível, até aproximar-se de zero próximo à região de injeção do oxidante. No caso em que há queima, tanto o combustível quanto o oxidante possuem frações de massa virtualmente nulas em uma região intermediária marcada pela linha vertical  $Z_{st}$ . Isto significa que, ao chegar à condição de mistura estequiométrica, todo o combustível é consumido ( $Y_{F,b} = 0$ ) e todo o oxidante também é consumido ( $Y_{O,b} = 0$ ).

## 2.2 Equações de Conservação

Nesta seção, serão deduzidas as equações de conservação de massa, energia, quantidade de movimento e das espécies químicas. Serão utilizados os princípios físicos de conservação de massa, energia, quantidade de movimento e das espécies químicas, além da lei de Newton para a viscosidade, a lei de Fourier para transferência de calor e a lei de Fick para a difusão das espécies. A dedução destas equações segue aquelas apresentadas na maioria dos livros texto básicos sobre dinâmica dos fluidos como Kundu [27], ou o Schlichting [44], ou outros mais modernos.

### 2.2.1 Conservação da Massa

Considere um volume de controle de lados  $\Delta x, \Delta y, \Delta z$ , localizado na origem conforme a figura 2.2. As componentes da velocidade nas direções  $x, y$  e  $z$  são,

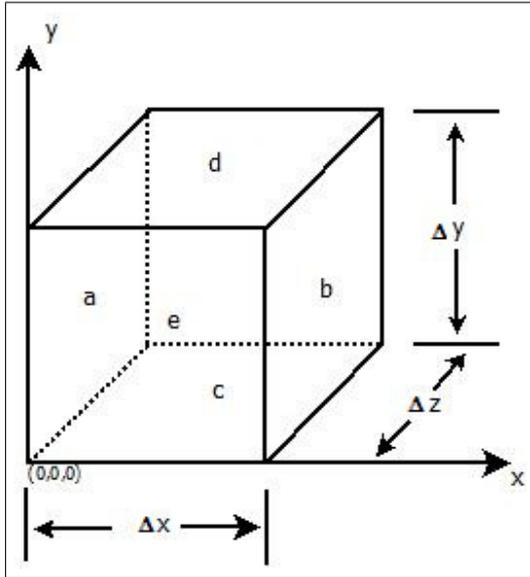


Figura 2.2: *Volume de controle para as equações de conservação.*

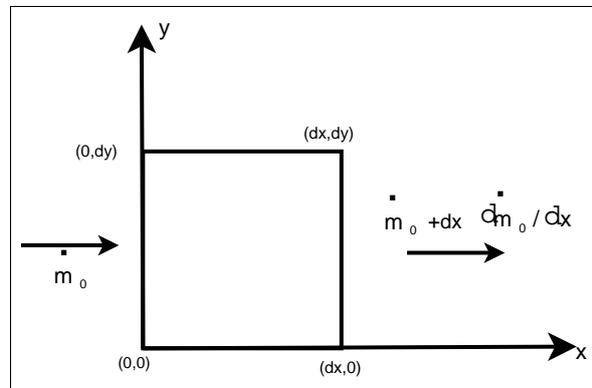


Figura 2.3: *Vista frontal do volume de controle*

respectivamente,  $u, v$  e  $w$ . Suponha que o fluxo ocorra exclusivamente na direção  $x$ , tal que as componentes da velocidade  $v$  e  $w$ , nas direções  $y$  e  $z$ , respectivamente, são nulas. Seja o volume de controle escolhido de modo que  $\Delta y \cdot \Delta z$  seja unitário. Portanto, o produto  $\Delta y \cdot \Delta z$  será a área das duas faces que são normais ao eixo  $x$ .

Agora, considere certa quantidade de fluido entrando no volume de controle através da face “a” e certa quantidade deste saindo através da face “b”, conforme a figura 2.2. A taxa de acumulação do fluido, no interior do volume de controle, é dada pela taxa de aumento da massa específica em relação ao tempo, multiplicada pelo volume:

$$\text{Acúmulo} = \frac{\partial \rho}{\partial t} \cdot \Delta x \cdot \Delta y \cdot \Delta z = \frac{\partial \rho}{\partial t} \Delta x \quad (2.29)$$

A quantidade de fluido entrando através da face em  $x = 0$  é

$$\dot{m}_0 = \rho u \cdot \Delta y \cdot \Delta z = \rho u. \quad (2.30)$$

Se o fluxo de massa for uma função contínua de  $x$ , pode-se expandi-lo em série de Taylor como

$$\dot{m}_{\Delta x} = \dot{m}_0 + \Delta x \frac{\partial \dot{m}_0}{\partial x} + \dots \quad (2.31)$$

Os termos de ordem mais elevada podem ser negligenciados se  $\Delta x$  for suficientemente pequeno. A redução no fluxo de  $x = 0$  até  $x = \Delta x$  é dada por

$$\dot{m}_0 - \dot{m}_{\Delta x} = -\Delta x \cdot \frac{\partial \dot{m}_0}{\partial x} \quad (2.32)$$

Como a expressão para a redução de fluxo é a diferença entre o que entra e aquilo que saí do volume de controle, isto deve ser igual ao termo de acumulação. Portanto,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} \Delta x = -\Delta x \frac{\partial \dot{m}_0}{\partial x}. \quad (2.33)$$

Utilizando-se a relação (2.30), obtém-se a equação da conservação da massa

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u}{\partial x} = 0. \quad (2.34)$$

Se o fluxo não for paralelo ao eixo  $x$ , as componentes da velocidade nas direções  $y$  e  $z$  não serão nulas e a equação (2.33) terá a forma

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u}{\partial x} + \frac{\partial \rho v}{\partial y} + \frac{\partial \rho w}{\partial z} = 0. \quad (2.35)$$

### 2.2.2 Conservação da Quantidade de Movimento

Pode-se dividir os diversos tipos de força, às quais um elemento de fluido está sujeito, em duas categorias: as forças de superfície e as forças volumétricas. As

forças de superfícies podem ser tangenciais, como o arraste viscoso, ou normais, como a pressão hidrostática, etc. As forças volumétricas, ou forças de corpo, são normalmente a força gravitacional ou a magnética.

A maioria dos problemas de combustão envolve geometrias nas quais pode-se negligenciar certos termos das equações de conservação, sem introduzir erros consideráveis [21]. Próximo às paredes, certos termos nas equações de conservação são extremamente pequenos, enquanto que longe das paredes, outros termos também podem ser insignificantes.

Em geral, os gradientes de velocidade, temperatura e concentração são muito pequenos longe das paredes e o fluxo pode ser considerado não viscoso, não condutor e até não difusivo. Próximo às paredes, no entanto, estes termos devem ser considerados. Isto leva a um tratamento do escoamento que considera duas regiões distintas, uma onde a viscosidade (temperatura ou concentração) é relevante, chamada de camada limite de Prandtl, ou apenas de camada limite, e outra região onde os efeitos viscosos (térmicos ou difusivos) não são importantes. Um boa discussão sobre a teoria da camada limite pode ser vista na referência [44].

As equações de conservação são normalmente deduzidas a partir de algumas hipóteses sobre a camada limite de Prandtl. Especificamente, a equação do movimento pode ser obtida pela soma das forças viscosas, gravitacional e de pressão e suas variações no interior de um volume de controle e utilizando-se a lei de Newton para a viscosidade.

Considerando um escoamento permanente, a quantidade de movimento, na direção  $x$ , entrando na face “a” e saindo na face “b” (usando expansão em série de Taylor) da figura 2.2 são, respectivamente

$$(\rho u) \cdot u \cdot (\Delta y \cdot \Delta z) \tag{2.36}$$

e

$$\rho u^2 \Delta y \Delta z + \Delta x \frac{\partial}{\partial x} (\rho u^2 \Delta y \Delta z). \tag{2.37}$$

A quantidade de movimento, na direção  $x$ , entrando na face “c” e saindo na face “d” da figura 2.2 são, respectivamente

$$(\rho u) \cdot v \cdot (\Delta x \cdot \Delta z) \quad (2.38)$$

e

$$\rho uv \Delta x \Delta z + \Delta y \frac{\partial}{\partial y} (\rho uv \Delta x \Delta z). \quad (2.39)$$

A força viscosa nas faces “c” e “d” são dadas, respectivamente, por

$$-\mu \frac{\partial u}{\partial y} \Delta x \Delta z \quad (2.40)$$

e

$$-\mu \frac{\partial u}{\partial y} \Delta x \Delta z + \Delta y \frac{\partial}{\partial y} \left( -\mu \frac{\partial u}{\partial y} \Delta x \Delta z \right). \quad (2.41)$$

A pressão na face “a” é

$$p \Delta y \Delta z, \quad (2.42)$$

ao passo que, na face “b”, novamente utilizando a série de Taylor, tem-se

$$p \Delta y \Delta z + \Delta x \frac{\partial}{\partial x} (p \Delta y \Delta z). \quad (2.43)$$

Desconsiderando as forças de corpo, a equação do movimento é dada pela soma de todos os termos anteriores:

$$\frac{\partial}{\partial x} \rho u^2 + \frac{\partial}{\partial y} \rho uv - \frac{\partial}{\partial y} \left( \mu \frac{\partial u}{\partial y} \right) + \frac{\partial p}{\partial x} = 0. \quad (2.44)$$

Diferenciando os dois primeiros termos da equação (2.44) pela regra da cadeia e aplicando a equação de continuidade, chega-se a

$$\rho u \frac{\partial u}{\partial x} + \rho v \frac{\partial u}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial y} \left( \mu \frac{\partial u}{\partial y} \right) - \frac{\partial p}{\partial x} \quad (2.45)$$

De modo análogo obtém-se a conservação da quantidade de movimento nas outras direções.

### 2.2.3 Conservação de Energia

Desconsiderando os efeitos da radiação, da geração de calor devido ao atrito entre as camadas internas do fluido e os termos referentes ao trabalho, deriva-se a seguir a equação de conservação de energia para o volume de controle da figura 2.2 numa condição de fluxo permanente. O calor gerado ou absorvido pelas reações químicas no interior do volume de controle deve ser a diferença entre o fluxo de calor que entra pelas faces do poliedro da figura 2.2 pelo fluxo de calor que sai pelas faces deste elemento. Portanto, a quantidade de calor entrando através da face “a” é

$$(\rho u \cdot \Delta y \Delta z \cdot c_p T) + \left(-k \frac{\partial T}{\partial x}\right) \cdot \Delta y \Delta z. \quad (2.46)$$

A quantidade de calor saindo pela face “b” é igual à quantidade anterior, adicionada da variação dela ao longo da distância  $\Delta x$ , isto é.

$$\begin{aligned} (\rho u \cdot \Delta y \Delta z \cdot c_p T) + \left(-k \frac{\partial T}{\partial x}\right) \cdot \Delta y \Delta z \\ + \Delta x \frac{\partial}{\partial x} \left[ (\rho u \cdot \Delta y \Delta z \cdot c_p T) + \left(-k \frac{\partial T}{\partial x}\right) \cdot \Delta y \Delta z \right]. \end{aligned} \quad (2.47)$$

Analogamente, o calor entrando pela face “c” e saindo pela face “d” pode ser representado, respectivamente, por

$$(\rho v \cdot \Delta x \Delta z \cdot c_p T) + \left(-k \frac{\partial T}{\partial y}\right) \cdot \Delta x \Delta z. \quad (2.48)$$

e

$$\begin{aligned} (\rho v \cdot \Delta x \Delta z \cdot c_p T) + \left(-k \frac{\partial T}{\partial y}\right) \cdot \Delta x \Delta z \\ + \Delta y \frac{\partial}{\partial y} \left[ (\rho v \cdot \Delta x \Delta z \cdot c_p T) + \left(-k \frac{\partial T}{\partial y}\right) \cdot \Delta x \Delta z \right]. \end{aligned} \quad (2.49)$$

A quantidade de calor produzida no volume de controle de medida unitária é dada pelo produto da taxa de reação pelo volume e pelo calor de reação.

Isto é,

$$\dot{W}_A''' \Delta H(\Delta x \Delta y \Delta z), \quad (2.50)$$

onde  $\dot{W}_A'''$  é a taxa de reação e  $\Delta H$  é o calor da reação.

Como foi feito anteriormente, para obter o balanço de calor deve-se somar todas as quantidades citadas anteriormente. Da hipótese que  $\partial T/\partial x \leq \partial T/\partial y$ , devido a análise de camada limite de Prandtl [21], chega-se a

$$\begin{aligned} (\rho u \cdot \Delta y \Delta z \cdot c_p T) &+ \left[ (\rho v \cdot \Delta x \Delta z \cdot c_p T) - \left( k \frac{\partial T}{\partial y} \cdot \Delta x \Delta z \right) \right] + \dot{W}_A''' \Delta H(\Delta x \Delta y \Delta z) \\ &= (\rho u \cdot \Delta y \Delta z \cdot c_p T) + \Delta x \frac{\partial}{\partial x} (\rho u \cdot \Delta y \Delta z \cdot c_p T) \\ &+ (\rho v \cdot \Delta x \Delta z \cdot c_p T) - \left( k \frac{\partial T}{\partial y} \cdot \Delta x \Delta z \right) \\ &+ \Delta y \frac{\partial}{\partial y} \left[ (\rho v \cdot \Delta x \Delta z \cdot c_p T) + \left( -k \frac{\partial T}{\partial y} \cdot \Delta x \Delta z \right) \right]. \end{aligned} \quad (2.51)$$

Simplificando, resulta

$$\frac{\partial}{\partial x} \rho u c_p T + \frac{\partial}{\partial y} \rho v c_p T - \frac{\partial}{\partial y} \left( k \frac{\partial T}{\partial y} \right) = \dot{W}_A''' \Delta H. \quad (2.52)$$

Diferenciando os dois primeiros termos e aplicando a equação da continuidade chega-se a

$$\rho u \frac{\partial (c_p T)}{\partial x} + \rho v \frac{\partial (c_p T)}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial y} \left( k \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \dot{W}_A''' \Delta H, \quad (2.53)$$

onde  $\Delta H$  é o calor da reação.

#### 2.2.4 Conservação das Espécies

Seguindo os mesmos passos realizados anteriormente para a conservação da quantidade de movimento ou de energia, chega-se à seguinte equação para conservação das espécies químicas

$$\rho u \frac{\partial Y_A}{\partial x} + \rho v \frac{\partial Y_A}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial y} \rho D_A \frac{\partial Y_A}{\partial y} + \dot{W}_A'''. \quad (2.54)$$

Esta equação deve ser resolvida para cada uma das espécies químicas consideradas relevantes para o problema. Na próxima seção será feito um comentário sobre as hipóteses usuais utilizadas no estudo da combustão e no final da seção serão apresentadas as equações que serão resolvidas neste trabalho, isto é, as equações que foram deduzidas, sujeitas a estas hipóteses.

## 2.3 Simplificações Usuais em Problemas de Combustão

### 2.3.1 Números Adimensionais

A seguir, há uma breve descrição de alguns números adimensionais que aparecem com frequência na descrição dos fenômenos de combustão, estes números são: o número de Reynolds, o número de Prandtl, o número de Mach, o número de Lewis, o número de Damköhler e o número de Zel'dovich. O objetivo desta seção é dar uma ideia intuitiva do que estes números representam fisicamente para o escoamento. A forma como estes adimensionais são obtidos será mostrada no capítulo sobre discretização das equações.

O número de Reynolds é uma relação entre as forças de inércia e as forças viscosas e é bastante comum no estudo de escoamentos pois é capaz de indicar o grau de turbulência do sistema [8]. Sua definição é

$$Re = \frac{\rho u L}{\mu}, \quad (2.55)$$

onde  $\rho$  é a massa específica,  $u$  é uma velocidade característica,  $L$  é um comprimento característico e  $\mu$  é a viscosidade dinâmica.

Para cada tipo de escoamento, define-se um Reynolds crítico ( $Re_c$ ) tal que, se  $Re < Re_c$  o escoamento será laminar e se  $Re > Re_c$  o escoamento será turbulento[13].

O número de Prandtl ( $Pr$ ) relaciona o transporte da quantidade de movimento com o transporte de calor:

$$Pr = \frac{\nu}{\lambda/(\rho c_p)} = \frac{\rho \nu c_p}{\lambda} = \frac{\mu c_p}{\lambda}. \quad (2.56)$$

O número de Prandtl controla a espessura relativa das camadas limite hidrodinâmica e térmica. Quando  $Pr$  é pequeno, significa que o calor irá se difundir mais por condução do que por convecção, quando  $Pr$  é grande ocorre o inverso. Na maioria dos gases,  $Pr$  tem ordem de magnitude da unidade e nos líquidos pode variar entre 10, para a água, até valores superiores a 40000, para óleos lubrificantes.

Outro adimensional comum no estudo de chamas é o número de Mach, principalmente quando há velocidades comparáveis à do som. O número de Mach para a combustão é normalmente definido como a razão entre a velocidade de queima  $s_L^0$  pela velocidade do som no meio, ou seja,

$$Ma = \frac{s_L^0}{c}, \quad (2.57)$$

onde  $c$  é a velocidade do som no fluido: para o ar tem-se  $c \approx 342m/s$ .

O número de Mach serve para distinguir dois tipos diferentes de comportamento do fluido no escoamento. Para números de Mach inferiores a unidade, o escoamento é chamado subsônico. Para valores do Mach superiores à unidade o escoamento é dito supersônico e uma formulação um pouco diferente precisa ser considerada na resolução dos problemas devido a característica de compressibilidade ficar mais acentuada.

Sejam,  $\lambda$  o coeficiente de difusão de calor e  $D_k$  o coeficiente de difusão da espécie  $k$  na mistura combustível. Os processos de difusão devem gerar um coeficiente de difusão binário ( $D_{kj}$ ) que representa a difusão da espécie  $k$  no interior da espécie  $j$ . Entretanto, isto implica na resolução de um sistema de equações para cada uma das espécies envolvidas. É comum evitar a resolução deste sistema

através de leis simplificadas de difusão, como a lei de Fick, e definir o coeficiente  $D_k$  em termos do número de Lewis como;

$$Le_k = \frac{\lambda}{\rho c_p D_k} = \frac{D_{th}}{D_k}, \quad (2.58)$$

onde  $D_{th} = \lambda/(\rho c_p)$  é o coeficiente de difusão de calor. O número de Lewis relaciona a velocidade de difusão do calor com a velocidade de difusão da espécie  $k$ . Como o número de Lewis costuma apresentar pouca variação espacial, é comum utilizar-se este valor como sendo constante. A partir da teoria cinética dos gases, mostra-se que  $\lambda$  varia aproximadamente com a temperatura na proporção de  $T^{0,7}$ ,  $\rho$  com  $\frac{1}{T}$  e  $D_k$  com  $T^{1,7}$ , o que implica que  $Le_k$  deve variar apenas poucos pontos percentuais em toda a chama.

O número de Damköhler, no estudo da combustão turbulenta, é definido como a razão entre a escala de tempo da turbulência  $\tau_t$  e a escala de tempo da reação química  $\tau_c$ , ou seja,

$$Da = \frac{\tau_t}{\tau_c}. \quad (2.59)$$

Se  $Da \ll 1$  a turbulência é muito mais rápida que a reação química, o que tem consequências diretas no comportamento da chama. Na verdade, podem ser identificados dois valores para o número de Damköhler,  $Da_{inf}$  e  $Da_{sup}$ . Para  $Da < Da_{inf}$  a chama se extingue devido aos efeitos dissipativos da turbulência. Por outro lado, para  $Da_{inf} < Da < Da_{sup}$  a chama passa por diversos regimes de queima e torna-se instável e, para  $Da_{sup} < Da$ , o regime de queima é estável. Diversos modelos de combustão fazem uso da hipótese de  $Da \gg 1$  para recair na última situação citada, ou seja, regime estável; um dos modelos que utiliza esta hipótese é o modelo *flamelet*.

Ao expressar a taxa de queima em função do número de Damköhler aparecem curvas em forma de  $S$  onde a região interna inferior do  $S$  corresponde à ignição e a região interna superior da curva corresponde à extinção.

O número de Zeldovich ( $Ze$ ) representa a razão entre a energia de ativação pela energia térmica e é dado por

$$Ze = \frac{T_a(T_f - T_0)}{T_f^2} \quad (2.60)$$

onde  $T_a$  é a temperatura de ativação dada por  $T_a = E_a/R$ ,  $T_f$  é a temperatura adiabática da chama e  $T_0$  é a temperatura do gás não queimado [6]. Em problemas de combustão, o número de Zeldovich é maior que a unidade. Para um Zeldovich elevado a reação química, em fase gasosa, somente desenvolve o processo de ignição em regiões onde há grande gradiente de temperatura [32].

Nem sempre é necessária a utilização da forma completa de uma equação (Navier-Stokes, por exemplo) para que o problema físico possa ser descrito coerentemente. Frequentemente, algumas simplificações podem ser introduzidas nas equações originais. Para problemas de combustão, as simplificações mais comuns, conforme a referência [40], são as de:

### 2.3.2 Pressão Constante

A velocidade de uma chama ( $s_L^0$ ) no interior de uma câmara de combustão normalmente varia entre 0,1 até 5m/s, enquanto que, a velocidade do som ( $c$ ) nos gases varia entre 300 até 600m/s, o que mostra que a velocidade da chama é muito menor que a velocidade do som [55].

Portanto, o número de Mach do escoamento, dado por  $s_L^0/c$ , é muito pequeno. Este fato implica que a equação de estado para a pressão pode ser considerada constante, ou seja,

$$p = \rho \frac{RT}{W} = cte. \quad (2.61)$$

Isto pode ser verificado através de uma análise dimensional sobre a equação de conservação da quantidade de movimento que, simplificadamente, pode

ser escrita na forma

$$\rho \frac{\partial u}{\partial t} + \rho u \frac{\partial u}{\partial x} = -\frac{\partial p}{\partial x} + \mu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}. \quad (2.62)$$

Esta equação pode ser normalizada através das seguintes substituições

$$u^+ = u/c, \quad x^+ = x/L, \quad \rho^+ = \rho/\rho_0, \quad t^+ = ct/L, \quad p^+ = p/(\rho_0 c^2), \quad (2.63)$$

onde  $L$  é um comprimento característico que pode ser tomado como o comprimento do combustor e  $c$  é a velocidade do som; o índice 0 refere-se a um valor de referência. Introduzindo o número de Reynolds acústico  $Re = \rho_0 c L / \mu_0$ , a equação (2.63) torna-se

$$\frac{\partial p^+}{\partial x^+} = \underbrace{-\rho^+ \frac{\partial u^+}{\partial t^+}}_{o(Ma)} - \underbrace{\rho^+ u^+ \frac{\partial u^+}{\partial x^+}}_{o(Ma^2)} + \underbrace{\frac{1}{Re} \frac{\partial^2 u^+}{\partial x^{2+}}}_{o(Ma/Re)}, \quad (2.64)$$

A equação (2.64) mostra que, para número de Reynolds grande, as variações de pressão são da ordem de  $Ma^2$  e são de ordem  $Ma$  para um fluxo transiente. Para combustão subsônica, com baixo número de Mach, estas variações são negligenciáveis e a pressão pode ser assumida constante. Veja que isso implica que a massa específica na frente de chama estará diretamente relacionada à variação de temperatura através da relação:

$$\rho_1/\rho_0 = T_0/T_1. \quad (2.65)$$

Da mesma forma, o termo de aquecimento viscoso  $\Phi = \tau_{ij}(\partial u_i/\partial x_j)$ , na equação da temperatura, é da ordem de  $Ma$  e também pode ser desconsiderado.

### 2.3.3 Capacidade Calorífica Igual Para Todas as Espécies

A equação para a temperatura pode ser simplificada usando a hipótese de que todas as espécies possuem a mesma capacidade calorífica  $c_p$ . Esta hipótese nem sempre é válida, mas frequentemente utilizada. A capacidade calorífica neste caso é um valor médio entre todas as espécies.

Esta hipótese é normalmente aceita devido a grande quantidade de espécies envolvidas e também devido a considerável simplificação que esta hipótese possibilita ao problema. Neste caso, uma boa solução numérica dependerá de bons dados experimentais. Além disso, as soluções numéricas que utilizam esta hipótese ficam limitadas a tratar problemas que já tenham sido estudados experimentalmente.

Outra hipótese, também bastante comum, é utilizar a capacidade calorífica da mistura como sendo constante e igual à capacidade calorífica da espécie dominante, isto é, aquela que está presente em maior quantidade. Esta espécie é facilmente identificada como sendo o nitrogênio para chamas que utilizam como oxidante o ar atmosférico. Isto porque o nitrogênio representa quase 70% da massa total do sistema. Esta hipótese é ainda mais inconsistente que a anterior, mas é utilizada por autores reconhecidos como Kuo [28] e, portanto, aceita pelos demais.

### 3 TEORIA DE SEMENOV E TRATAMENTO DO TERMO REATIVO

Uma chama estável é aquela que permanece acesa, enquanto houver reagentes e temperatura suficientes, após a ignição. Neste capítulo, será descrita a teoria geral sobre os processos de ignição de uma chama. Esta teoria não será utilizada para determinar os parâmetros de ignição da chama, conforme o trabalho original de Semenov. Será utilizada a hipótese de que a chama sofreu algum processo inicial de ignição e que este não irá influenciar o desenvolvimento da chama e poderá ser completamente distinto do método que será utilizado para mantê-la acesa. Portanto, a análise de Semenov será aplicada como forma de determinar os parâmetros de alguns mecanismos de estabilização para chamas difusivas.

Após a apresentação da teoria geral, que pode ser aplicada à maioria das técnicas de estabilização a serem apresentadas no capítulo 4, as peculiaridades de cada técnica serão descritas individualmente para cada uma delas, bem como, os dispositivos que são necessários para aplicá-las em uma câmara de combustão real.

A maior parte da energia gerada no processo de combustão surge na forma de calor e uma pequena fração desta energia aparece na forma de luz. A emissão de luz se deve à incandescência de partículas sólidas, de carbono por exemplo, ou devido à algumas espécies intermediárias instáveis que, ao decaírem de um estado excitado, emitem radiação em diversos comprimentos de onda, entre eles o visível [21].

Considerando que os efeitos radioativos de um processo de combustão são pequenos em relação à energia térmica, normalmente não excedem 10% da energia total gerada [22] e são extremamente difíceis de serem modelados com exatidão, durante todo este trabalho os efeitos da radiação serão desconsiderados e, portanto, serão analisados apenas os efeitos térmicos.

Para que ocorra combustão em um determinado local é necessário, e suficiente, que haja combustível (o agente redutor) e um comburente (o agente oxidante) nas proporções corretas, além de uma temperatura mínima.

Em uma chama difusiva, os gases que irão promover a combustão estão inicialmente separados fisicamente, e são colocados em contato no interior de um recipiente convenientemente chamado de *câmara de combustão*. Estes gases irão se misturar no interior desta câmara e, havendo temperatura suficiente, entrarão e permanecerão em combustão até que um dos dois, ou ambos, sejam completamente consumidos pela reação.

A tendência natural dos gases de se difundir completamente no interior de um recipiente onde eles estejam confinados garante que, em alguma região da câmara de combustão, haverá uma mistura estequiométrica, isto é, uma mistura de gases na proporção exata para que ocorra a reação química.

Do ponto de vista térmico, as reações de combustão são exotérmicas, isto é, liberam mais calor do que aquele necessário para iniciar a reação. Sabendo disso, pode-se imaginar que uma reação de combustão, após iniciada, jamais irá terminar por falta de calor uma vez que ela mesma gera mais calor do que aquele necessário para continuar o processo. Entretanto, o calor gerado pela reação é perdido para o meio através de radiação e processos de difusão e convecção. Portanto, só é possível garantir que a chama permaneça acesa se estes processos de perda de calor forem controlados.

A análise descrita a seguir é devida a Semenov [45] e pode ser feita considerando a temperatura constante e analisando-se a variação da pressão. A opção pela análise da temperatura, e não da pressão, se deve ao fato de que a primeira parece ser mais intuitiva, o que facilita a argumentação física de algumas hipóteses.

Considere uma mistura gasosa de combustível e oxidante no interior de um recipiente fechado que possui volume constante. Esta hipótese refere-se a combustão pré-misturada, pois se os dois gases estão em um recipiente fechado, eles estarão se misturando. De fato, esta teoria foi desenvolvida por Semenov para este tipo de chama, pré-misturada, mas pode ser estendida para chamas difusivas se considerarmos este recipiente fechado como sendo um volume de controle que engloba uma pequena região da superfície estequiométrica gerada pela difusão dos gases.

Assim, considerando os calores específicos dos gases como sendo iguais e constantes, pode-se obter a seguinte equação para a conservação da energia no interior do volume de controle:

$$mc_v \frac{dT}{dt} = \dot{Q} \cdot \dot{m}_{F,r}''' \cdot V \cdot \Delta h_c \quad (3.1)$$

onde  $m$  é a massa no interior do volume de controle,  $V$  é o volume do elemento de controle,  $c_v$  é o calor específico à volume constante,  $\Delta h_c$  é o calor de combustão,  $\dot{m}_{F,r}'''$  é a taxa global da reação dada por:

$$\dot{m}_{F,r}''' = \rho A_0 Y_F^n Y_{O_2}^m e^{-\frac{E}{RT}} \quad (3.2)$$

onde  $\rho$  é a massa específica,  $A_0$  é um fator de frequência,  $Y_i$  é a fração de massa do elemento  $i$ ,  $n$  e  $m$  são as ordens da reação em relação ao combustível e ao oxidante, respectivamente,  $E$  é a energia de ativação,  $R$  é a constante dos gases, e  $T$  é a temperatura em Kelvin.

O termo de geração de calor  $\dot{Q}$  é dado por

$$\dot{Q} = hS(T_\infty - T), \quad (3.3)$$

sendo  $h$  o coeficiente de transferência de calor convectivo,  $S$  a área superficial do volume de controle,  $T_\infty$  é a temperatura ambiente ( fora do volume de controle) e  $T$  é a temperatura no interior do volume de controle.

Supondo que  $T > T_\infty$ , devido à energia gerada pela reação química, a perda de calor através da superfície do volume de controle pode ser escrita como

$$\dot{Q}_L = hS(T - T_\infty). \quad (3.4)$$

A taxa de geração de energia devido à reação química, por sua vez, pode ser escrita como

$$\dot{Q}_R = \dot{m}_{F,r}''' V \Delta h_c. \quad (3.5)$$

Logo, a equação (3.1) torna-se

$$mc_v \frac{dT}{dt} = \dot{Q}_R - \dot{Q}_L. \quad (3.6)$$

O termo  $\dot{Q}_R$  pode ser aproximado por uma equação do tipo Arrhenius para descrever sua dependência com a temperatura, sendo que, para um combustível fixado,  $\dot{Q}_R$  irá depender apenas da temperatura. Por outro lado, o termo de perda de calor depende da área superficial do volume de controle, entre outras variáveis.

Assim, para um dado combustível, e considerando três volumes de controle de tamanhos distintos,  $S_1 < S_2 < S_3$ , obtém-se as curvas de geração e perda de calor em relação à temperatura mostradas na figura 3.1, considerando  $h$  constante.

As curvas de  $\dot{Q}_L$  e  $\dot{Q}_R$  podem se interceptar de três maneiras diferentes. Quando há equilíbrio estável, ocorre uma intersecção como aquela marcada pelo ponto  $E$ , onde um aumento do calor adicionado é contrabalanceado por um aumento na perda de calor fazendo com que o sistema estabilize a certa temperatura. Para temperaturas maiores pode-se obter também equilíbrio instável, como aquele representado pelo ponto  $I$  da figura 3.1. Nesta situação, uma pequena diminuição na temperatura acarretará em uma diminuição gradativa da temperatura

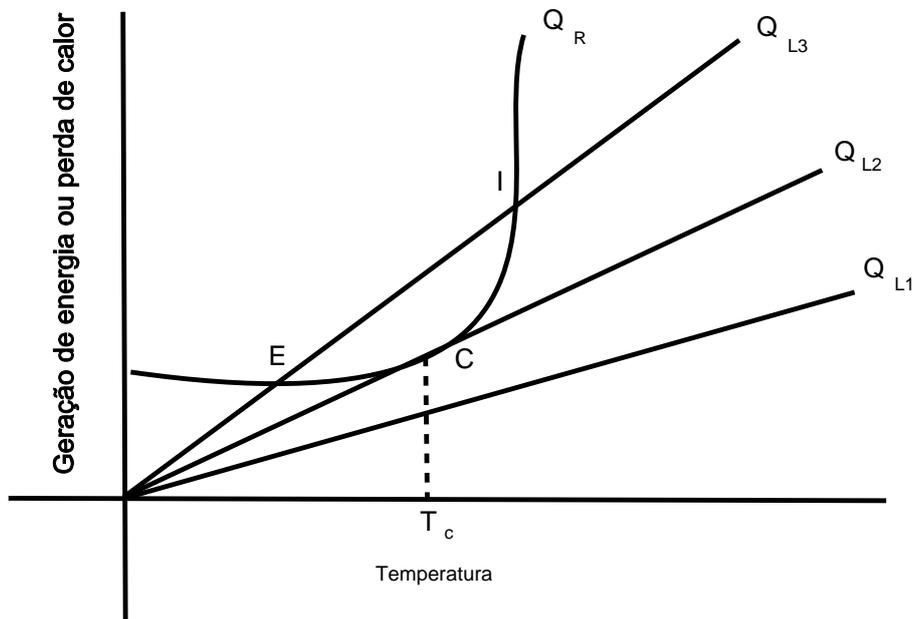


Figura 3.1: *Competição entre a perda de calor e a geração de energia química [21].*

do sistema até que o ponto  $E$  seja novamente atingido, uma vez que  $\dot{Q}_{L3} > \dot{Q}_R$ . Por outro lado, estando no ponto  $I$ , um pequeno aumento na temperatura provoca a chamada *explosão térmica* quando o calor gerado pela reação é muito superior ao calor perdido e a temperatura irá aumentar até que seja atingida a temperatura máxima da chama.

Considere agora um sistema que tenha perda de calor caracterizada pela curva  $\dot{Q}_{L2}$  da figura 3.1. Neste caso, a curva  $\dot{Q}_{L2}$  apenas tangencia a curva de geração de energia química  $\dot{Q}_R$  em uma temperatura crítica ( $T_c$ ). Para temperaturas inferiores à  $T_c$  tem-se  $\dot{Q}_{L2} < \dot{Q}_R$  mas, como a taxa de geração de energia é praticamente constante, a temperatura não varia consideravelmente com o tempo. Porém, para  $T > T_c$  a taxa de geração de energia cresce exponencialmente e a reação desencadeia-se sem ser muito afetada pela perda de calor. A temperatura  $T_c$  é chamada de *temperatura de auto-ignição*, visto que, se  $T_\infty \approx T_c$  a reação de combustão ocorre sem a necessidade de ignição externa.

Claramente, para situações em que a perda de calor é representada pela curva  $\dot{Q}_{L1}$  da figura 3.1, a reação irá ocorrer para qualquer temperatura do sistema. As curvas de perda de calor são normalmente lineares e sua inclinação depende de variáveis como o tamanho do volume de controle considerado, da temperatura ambiente, entre outras que serão descritas em breve. Por sua vez, as curvas de geração de energia química são normalmente representadas por equações do tipo Arrhenius e apresentam um perfil parecido com aquele da curva  $\dot{Q}_R$  da figura 3.1 para reações de ordem zero e podem variar um pouco para reações que possuam grandes ordens em relação aos reagentes.

Considere uma reação de ordem zero para ambos os reagentes, ou seja, as concentrações de combustível e oxidante são mantidas constantes. Assim, pode-se estimar a dependência das curvas  $\dot{Q}_L$  em relação às propriedades do gás e das dimensões da câmara de combustão da seguinte maneira. Suponha que a temperatura ambiente ( $T_\infty$ ) dos gases que irão entrar em combustão esteja muito próxima da temperatura crítica  $T_c$ . Deste modo, tomando  $T_\infty < T < T_c$  pode-se escrever

$$\begin{aligned} e^{\frac{-E}{RT}} &= \exp \left[ \left( \frac{-E}{RT_\infty} \right) \left( \frac{T_\infty}{T - T_\infty + T_\infty} \right) \right] \\ &= \exp \left[ \left( \frac{-E}{RT_\infty} \right) \left( \frac{T - T_\infty}{T_\infty} + 1 \right)^{-1} \right]. \end{aligned} \quad (3.7)$$

Como  $\frac{T - T_\infty}{T_\infty}$  é, por hipótese, pequeno, pode ser feita a seguinte aproximação

$$\left( \frac{T - T_\infty}{T_\infty} + 1 \right)^{-1} \approx 1 - \frac{T - T_\infty}{T_\infty}. \quad (3.8)$$

Esta aproximação pode ser feita através da expansão em séries de potências do termo do lado esquerdo da equação (3.7); os termos que aparecem no lado direito desta equação são, justamente, os dois primeiros termos desta série. Defina, então

$$\theta \equiv \left( \frac{T - T_\infty}{T_\infty} \right) \left( \frac{E}{RT_\infty} \right). \quad (3.9)$$

Inserindo a equação (3.9) na equação (3.7), tem-se

$$e^{\frac{-E}{RT}} \approx e^\theta e^{\frac{-E}{RT_\infty}}. \quad (3.10)$$

Este procedimento é comum quando se pretende adimensionalizar a equação (3.1), uma vez que  $\theta$  é um valor adimensional. Deste modo, uma análise dimensional da equação (3.6) mostra que

$$\rho V c_v \frac{dT}{dt} \sim hS(T - T_\infty), \quad (3.11)$$

e pode ser obtido um tempo de referência

$$t_c = \frac{\rho V c_v}{hS}. \quad (3.12)$$

Esta variável  $t_c$  representa, fisicamente, o tempo necessário para que o gás, no interior de um recipiente, perca toda a sua energia para a vizinhança através da condução. Defina, agora, o tempo adimensional

$$\tau = \frac{t}{t_c}. \quad (3.13)$$

Reescrevendo a equação (3.1) com a aproximação para a exponencial  $e^{-E/RT}$ , tem-se

$$\frac{d\theta}{d\tau} = \delta e^\theta - \theta, \quad (3.14)$$

onde

$$\delta = \left( \frac{\Delta h_c V A e^{-E/(RT_\infty)}}{hS T_\infty} \right) \left( \frac{E}{RT_\infty} \right) \quad (3.15)$$

é um valor adimensional chamado de *número de Damköhler*, é comum usar  $Da$  para referir-se ao número de Damköhler. Esta equação pode ser resolvida, supondo  $\theta = 0$  em  $\tau = 0$ , obtendo-se o aumento de temperatura para certo  $\delta$  dado.

Para se encontrar o ponto  $C$  da figura 3.1, no qual a combustão ocorre, deve-se analisar a equação (3.14). Nesta equação,  $\delta e^\theta$  é a forma adimensional de

$\dot{Q}_R$ , enquanto que  $\theta$  é a forma adimensional de  $\dot{Q}_L$ . Assim, obtém-se a temperatura crítica  $\theta_c$  onde as duas curvas se interceptam e suas tangentes são iguais. Ou seja,

$$\delta_c e^{\theta_c} = \theta_c \quad (3.16)$$

$$\delta_c e^{\theta_c} = 1. \quad (3.17)$$

Dividindo-se a equação (3.16) pela equação (3.17), tem-se

$$\theta_c = 1, \quad \text{e segue que} \quad (3.18)$$

$$\delta_c = e^{-1}. \quad (3.19)$$

Considerando um recipiente com tamanho constante, as equações (3.15) e (3.19) possuem um valor  $T_\infty$  mínimo capaz de gerar a combustão. Este valor  $T_{\infty,c}$  é a chamada *temperatura de auto-ignição*. Os parâmetros químicos  $A$ ,  $E$  e  $\Delta h_c$ , assim como a dimensão espacial, ficam contidos no parâmetro  $\delta$ . Igualando as equações (3.9) e (3.18)

$$\frac{T_c - T_\infty}{T_\infty} = \frac{RT_\infty}{E}, \quad (3.20)$$

obtém-se a temperatura de auto-ignição para qualquer temperatura ambiente em função da energia de ativação da reação que é característica para cada gás. A tabela a seguir, adaptada da referência [41], mostra a temperatura de auto-ignição para diversos gases à temperatura ambiente de  $25^\circ\text{C}$ .

Tabela 3.1: Temperatura de auto-ignição a  $25^\circ\text{C}$  e  $1\text{atm}$  para mistura estequiométrica com o ar como oxidante [41].

Combustível	Temperatura de Auto-ignição ( $^\circ\text{C}$ )
Querosene,	210
n-Heptano, $C_7H_{16}$	215
n-Hexano, $C_6H_{14}$	225
Etanol, $C_2H_5OH$	365
Metanol, $CH_3OH$	385
Hidrogênio, $H_2$	400
Propano, $C_3H_8$	450
Gasolina,	450
Etano, $C_2H_6$	515
Metano, $CH_4$	540

## 4 TÉCNICAS DE ESTABILIZAÇÃO

Para que o processo de combustão seja permanente, isto é, para que o combustível e o oxidante continuem reagindo após a ignição inicial, é necessário que os reagentes se misturem continuamente e que os gases quentes, provenientes da queima, sejam capazes de promover a auto-ignição da mistura reativa [40]. Este processo é chamado de estabilização de chama e é o critério principal para o desenvolvimento de câmaras de combustão, especialmente aquelas de alta potência como em fornos industriais, entre outras [40].

A estabilização de chamas pré-misturadas é, até certo ponto, mais simples do que das chamas difusivas pois a necessidade de mistura já está satisfeita. Se a chama for laminar, existem diversos métodos, bastante conhecidos e utilizados, capazes de garantir que a chama permaneça estável. Entretanto, ao tratar-se com chamas turbulentas ou difusivas, ou ambas, as técnicas de estabilização são raras e a obtenção de códigos computacionais, capazes de prever a estabilização, torna-se um desafio [40].

Industrialmente, as chamas difusivas são preferidas em relação às pré-misturadas pois, além de serem mais seguras, o projeto e a construção do sistema de combustão é mais simples e barato, visto que, não exige que os reagentes sejam perfeitamente misturados. Mas uma estabilização deficiente da chama, em uma câmara de combustão, pode provocar condições de operação bastante perigosas como grandes oscilações capazes de danificar a estrutura da câmara ou, em alguns casos, a chama pode simplesmente apagar-se, o que seria bastante inconveniente se esta fosse utilizada para a propulsão de aeronaves, por exemplo [50].

Muitos modelos de combustão simplesmente ignoram o problema de estabilização assumindo que a frente de chama sofre ignição em toda sua extensão. Por exemplo, assumir uma reação química infinitamente rápida, ou supor algum tipo

de estrutura de ignição da chama, implica diretamente que a combustão é ativada em alguma camada onde combustível e oxidante se misturam; esta camada é chamada de superfície estequiométrica. Esta hipótese é aceitável para alguns escoamentos, mas frequentemente é utilizada em casos onde ela não é verdadeira, o que acaba levando a resultados errôneos. Assim, a maior desvantagem destes modelos é que sua descrição da combustão para algumas taxas de escoamento não é realística. Assim, muitas câmaras de combustão restringem os fluxos de combustível e oxidante entre certos limites para evitar a extinção da chama [40].

Devido ao excelente detalhamento de algumas técnicas de estabilização apresentadas por Poinot [40], parte deste capítulo será baseado nas ideias presentes nesta referência. A tabela (4.1), retirada da referência [40], relaciona algumas técnicas de estabilização com a velocidade de injeção dos reagentes em uma câmara de combustão. Quanto maior a velocidade de entrada, maior será a quantidade de reagentes e, conseqüentemente, maior a energia liberada no processo.

O símbolo  $s_L^0$ , que aparece na tabela (4.1), refere-se à velocidade de propagação da chama laminar. As técnicas citadas nesta tabela não são as únicas possíveis sendo que a ideia da tabela é simplesmente mostrar que, quanto maior a velocidade, mais difícil será tornar a chama estável.

Tabela 4.1: Principais técnicas de estabilização em função da velocidade dos reagentes [40].

Velocidade de entrada	Método de estabilização	Mecanismo de estabilização
Muito baixa ( $< s_L^0$ )	Não é necessário	Chamas estabilizadas na camada de mistura
Baixa ( $< 5s_L^0$ )	Não é necessário	Chamas triplas
Alta ( $> 10s_L^0$ )	Uso de chamas <i>pilot</i>	Chamas estabilizadas por gases quentes
	Aquecimento de um dos reagentes	Auto-ignição
	Criação de zona de recirculação	Chamas estabilizadas pelos gases criados pela combustão

Normalmente, todos os métodos citados na tabela, e os demais que serão descritos a seguir, podem ser utilizados simultaneamente. A definição sobre qual método deverá ser utilizado baseia-se normalmente em custos e na facilidade de implementação. Um dos objetivos deste trabalho é gerar subsídios para que outros critérios também possam ser considerados na hora de escolher a técnica de estabilização a ser utilizada como, por exemplo, a geração de poluentes, a temperatura máxima obtida, entre outros.

Antes de detalhar cada método é importante ressaltar a diferença entre o que será chamado de método de estabilização, ou técnica de estabilização, e mecanismo de estabilização. O método refere-se ao dispositivo, ou equipamento, utilizado para condicionar de alguma forma os reagentes. Deste modo, a criação de zonas de recirculação é um método, pois pode ser realizada pela alteração da geometria interna da câmara. O mecanismo refere-se ao resultado termodinâmico gerado pelo método. Por exemplo, o aquecimento de um dos reagentes é um método que induz ao mecanismo de auto-ignição. O mecanismo de auto-ignição, por sua vez, garante a estabilidade da chama, pois um dos reagentes já terá a energia de ativação necessária para iniciar a combustão, bastando apenas que ocorra a mistura.

A seguir, serão descritas as principais técnicas de estabilização de chamas difusivas presentes na literatura. Considere os métodos aqui apresentados como os principais, visto que são os que mais aparecem na literatura.

## 4.1 Chamas estabilizadas na camada de mistura

Este tipo de estabilização ocorre naturalmente, isto é, sem influência externa, quando a velocidade de inserção do combustível e do oxidante forem baixas em comparação com a velocidade da chama laminar estequiométrica pré-misturada ( $s_L^0$ ). O valor de  $s_L^0$  é diferente para cada combustível. Para chamas de metano, Warnatz [54] indicou ser  $s_L^0 \approx 0,4m/s$ .

Neste tipo de procedimento, a chama permanece estabilizada na superfície estequiométrica. Quando a geometria da câmara de combustão for construída de modo que as correntes de combustível e oxidante sejam concorrentes, geometria chamada de *coflow*, este tipo de chama fica ancorada, ou seja, muito próxima à saída do injetor. O esquema de uma câmara de combustão com geometria *coflow* e com uma chama ancorada à saída do injetor é mostrada na figura 4.1

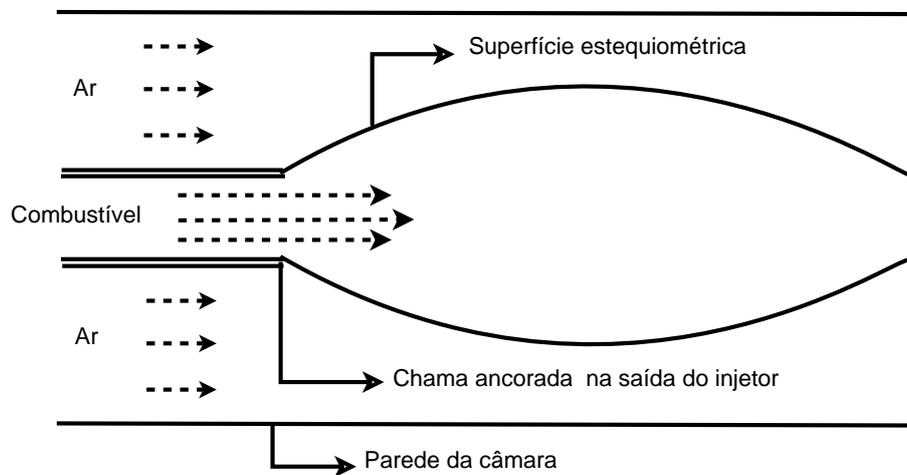


Figura 4.1: Câmara de combustão com *coflow* e chama ancorada na saída do injetor.

A baixa velocidade do escoamento resulta em baixa potência; logo, para se obter uma maior taxa de geração de energia é necessário que a velocidade seja aumentada. Para velocidades superiores à  $s_L^0$ , começa a ocorrer um desprendimento da chama em relação à saída do injetor de combustível e a chama fica flutuando a uma certa distância do injetor; este fenômeno é chamado de *liftoff*. O *liftoff* ocorre devido a perda de calor e ao aumento dos efeitos de diluição que ocorrem nesta região do escoamento [54].

Caso seja necessário impor fluxos cada vez maiores, o fenômeno de *liftoff* deverá ser controlado de alguma maneira para evitar que a chama distancie-se demais do injetor e se apague; quando isso ocorre diz-se que ocorreu um *blowoff*.

Uma maneira de evitar que ocorra o *blowoff* é utilizar uma das técnicas descritas nas próximas seções.

## 4.2 Chamas triplas para estabilização

Chamas triplas são utilizadas na estabilização de uma chama difusiva laminar numa região distante do local de injeção. Nesta situação, a mistura entre combustível e oxidante ocorre antes da chama entrar em ignição, de modo que duas chamas pré-misturadas e uma chama difusiva podem ser observadas.

Estas chamas ocorrem quando as correntes de combustível e oxidante são separadas por uma placa fina e as velocidades são mantidas fixas a um valor levemente superior a  $s_L^0$ . Quando a velocidade do escoamento é muito próxima a  $s_L^0$  a chama ficará ancorada à placa que separa as correntes. Conforme a velocidade vai aumentando o fenômeno de *liftoff* também ocorre, porém, à velocidades superiores às aquelas que seriam possíveis em uma estabilização pela camada de mistura [52]. Um desenho esquemático desse tipo de situação é mostrado na figura 4.2

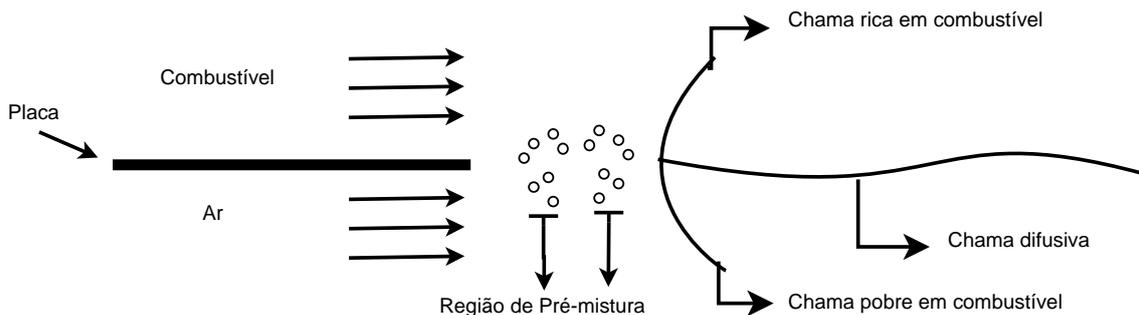


Figura 4.2: *Estabilização de uma chama difusiva com chama tripla.*

É possível manter uma chama tripla estabilizada a velocidades mais altas e a distâncias maiores, em relação ao caso de estabilização na camada de mistura, porque este tipo de chama é capaz de modificar o escoamento na região

anterior à chama difusiva. Assim, as duas chamas pré-misturadas que aparecem em ambos os lados da chama difusiva são capazes de desacelerar o fluxo de reagentes e a ela ainda fornecem a temperatura necessária para a auto-ignição da chama difusiva.

Este tipo de técnica não é muito comum e poucos pesquisadores tem estudado este assunto nos últimos anos. Um dos primeiros a descobrir o fenômeno das chamas triplas foi Phillips em 1965 [38] e alguns outros trabalhos experimentais e teóricos foram realizados por Takahashi [47], Liñán [32], Dold [9], Kioni [25], entre outros, no início dos anos noventa. Ghosal e Vervisch [14] apresentaram uma análise teórica e numérica sobre este tipo de chama no ano de 2000, porém, ainda não se sabe se é possível a utilização de chamas triplas para estabilizar chamas turbulentas não pré-misturadas.

### 4.3 Auto-Ignição para estabilização

Quando uma corrente de combustível ou de oxidante está suficientemente aquecida, a estabilização da chama ocorre pelo processo de auto-ignição no interior da camada de mistura, independentemente das velocidades de injeção. Esta situação é encontrada na combustão supersônica (por exemplo, em scramjets ou ramjet<sup>1</sup> supersônico) onde a corrente de ar é suficientemente aquecida devido aos efeitos de compressão, o que garante a ignição da chama. O desafio técnico encontra-se na distância de ignição  $\delta_i$ , que deve ser a mais curta possível. A auto-ignição também é encontrada em motores à diesel onde o ar é aquecido pela compressão que ocorre após a injeção do combustível. Do ponto de vista numérico, estas situações são difíceis de tratar pois os mecanismos de ignição, geralmente relacionados a complexos mecanismos químicos, devem ser incorporados aos modelos. A maioria dos códigos computacionais que utilizam os modelos clássicos de combustão, baseados

---

<sup>1</sup>Ramjet é um modelo de turbina de aviação.

em um escalar para definir a taxa de mistura, tendem a apresentar dificuldades em descrever com precisão a distância de ignição  $\delta_i$ .

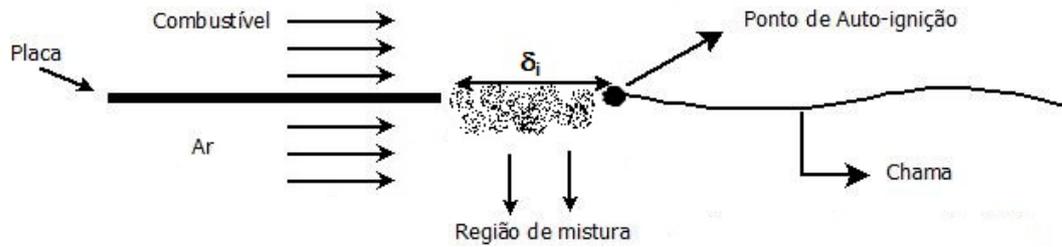


Figura 4.3: *Estabilização de uma chama turbulenta não pré-misturada pelo mecanismo de auto-ignição.*

A pressão necessária para se atingir a temperatura de auto-ignição pode ser calculada através da lei dos gases ideis,  $p = \rho \frac{RT}{W}$ . Por sua vez, a temperatura de auto-ignição depende da temperatura do outro reagente que não será aquecido. Esta temperatura pode ser calculada através da equação (3.20), utilizando-se  $T_\infty$  como a temperatura do reagente não aquecido e  $T_c$  a temperatura de auto-ignição para esta condição.

É possível também, apesar de não ser comum, que os reagentes sejam aquecidos por outro processo que não seja o aumento da pressão. Neste caso, prefere-se aquecer o combustível. Isso ocorre porque, em geral, a massa de combustível não excede os 10% da massa total do sistema, logo, há um menor gasto energético para aquecer uma menor quantidade de reagente.

#### 4.4 Geometria da Câmara

Para fluxos de velocidade muito elevada, uma solução comum para se obter a estabilização da chama é criar uma zona de recirculação que age como um reservatório de gases queimados e quentes, capazes de prover a energia suficiente

para a ignição dos reagentes. Esta zona de recirculação pode ser criada de duas maneiras diferentes:

- Expansão súbita (Geometria da câmara): a zona de recirculação é criada pela geometria do queimador;

- Rotação: uma rotação é induzida em um dos reagentes. Esta técnica será discutida na próxima seção.

A figura 4.4 apresenta algumas configurações possíveis para a utilização da técnica de expansão súbita. Na parte superior da figura 4.4 encontra-se a configuração chamada de *bluff-body* onde combustível e oxidante são separados durante uma grande etapa gerando zonas de recirculação e mistura entre combustível e oxidante. A zona de recirculação característica é extremamente dependente das velocidades relativas de injeção do combustível e do oxidante. Em outra configuração possível, combustível e oxidante são injetados no mesmo lado onde um corpo serve de obstáculo e gera uma grande recirculação de produtos queimados que estabilizam a combustão, na parte inferior da figura 4.4.

Estas duas situações não são muito bem descritas usando-se simulações numéricas. De fato, dados experimentais de *bluff-body* mostram que, devido as zonas de recirculação, o combustível é transportado para a corrente de oxidante e vice-versa, e este fenomeno não é corretamente descrito pelos modelos de transporte turbulento clássicos. Para a configuração (b) da figura 4.4, oxidante é transportado através da corrente de combustível até a região de recirculação dos gases já queimados. Neste caso, um modelo tradicional de transporte escalar é geralmente insuficiente para reproduzir este mecanismo.

Por exemplo, usando a hipótese de equilíbrio químico, que é feita na maioria dos modelos de chama turbulenta não pré-mistura clássicos, pode-se prever, numericamente, que a chama difusiva ficará ancorada na região do queimador que separa o combustível do oxidante, conforme a figura 4.5, o que não é realístico.

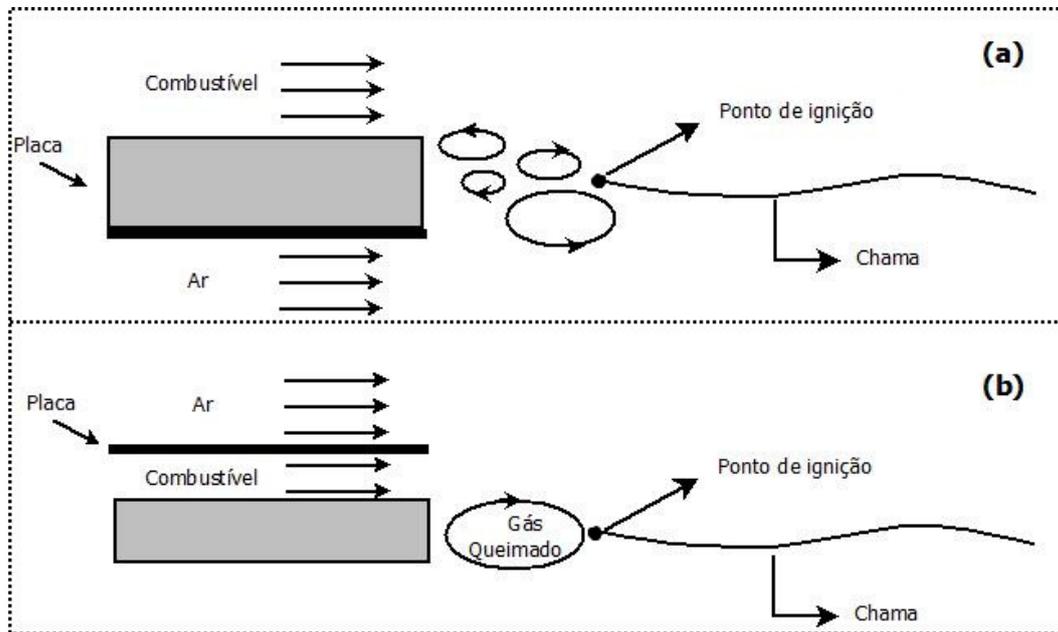


Figura 4.4: *Estabilização de uma chama turbulenta não pré-misturada por zonas de recirculação.*

Uma maneira de contornar este problema seria, simplesmente, dispensar a hipótese de equilíbrio químico e não utilizar um escalar conservativo de massa, como a fração de mistura  $Z$ , para caracterizar a chama. Entretanto, sem a hipótese de equilíbrio químico, o número de equações a serem consideradas dobra, uma vez que precisam ser consideradas todas as reações químicas no sentido inverso. Com um número maior de equações a serem resolvidas, a possibilidade de divergência do modelo numérico aumenta.

## 4.5 Chamas estabilizadas por rotação

Para grandes potências e velocidades de injeção muito elevadas, a criação de uma zona de recirculação após uma expansão súbita não é suficiente para garantir a estabilização da chama, visto que, busca-se realizar esta operação minimizando a

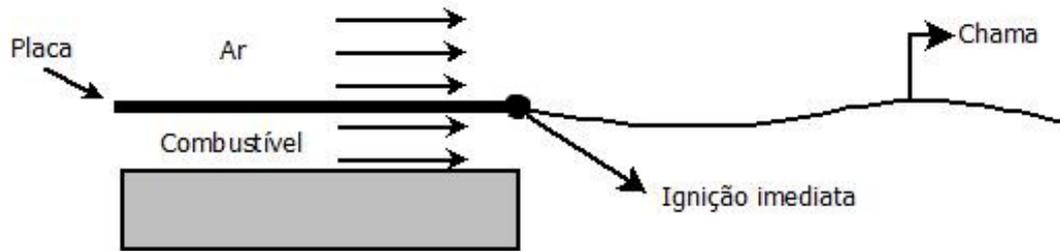


Figura 4.5: *Estabilização de uma chama turbulenta não pré-misturada prevista por um modelo clássico usando a hipótese de equilíbrio químico.*

perda de pressão. Nestes casos, redemoinhos oferecem outro mecanismo de estabilização que pode ser usado em diversas aplicações industriais.

Estes redemoinhos, ou vórtices, são gerados por um movimento de rotação induzido sobre um dos reagentes antes que ele entre na câmara de combustão. Isto pode ser feito por meio de palhetas ou injeção lateral de pequenos jatos do próprio reagente. Estes vórtices criam regiões de baixa velocidade no eixo da câmara de combustão. Sem a influência da combustão, o tamanho e comprimento destas zonas de baixa velocidade dependem da “intensidade” do vórtice:

- Para vórtices de baixa intensidade, a velocidade axial diminui no eixo. Após a ignição, isto pode facilitar a estabilização da chama não apenas na lateral das zonas de recirculação produzidas pela descarga, mas também no eixo;

- Para vórtices de alta intensidade, esta zona de baixa velocidade pode tornar-se uma zona de recirculação e ser usada como um ponto de estabilização para a entrada dos gases reagentes;

- Para vórtices de intensidade muito elevada, as zonas laterais de recirculação desaparecem e toda a câmara é preenchida por uma grande região de recirculação axial. Os gases frios escoam ao longo das paredes da câmara, fenômeno

chamado de *wall jet flow*[40]. Entretanto, redemoinhos muito grandes também possuem desvantagens. Quando a zona de recirculação é muito grande a chama pode retornar pelo sistema de injeção, fenômeno chamado de *flashback*, e danificá-lo.

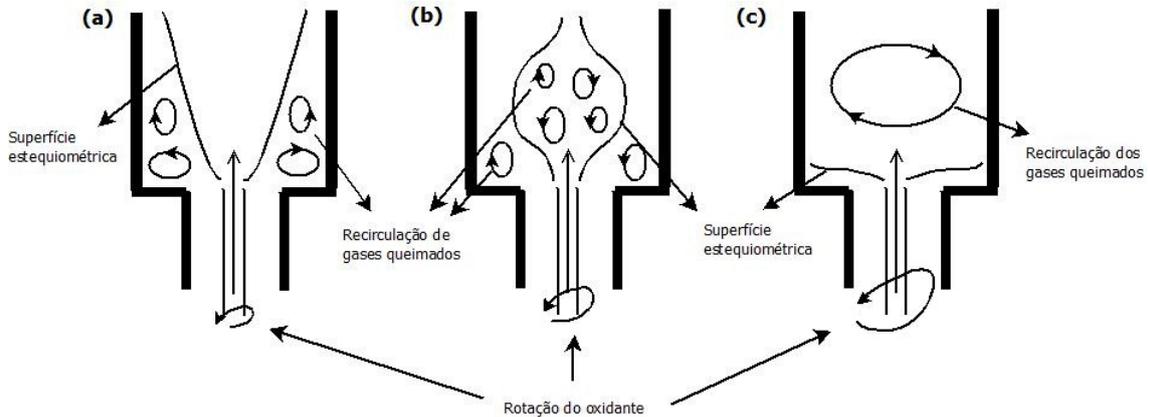


Figura 4.6: *Fluxo rotacional não reativo em uma câmara de combustão. Esquema das zonas de recirculação correspondentes com acréscimo na intensidade do vórtice.*

Tais processos são usados na maioria das turbinas a gás e muitas geometrias podem ser encontradas usando uma rotação ou vários “co-fluxos” e “contra-fluxos”. Estes redemoinhos também podem ser usados para fragmentar um jato de combustível líquido.

A simulação de chamas estabilizadas por rotação requer a descrição do campo de escoamento. Normalmente, modelos de turbulência como o  $k - \epsilon$  não são muito bons para fluxos rotacionais, e é necessário que sejam levados em consideração os fenômenos químicos de ignição.

## 4.6 Chamas com *Pilot*

Uma técnica de estabilização bastante comum é a utilização de pequenas chamas pré-misturadas no bordo do injetor de combustível, conforme figura 4.7. Estas chamas são normalmente chamadas de chamas *Pilot* e servem para fornecer a

energia necessária à combustão da chama principal e ancorá-la próximo ao ponto de injeção do combustível. A habilidade de uma chama *pilot* em prover a estabilização depende de diversos fatores como: a composição da mistura, o tempo de contato entre a chama *pilot* e a mistura, o tamanho e a temperatura da chama *pilot*.

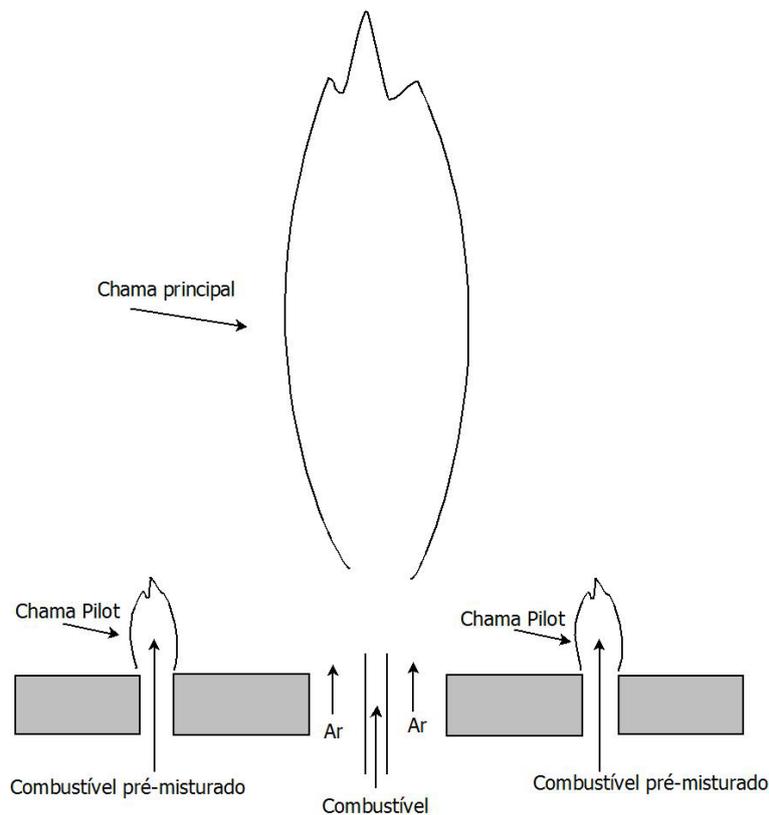


Figura 4.7: *Esquema de utilização de chamas pilot no bordo do injetor de combustível.*

Em uma chama difusiva a composição da mistura varia espacialmente; no entanto, deve-se inserir o *pilot* em uma região próxima à superfície estequiométrica. Como o combustível entra em contato com o oxidante a partir da saída do injetor, pode-se garantir que nesta região exista uma superfície estequiométrica. Para fins práticos, o tempo de contato entre a chama *pilot* e a mistura é irrelevante pois é muito comum que o *pilot* seja mantido aceso continuamente, o que resulta em

um tempo de contato infinito. Portanto, este parâmetro, o tempo de contato, será desconsiderado.

Assim, os principais parâmetros à serem analisados na utilização deste tipo de técnica são a temperatura da chama e seu tamanho. Claramente, a temperatura da chama *pilot* deve ser superior à temperatura de auto-ignição, que pode ser facilmente calculada. Pode-se obter uma chama pré-misturada de maior ou menor temperatura variando-se o combustível e o percentual de mistura. Normalmente, utiliza-se o mesmo combustível da chama principal para criar a chama *pilot* e o percentual de mistura é mantido o mais próximo possível do estequiométrico, o que garante a maior temperatura possível.

Para facilitar a análise do tamanho da chama *pilot*, será considerado o caso unidimensional seguindo a referência [21] que supõe uma chama *pilot* de espessura  $2a$ , temperatura  $T_w$  e comprimento infinito. Claramente, em aplicações práticas, as chamas *pilot* possuem tamanhos finitos e são tridimensionais, entretanto, o caso tridimensional pode ser obtido do unidimensional através de procedimentos bastante análogos sendo, porém, o unidimensional mais intuitivo graficamente.

Esta chama formará, então, uma placa infinita que será considerada imersa em um reservatório infinito de mistura combustível à temperatura  $T_0$  em  $t = 0$ . A hipótese de reservatório infinito se justifica pela alimentação contínua dos reagentes na região da chama. Desconsiderando os efeitos convectivos, a equação de transferência de energia deste sistema é dada por

$$\rho c_v \frac{\partial T}{\partial t} = k \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \Delta H k_n C_A^n e^{-E/RT}. \quad (4.1)$$

Conforme a equação (4.1), a temperatura irá variar com a posição e com o tempo no interior da mistura. Esta equação estará sujeita às seguintes condições

iniciais e de contorno:

$$\begin{aligned}
 t \leq 0 \quad T &= T_w \text{ em } 0 < |y| < a \\
 T &= T_0 \text{ em } a < |y| < \infty;
 \end{aligned}
 \tag{4.2}$$

$$\begin{aligned}
 t > 0 \quad \frac{\partial T}{\partial t} &= 0 \text{ em } y = 0 \\
 \frac{\partial T}{\partial y} &= 0 \text{ em } |y| = \infty \\
 T &= T_0 \text{ em } |y| = \infty
 \end{aligned}
 \tag{4.3}$$

Se for desconsiderado o termo fonte da equação (4.1), pode-se obter uma solução analítica que irá descrever a difusão da temperatura com o tempo. Entretanto, se o termo reativo for mantido, torna-se mais elaborado encontrar uma solução analítica para o problema. Assim, pode-se obter soluções numéricas que descrevem o comportamento do sistema. O resultado da solução numérica é o seguinte: Nos instantes iniciais, o termo referente à reação química é pouco significativo e, assim, o perfil de temperatura tende a decair com o tempo até um instante crítico. A partir daí, dois casos podem ocorrer:

- No primeiro, se a espessura da chama *pilot* for menor que um certo tamanho crítico, o perfil de temperatura continua decaindo e, eventualmente, a própria chama *pilot* apaga-se devido à excessiva perda de energia em relação à baixa taxa de geração;

- No segundo, se a espessura da chama *pilot* é maior que o valor crítico, a reação exotérmica inverte a tendência de decaimento do perfil de temperatura e possibilita a propagação da chama principal.

A espessura crítica da chama *pilot*  $a_c$  pode ser determinada experimentalmente e é da ordem de magnitude da espessura da chama laminar estabilizada,

ou seja

$$a_c \approx \delta_L. \quad (4.4)$$

Usando as equações (3.4) e (3.5), tem-se

$$\dot{Q}_L \approx hS(T - T_\infty)/\delta_L, \quad (4.5)$$

e

$$\dot{Q}_R \approx \dot{m}_{F,r}''' S \cdot \delta_L \Delta h_c. \quad (4.6)$$

Logo, combinando as equações (4.5) e (4.6), obtem-se

$$a_c \approx \left( \frac{h(T - T_\infty)}{\Delta h \dot{m}_F'''} \right)^{1/2}. \quad (4.7)$$

Esta equação mostra que uma grande espessura da chama *pilot* é necessária para a ignição de uma mistura que possua alta condutividade e alta temperatura de chama. Por outro lado, se a taxa de geração de calor for grande, então a espessura crítica da chama *pilot* é pequena. Além disso, como a difusividade térmica é inversamente proporcional à massa específica, pode-se dizer que

$$a_c \propto \frac{1}{\rho u} \propto \frac{1}{p^{n/2}} \quad (4.8)$$

onde  $\rho$  é a massa específica,  $u$  é a velocidade do escoamento,  $p$  é a pressão e  $n$  é a ordem da reação. Da equação (4.8) pode-se concluir que a espessura crítica é menor à altas pressões.

Esta técnica é muito eficiente, mas necessita do uso de uma chama pré-misturada secundária e todos os componentes relacionados como alimentação secundária, controle, etc. Outra desvantagem com relação à utilização de chamas *pilot* é que elas aumentam o desgaste dos injetores de combustível devido à fadiga térmica e corrosiva do material do injetor, principalmente em equipamentos como

motores à diesel e turbinas à gás. Do ponto de vista numérico, as chamadas *pilot* podem descrever uma fonte de calor ou a injeção de gases queimados.

## 4.7 Faísca Elétrica

A estabilização da queima de uma mistura combustível também pode ser realizada através da utilização de uma faísca elétrica em uma região do escoamento, previamente determinada. A descarga elétrica é capaz de prover a energia necessária para manter a ignição em uma região estequiométrica próxima à faísca.

A faísca pode ser gerada pela descarga de capacitores, que normalmente ocorrem muito rapidamente (com tempos da ordem de  $0,01 \mu s$ ), ou através de indutores. A descarga de capacitores é produzida por capacitores que acumulam continuamente os elétrons e geram a descarga sempre que uma certa diferença de potencial é atingida. A descarga de indutores é produzida por um circuito aberto e envolve a utilização de transformadores, bobinas de ignição e magnetos.

Na utilização do sistema com capacitores, também chamados de condensadores, dois eletrodos são colocados em uma posição onde acredita-se ser a mais conveniente do ponto de vista estequiométrico. Estes eletrodos ficam separados por uma distância  $d$  e pode ser utilizado um isolamento parcial para delimitar a região de descarga conforme indica a figura 4.8.

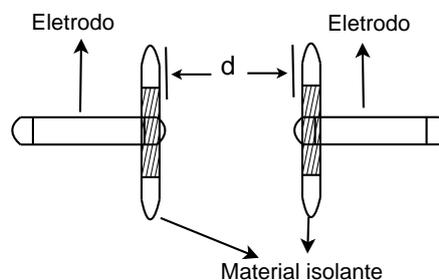


Figura 4.8: *Esquema de eletrodos com isolamento.*

Se a capacitância do condensador for  $C$ , e  $V_1$  e  $V_2$  forem as suas voltagens antes e depois da descarga, respectivamente, então a energia liberada pela faísca é dada por

$$E = \frac{C(V_1^2 - V_2^2)}{2}. \quad (4.9)$$

A distância  $d$  entre os eletrodos e a utilização, ou não, dos isoladores também influencia o processo de ignição da chama. Para valores de  $d$  muito pequenos não é possível realizar a ignição pois a chama não consegue se propagar em regiões muito estreitas. Pode-se definir uma distância mínima a partir da qual é possível a ignição. A partir deste valor mínimo, conforme  $d$  aumenta, a energia necessária para realizar a ignição diminui até atingir um valor crítico. Após este valor crítico, um aumento na distância entre os eletrodos implica em um aumento na energia necessária à ignição. O resultado da comparação entre a energia necessária e a distância dos eletrodos é uma curva em forma de  $U$ .

A energia mínima necessária para a ignição  $E_{min}$  pode ser definida como a menor quantidade de energia que a faísca deve ter para garantir a ignição e propagação da chama. A distância mínima entre os eletrodos a partir da qual é possível a ignição  $d_E$  é chamada de distância de extinção e é definida como a menor distância entre duas paredes através da qual uma chama pode ser propagar.

As variáveis  $E_{min}$  e  $d_E$  dependem das características dos reagentes e da mistura. Entretanto, experimentalmente verificou-se que elas estão relacionadas pela equação

$$E_{min} = \kappa d_E^2, \quad (4.10)$$

onde  $\kappa$  é uma constante de proporcionalidade.

Baseando-se em dados experimentais e realizando uma análise análoga àquela descrita na seção 3 verifica-se que, para um fluxo turbulento, a energia mínima

necessária para a ignição é dada aproximadamente por

$$E_{min} \approx \frac{4\pi}{3} \rho_0 c_V \left( \frac{K}{\Delta H \dot{W}'''} \right)^{3/2} (T_f - T_0)^{5/2}, \quad (4.11)$$

onde  $\rho_0$  é a massa específica da mistura,  $c_V$  é o calor específico a volume constante da mistura,  $T_0$  é a temperatura antes da faísca,  $T_f$  é a temperatura após a faísca,  $K$  é a razão entre  $c_p$  e  $c_V$ ,  $\dot{W}'''$  é a taxa da reação e  $\Delta H$  é o calor de combustão.

## 4.8 Atuadores de Plasma

O uso de atuadores de plasma no condicionamento de escoamentos turbulentos tem sido foco de diversas pesquisas nas últimas décadas. Dentre outros, pode-se citar os trabalhos de Greenblatt [16] e Modi [34] que estudaram o comportamento do escoamento próximo à parede, resultante da utilização de plasma nesta região. Riley [42] estudou o comportamento das camadas sobrepostas do fluido submetido à atuadores de plasma e Grundmann [17] [18] analisou o comportamento do plasma agindo como força de corpo. Alguns resultados numéricos foram obtidos por Joslin [20] que demonstram a capacidade deste método de reduzir a amplitude das ondas de instabilidade de um escoamento.

Este método de estabilização consiste, basicamente, na atuação sobre a camada limite do escoamento, evitando ou postergando ao máximo a passagem do regime laminar para o turbulento. Com o escoamento sendo mantido laminar, a chama pode ser estabilizada na própria camada de mistura. Existem dois métodos que podem ser implementados na utilização de atuadores de plasma: o primeiro utiliza atuadores operados em modo contínuo, modificando o perfil médio da velocidade, estabilizando a camada limite laminar e amortecendo as flutuações localmente. O segundo método usa atuadores em modo pulsado para cancelar diretamente as ondas de Tollmien-Schlichting que são responsáveis por criar as instabilidades no escoamento.

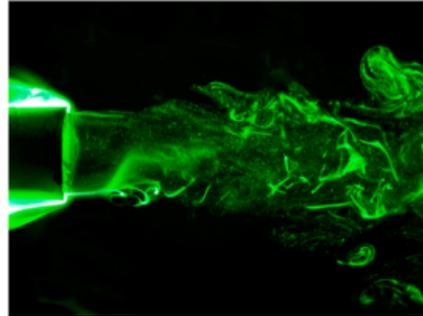
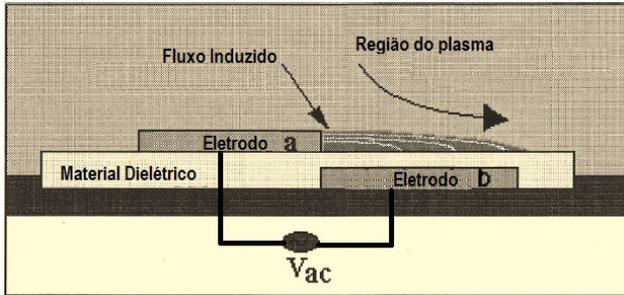


Figura 4.9: *Esquema de um atuador de plasma.* Figura 4.10: *Atuadores de plasma no bordo do injetor.*

Os atuadores de plasma são, na verdade, dois eletrodos separados por um material dielétrico. Um dos eletrodos é revestido com uma película de isolamento, enquanto o outro fica exposto ao escoamento. Uma tensão da ordem de  $10kV$ , com uma frequência da ordem de  $6kHz$ , é aplicada nos eletrodos fazendo com que haja a quebra das moléculas do ar, ou de outro oxidante qualquer, criando uma região fracamente ionizada sobre o eletrodo que está isolado. Um esquema desta configuração é mostrado na figura 4.9.

As cargas então são aceleradas e colidem com as moléculas neutras do ar. O ar parcialmente ionizado, ou seja o plasma, na presença de um campo elétrico gerado pelos eletrodos, induz um vetor força de campo que atua no fluxo e afeta as componentes estacionárias e transientes da velocidade. Num fluido com velocidade nula, esta força cria um jato próximo à parede que pode chegar a grandes velocidades. Variando-se a voltagem, é possível modificar a amplitude da força de corpo induzida.

## 4.9 Resumo Geral das Técnicas de Estabilização

Cada técnica de estabilização citada atua de maneira distinta sobre a chama. As técnicas de estabilização na camada de mistura e por chamas triplas são apenas uma consequência do controle da velocidade dos fluxos dos reagentes

de modo que a perda de energia não exceda a geração de calor. Assim, a chama estabiliza-se sem influência externa.

As técnicas de auto-ignição e de modificação da câmara de combustão, utilizam a ideia de pré-aquecimento para fornecer energia para que combustível e oxidante continuem reagindo. Na auto-ignição o aquecimento ocorre antes do ingresso na câmara de combustão. Porém, a modificação da câmara de combustão visa criar zonas de recirculação de gases quentes, que por sua vez, aquecem os gases reagentes por condução ou radiação, após eles já terem ingressado na câmara.

A utilização da técnica de rotação tenta aproximar a câmara de combustão de um reator químico perfeitamente misturado, sobretudo quando há um alto nível de vorticidade. Neste reator, os reagentes estão perfeitamente misturados a nível molecular e a reação ocorre simultaneamente em todos os pontos do reator. Ou seja, esta técnica tenta garantir uma boa mistura e a energia é obtida da própria reação.

O uso de *Pilots* ou faíscas elétricas tem como objetivo suprir a perda de calor que ocorre de maneira mais efetiva em chamas turbulentas. Neste tipo de escoamento, os vórtices gerados podem dissipar a energia gerada pela reação química muito rapidamente, e o déficit de energia causa então a extinção da chama. Estas duas técnicas repõem parte desta energia e, em alguns casos, modificam um pouco o escoamento tornando-o menos turbulento.

A estabilização por jatos de plasma age diretamente sobre o escoamento. Através do cancelamento de ondas de instabilidade e da geração de fluxo em regiões onde ele normalmente não ocorreria, esta técnica faz com que um jato que seria pouco turbulento torne-se laminar e um jato altamente turbulento torne-se menos turbulento.

Todas estas técnicas são muito eficazes quanto utilizadas da maneira e para as finalidades corretas. Os critérios de escolha devem levar em consideração

a potência esperada para o queimador, os seus regimes de trabalho, os custos de implementação da técnica em relação a eficiência esperada, além das características dos reagentes e dos produtos que serão utilizados.

## 5 IMPLEMENTAÇÃO NUMÉRICA

Este capítulo é dedicado à descrição das técnicas numéricas utilizadas para a aproximação das equações governantes do problema de combustão. Estas técnicas tem por objetivo propiciar uma representação discreta das equações que, na verdade, são contínuas, minimizando o acúmulo de erros, inerentes ao processo de utilização do computador.

Como não é o objetivo deste trabalho fazer uma análise numérica detalhada sobre as técnicas numéricas de resolução do problema, serão escolhidas aquelas técnicas citadas na literatura como sendo as mais adequadas para este tipo de situação. Deste modo, este capítulo irá se deter à explicar o motivo da escolha de cada uma, mas sem entrar no mérito de outras técnicas possíveis.

As equações que foram implementadas numericamente neste trabalho são as equações (2.45), (2.53), (2.54), deduzidas anteriormente, além de uma quarta equação para a fração de mistura e uma quinta equação referente à pressão que será deduzida neste capítulo. Neste momento, será detalhado o procedimento de solução deste problema e justificado o uso de cada uma das equações.

Na seção 2.1, foram apresentadas 6 variáveis como sendo capazes de descrever completamente o problema, a saber: a massa específica ( $\rho$ ), a velocidade nas três direções ( $u, v, w$ ), a temperatura ( $T$ ) e a fração de massa das espécies ( $Y_k$ ). Na verdade, serão 6 variáveis se  $k = 1$ ; se  $k \in \{1, \dots, N\}$ , então serão  $N + 5$  variáveis.

Além disso, foram apresentadas as deduções de 4 equações de conservação, a saber: a conservação da massa, a conservação da quantidade de movimento, a conservação da energia e a conservação das espécies químicas. Por outro lado, durante o texto surge uma equação para a fração de mistura e desaparece a equação de conservação da massa. A explicação para esta aparente discrepância é a

seguinte: Supondo que o número de espécies químicas seja igual a um, isto é,  $k = 1$  na equação de conservação das espécies, obtém-se um total de 6 variáveis livres, como já foi dito. Portanto, para que este sistema de equações possa ser resolvido, é necessária a utilização de pelo menos 6 equações, caso contrário, alguma variável ficará indeterminada.

Para manter a coerência com o problema físico, é necessário que as equações de conservação sejam todas satisfeitas. Entretanto, note que há um desacoplamento da equação de conservação da massa,  $\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i}{\partial x_i} = 0$ , com relação as demais equações. Este desacoplamento torna mais difícil que as equações de conservação da quantidade de movimento e a conservação da massa sejam satisfeitas simultaneamente.

Para contornar este problema, partindo da conservação da quantidade de movimento, obtém-se uma equação para a pressão que acopla a conservação da massa com a quantidade de movimento. Por este motivo, conforme a seção 2.3, os termos referentes à pressão são desconsiderados em todas as equações de conservação, exceto na equação para a quantidade de movimento. Assim, obtém-se o seguinte conjunto de equações:

- A equação de conservação da quantidade de movimento, que na verdade são três equações, que aqui está escrita na forma indicial,

$$\rho \frac{\partial u_i}{\partial t} + \rho u_i \frac{\partial u_j}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j}. \quad (5.1)$$

- A equação para conservação das espécies químicas,

$$\rho \frac{\partial Y_k}{\partial t} + \rho v_j \frac{\partial Y_k}{\partial x_j} = \rho D_k \frac{\partial^2 Y_k}{\partial x_j \partial x_j} + \dot{w}_k, \quad (5.2)$$

onde  $\dot{w}_k$  é a taxa da  $k$  – ésima reação química.

- A equação para conservação da energia, utilizando como variável de energia a temperatura,

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} + \rho c_p v_j \frac{\partial T}{\partial x_j} = \lambda \frac{\partial^2 T}{\partial x_j \partial x_j} + \dot{w}'_T, \quad (5.3)$$

onde  $\dot{w}'_T$  é a taxa de geração de calor devido à reação química.

- E a relação de estado,  $p = \rho \frac{RT}{W}$ , que é utilizada para determinar a massa específica.

Chega-se, deste modo, a um total de 6 equações. A equação para a fração de mistura é, neste caso, redundante, uma vez que é a sétima equação para um total de 6 variáveis. Para cada espécie química a mais a ser considerada, é adicionada mais uma equação de conservação para aquela espécie. Portanto, o sistema fica completamente determinado.

## 5.1 Equação para a Pressão

A obtenção de uma equação para a pressão que faça o acoplamento entre conservação da massa e da quantidade de movimento é feita através dos três passos descritos a seguir. A variável  $u_i$  representa a velocidade nas direções  $x$ ,  $y$  e  $z$  para  $i = 1, 2, 3$ , respectivamente. De maneira análoga,  $x_i$  representa as direções  $x$ ,  $y$  e  $z$  para  $i = 1, 2, 3$ .

- Dada a equação da quantidade de movimento na forma indicial (5.1), aplica-se o operador divergente ( $\nabla \cdot$ )

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left[ \frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i u_j}{\partial x_j} \right] = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[ -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \nu \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j^2} \right]. \quad (5.4)$$

- No caso permanente, a equação de conservação de massa torna-se  $\frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0$ , assim

$$\frac{\partial}{\partial t} \underbrace{\left( \frac{\partial \rho u_i}{\partial x_i} \right)}_{=0, \text{ C.M.}} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \frac{\partial(\rho u_i u_j)}{\partial x_i} \right) = - \frac{\partial^2 p}{\partial x_i^2} + \nu \frac{\partial^2}{\partial x_j^2} \underbrace{\left( \frac{\partial u_i}{\partial x_i} \right)}_{=0, \text{ C.M.}}, \quad (5.5)$$

onde *C.M.* refere-se à conservação da massa.

- Simplificando a equação (5.5) chega-se a

$$\underbrace{\frac{\partial^2 p}{\partial x_i^2}}_{\nabla^2 p} = - \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_j} \left( \frac{\partial(\rho u_i u_j)}{\partial x_i} \right)}_{f(u_i)} \quad (5.6)$$

Esta equação de Poisson deve ser resolvida e o seu resultado é utilizado para calcular o termo  $\frac{\partial p}{\partial x_i}$  da equação (5.1) já com o acoplamento.

## 5.2 Adimensionalização das Equações Governantes

Na mecânica dos fluidos, vários dos resultados importantes podem ser obtidos por meio de argumentos dimensionais [19]. Por este motivo, é comum que seja feita a adimensionalização das equações governantes do problema. Este procedimento permite que o problema seja analisado de maneira mais genérica, desconectando os resultados obtidos de um problema específico e relacionando-o com problemas semelhantes que possuam as mesmas características de geometria e propriedades do fluido.

Durante o procedimento de adimensionalização, surgem alguns parâmetros adimensionais que servem para caracterizar algumas propriedades do sistema. Os principais adimensionais que surgem em problemas de combustão foram descritos na seção 2.3.1; aqui, será possível entender como estes números aparecem durante a manipulação das equações.

Além da possibilidade de expandir os resultados obtidos para situações mais genéricas, do ponto de vista numérico, a adimensionalização ajuda na convergência de alguns métodos, pois gera matrizes melhor condicionadas. Em geral, os problemas físicos possuem diversas escalas espaciais e temporais e muitas vezes elas possuem ordens de magnitude bastante distintas. Através da adimensionalização reduz-se esta disparidade.

A adimensionalização é, sobretudo, um procedimento de transformação de coordenadas. São definidas algumas variáveis consideradas relevantes ao problema e as variáveis originais são substituídas por outras mais convenientes. Como o procedimento é simples, e similar para todas as equações, este procedimento só será feito de maneira detalhada para a equação da quantidade de movimento. Para as demais equações o processo é análogo.

Dada a equação de conservação da quantidade de movimento na direção  $x$ ,

$$\frac{\partial \rho u}{\partial t} + u \frac{\partial \rho u}{\partial x} + v \frac{\partial \rho u}{\partial y} + w \frac{\partial \rho u}{\partial z} = -\frac{\partial p}{\partial x} + \mu \left( \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right), \quad (5.7)$$

considere as seguintes variáveis adimensionais, representadas pelo sobrescrito (+).

$$u^+ = \frac{u}{u_0}, \quad v^+ = \frac{v}{u_0}, \quad w^+ = \frac{w}{u_0}, \quad x^+ = \frac{x}{L}, \quad y^+ = \frac{y}{L}, \quad z^+ = \frac{z}{L}, \quad (5.8)$$

$$p^+ = \frac{p}{\rho_0 u_0^2}, \quad t^+ = \frac{t}{t_0} = \frac{t u_0}{L}, \quad \rho^+ = \frac{\rho}{\rho_0} \quad (5.9)$$

Os valores com um subscrito (0) representam um valor característico do escoamento. Por exemplo,  $u_0$  pode ser tomado como a velocidade do jato,  $L$  é o comprimento do duto e  $\rho_0$  pode ser tomado com a massa específica inicial da mistura. Substituindo estes valores na equação (5.7) tem-se,

$$\frac{\partial \rho^+ \rho_0 u^+ u_0}{\partial t^+ t_0} + u^+ u_0 \frac{\partial \rho^+ \rho_0 u^+ u_0}{\partial x^+ L} + v^+ u_0 \frac{\partial \rho^+ \rho_0 u^+ u_0}{\partial y^+ L} + w^+ u_0 \frac{\partial \rho^+ \rho_0 u^+ u_0}{\partial z^+ L} =$$

$$- \frac{\partial p^+ \rho_0 u_0^2}{\partial x^+ L} + \mu \left( \frac{\partial^2 u^+ u_0}{\partial (x^+ L)^2} + \frac{\partial^2 u^+ u_0}{\partial (y^+ L)^2} + \frac{\partial^2 u^+ u_0}{\partial (z^+ L)^2} \right). \quad (5.10)$$

Simplificando a equação (5.10) chega-se a

$$\begin{aligned} \frac{u_0^2 \rho_0}{L} \frac{\partial u^+}{\partial t^+} + \frac{u_0^2 \rho_0}{L} \left[ u^+ \frac{\partial u^+}{\partial x^+} + v^+ \frac{\partial u^+}{\partial y^+} + w^+ \frac{\partial u^+}{\partial z^+} \right] &= -\frac{u_0^2 \rho_0}{L} \frac{\partial p^+}{\partial x^+} \\ &+ \frac{\mu u_0}{L^2} \left( \frac{\partial^2 u^+}{\partial (x^+)^2} + \frac{\partial^2 u^+}{\partial (y^+)^2} + \frac{\partial^2 u^+}{\partial (z^+)^2} \right). \end{aligned} \quad (5.11)$$

Multiplicando-se a equação (5.11) por  $\frac{L}{u_0^2 \rho_0}$  obtém-se a seguinte expressão,

$$\begin{aligned} \frac{\partial u^+}{\partial t^+} + \left[ u^+ \frac{\partial u^+}{\partial x^+} + v^+ \frac{\partial u^+}{\partial y^+} + w^+ \frac{\partial u^+}{\partial z^+} \right] &= -\frac{\partial p^+}{\partial x^+} \\ &+ \underbrace{\frac{\mu}{u_0 \rho_0 L}}_{1/Re} \left( \frac{\partial^2 u^+}{\partial (x^+)^2} + \frac{\partial^2 u^+}{\partial (y^+)^2} + \frac{\partial^2 u^+}{\partial (z^+)^2} \right). \end{aligned} \quad (5.12)$$

Para facilitar a digitação é comum dispensar o uso do sobrescrito (+). Assim, usa-se a convenção que, se um número adimensional está presente na equação, então ela está adimensionalizada. Neste caso, aparece o número de Reynolds e a equação (5.12) torna-se:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \left[ u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} + w \frac{\partial u}{\partial z} \right] = -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{1}{Re} \left( \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right). \quad (5.13)$$

### 5.3 Simulação de Grandes Escalas - LES

A turbulência é um processo espacial complexo que se caracteriza por uma distribuição contínua de escalas de flutuação [31]. As maiores escalas de turbulência são caracterizadas pelas forças de inércia. Assim, nas grandes escalas de turbulência os efeitos viscosos desprezíveis e são normalmente desconsiderados [13].

Apesar das equações de Navier-Stokes serem capazes de descrever qualquer tipo de escoamento, seja ele laminar ou turbulento, para escoamentos turbulentos alguns fenômenos importantes ocorrem em escalas de comprimento e tempo muito menores do que as malhas computacionais que podem ser utilizadas. Na tentativa de contornar este problema, desenvolveu-se a técnica **LES**, que busca simular

diretamente os efeitos nas chamadas grandes escalas e utiliza modelos para descrever o comportamento das pequenas escalas [53].

A distinção entre grandes e pequenas escalas depende de cada aplicação. Entretanto, é comum que seja feita uma avaliação do hardware e do software disponíveis para determinar se certa escala pode ser, ou não, calculada. A computação, em geral, utiliza um esquema de discretização espacial que é baseada na malha computacional que descreve o domínio  $\Omega$ . Para cada malha com espaçamentos  $dx, dy$  e  $dz$ , surge uma restrição com relação ao tamanho dos vórtices que podem ser calculados. Estruturas menores que o espaçamento da malha não podem ser representadas pela discretização e a estas dá-se o nome de pequenas escalas [53]. O espaçamento da malha a ser utilizado depende diretamente da memória disponível e do tempo de processamento aceitável para a simulação do escoamento.

Em **LES** as grandes estruturas do fluxo são sempre definidas por valores médios de velocidade, pressão, etc [31]. É usual utilizar uma média espacial destas quantidades. Esta média espacial é chamada de média de Reynolds e dada por:

$$\bar{f} = \frac{1}{\tau} \int_{\tau} f(t) dt, \quad (5.14)$$

para qualquer variável  $f$ , onde  $\tau$  é um intervalo de tempo sobre o qual está sendo tomada a média. Para fluxos onde há grande variação da massa específica, como no caso da combustão, utiliza-se com frequência uma média em relação à massa específica; esta média é chamada de média Favre e dada por

$$\tilde{f} = \frac{\int_{\tau} \rho(t) f(t) dt}{\int_{\tau} \rho(t) dt} = \frac{\overline{\rho f}}{\bar{\rho}}. \quad (5.15)$$

Normalmente, estas médias são definidas por uma convolução daquelas quantidades com uma função filtro apropriada, com o tamanho do filtro sendo  $\delta > 0$  [53]. Neste trabalho, o filtro ficará implicitamente determinado pelo espaçamento da malha e uma função filtro específica não será utilizada. Para filtrar as equações

aqui utilizadas, foi feito o uso de ambas as médias Favre e Reynolds, considerando as seguintes propriedades:

$$f = \bar{f} + f', \quad (5.16)$$

$$f = \tilde{f} + f'', \quad (5.17)$$

$$\overline{\rho f} = \bar{\rho} \tilde{f}, \quad (5.18)$$

$$\overline{\rho f f} = \bar{\rho} \widetilde{f f}. \quad (5.19)$$

Aplicando a média Reynolds à equação de conservação da quantidade de movimento obtém-se:

$$\frac{\partial \overline{\rho u_i}}{\partial t} + \frac{\partial (\overline{\rho u_i u_j})}{\partial x_j} = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial \overline{\sigma_{ij}}}{\partial x_j}, \quad (5.20)$$

e usando as propriedades (5.16), (5.17), (5.18) e (5.19), tem-se

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{\rho} \widetilde{u_i u_j})}{\partial x_j} - \frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j)}{\partial x_j} + \frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j)}{\partial x_j} = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial \overline{\sigma_{ij}}}{\partial x_j}, \quad (5.21)$$

que simplificando, resulta

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{\rho} \widetilde{u_i u_j})}{\partial x_j} = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial \overline{\sigma_{ij}}}{\partial x_j} - \frac{\partial}{\partial x_j} [\bar{\rho} (\widetilde{u_i u_j} - \tilde{u}_i \tilde{u}_j)]. \quad (5.22)$$

Este tipo de abordagem exige um fechamento, isto é, o termo  $\bar{\rho} (\widetilde{u_i u_j} - \tilde{u}_i \tilde{u}_j)$  precisa ser modelado pois não pode ser calculado diretamente [39]. O termo  $\bar{\rho} (\widetilde{u_i u_j} - \tilde{u}_i \tilde{u}_j)$  é chamado de tensor de Reynolds ( $\sigma_{ij}^{sgs}$ ) e, através da hipótese de Boussinesq [5], pode ser modelado por

$$\sigma_{ij}^{sgs} = \bar{\rho} (\widetilde{u_i u_j} - \tilde{u}_i \tilde{u}_j) = 2\nu_t \left( \tilde{S}_{ij} - \frac{1}{3} \tilde{S}_{kk} \delta_{ij} \right), \quad (5.23)$$

onde

$$\tilde{S}_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right). \quad (5.24)$$

A variável  $\nu_t$  é chamada de viscosidade turbulenta. Existem diversos modelos que podem ser utilizados para modelar esta variável sendo que um dos mais simples e populares é o modelo de Smagorinsky [31], e é dado por

$$\nu_t = (C_s \delta)^2 |\tilde{S}_{ij}|, \quad (5.25)$$

onde  $|\tilde{S}_{ij}| = (2\tilde{S}_{ij}\tilde{S}_{ij})^{1/2}$ ,  $\delta$  é o tamanho do filtro, que no caso de uma malha uniforme é dado por  $\delta = dx \cdot dy \cdot dz$ , e  $C_s$  é a constante de Smagorinsky. Neste trabalho é utilizado o valor de  $C_s = 0,2$ . Este procedimento é realizado para as demais equações através de procedimentos análogos.

A hipótese de Boussinesq diz que o tensor de Reynolds pode ser modelado, no caso unidimensional, por [43]:

$$\frac{\tau^T}{\rho} = -\overline{uv} = \nu_t \frac{\partial \bar{u}_0}{\partial y}, \quad (5.26)$$

de tal modo que a tensão total passa a ser dada pela soma das tensões devido à difusão molecular e a turbulenta, isto é,

$$\tau = (\tau^L + \tau^T) = \rho(\nu + \nu_t) \frac{\partial \bar{u}_0}{\partial y}. \quad (5.27)$$

Frequentemente, a soma dos coeficientes de difusão é denominado de viscosidade efetiva,  $\nu_{eff} = \nu + \nu_t$ ; assim:

$$\tau = \rho \nu_{eff} \frac{\partial \bar{u}_0}{\partial y}. \quad (5.28)$$

Além disso, como normalmente  $\nu_t \gg \nu$  utiliza-se  $\nu_t = \nu_{eff}$ , e ainda, sabendo que

$$D_t = \frac{\nu_t}{Sc_t}, \quad \bar{\rho} D_t = \rho \frac{\nu_t}{Pr_t}, \quad (5.29)$$

onde  $D_t$  é a difusividade turbulenta[40],  $Sc_t$  é o número de Schimidt turbulento e  $Pr_t$  o número de Prandtl turbulento, que aparecem após a mediação das equações para as espécies químicas e para a temperatura, respectivamente.

Assim, o conjunto final de equações governantes é o seguinte:

$$\frac{(\bar{\rho}\tilde{u}_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{u}_i\tilde{u}_j)}{\partial x_j} = -\frac{\partial\bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial\sigma_{ij}^{sgs}}{\partial x_j} \quad (5.30)$$

$$\frac{(\bar{\rho}\tilde{Z})}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{u}_j\tilde{Z})}{\partial x_j} = \frac{\partial^2(\bar{\rho}D_t\tilde{Z})}{\partial x_j\partial x_j} \quad (5.31)$$

$$\frac{(\bar{\rho}\tilde{Y}_k)}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{u}_j\tilde{Y}_k)}{\partial x_j} = \frac{\partial^2(\bar{\rho}D_t\tilde{Y}_k)}{\partial x_j\partial x_j} + \bar{w}_k \quad (5.32)$$

$$\frac{(\bar{\rho}\tilde{T})}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{u}_j\tilde{T})}{\partial x_j} = \frac{\partial^2(\bar{\rho}D_t\tilde{T})}{\partial x_j\partial x_j} + \frac{1}{c_p}\bar{w}'_T. \quad (5.33)$$

## 5.4 Discretização das Equações Governantes

A aproximação das equações contínuas, que descrevem o problema de maneira discreta, é feita, neste trabalho, através do método de diferenças finitas. Este método consiste em aproximar as derivadas parciais através de diferenças finitas, obtidas através da expansão em série de Taylor das variáveis.

O sistema de equações assim obtido envolve apenas equações algébricas que, por sua vez, são resolvidas com relativa facilidade no computador. As aproximações utilizadas para cada uma das derivadas são as seguintes:

- As derivadas temporais utilizam um aproximação para frente, da forma

$$\frac{\partial f}{\partial t} \approx \frac{f^{n+1} - f^n}{\Delta t}. \quad (5.34)$$

Embora esta aproximação resulte em erro de truncamento somente de primeira ordem, e portanto valores do passo de tempo devam ser bastante pequenos para compensar, seus valores típicos são de  $10^{-5}$  a  $10^{-6}$ , ainda dentro da escala temporal do problema em estudo.

- As derivadas espaciais de primeira ordem em  $y$  e  $z$  são discretizadas por diferenças centrais, ou seja,

$$\left(\frac{\partial f}{\partial y}\right)_{i,j,k} \approx \frac{f_{i,j+1,k} - f_{i,j-1,k}}{2\Delta y}, \quad (5.35)$$

$$\left(\frac{\partial f}{\partial z}\right)_{i,j,k} \approx \frac{f_{i,j,k+1} - f_{i,j,k-1}}{2\Delta z}, \quad (5.36)$$

- Para as derivadas de primeira ordem em  $x$ , as aproximações de primeira ordem, como aquela feita para a derivada temporal, são incondicionalmente estáveis, mas elas introduzem grande quantidade de viscosidade artificial que suaviza a solução numérica [11]. Os esquemas de alta ordem melhoram a exatidão mas, geralmente, geram oscilações espúrias em regiões que têm fortes gradientes ou descontinuidades.

Para eliminar as oscilações espúrias são utilizados esquemas do tipo TVD( *Total Variation Diminishing*), que garantem que a variação total do erro não cresça na direção progressiva do tempo. Para o esquema TVD, considere as aproximações de primeira e segunda ordens, respectivamente, para a derivada  $(\frac{\partial f}{\partial x})_{i,j,k}$

$$f_{i,j,k}^l \approx \frac{f_{i,j,k} - f_{i-1,j,k}}{\Delta x}, \quad (5.37)$$

$$f_{i,j,k}^h \approx \frac{f_{i+1,j,k} - f_{i-1,j,k}}{2\Delta x}. \quad (5.38)$$

Assim, uma aproximação híbrida para a derivada de primeira ordem em  $x$  é dada por

$$\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_{i,j,k} \approx f_{i,j,k}^l - \Phi(r_i)(f_{i,j,k}^l - f_{i,j,k}^h), \quad (5.39)$$

onde  $\Phi(r_i)$  é chamado de limitador de fluxo e pode ser dado por

$$\Phi(r_i) = \frac{r_i + |r_i|}{1 + r_i}, \quad (5.40)$$

e  $r_i$ , por sua vez, é representado por[11]

$$r_i = \frac{f_{i,j,k} - f_{i-1,j,k}}{f_{i+1,j,k} - f_{i,j,k}}. \quad (5.41)$$

Outras formulações também são frequentes para os termos  $\Phi(r_i)$  e  $r_i$  [11].

- As derivadas de segunda ordem tem sua discretização por diferenças centrais, isto é,

$$\left(\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}\right)_{i,j,k} \approx \frac{f_{i+1,j,k} - 2f_{i,j,k} + f_{i-1,j,k}}{(\Delta x)^2} \quad (5.42)$$

$$\left(\frac{\partial^2 f}{\partial y^2}\right)_{i,j,k} \approx \frac{f_{i,j+1,k} - 2f_{i,j,k} + f_{i,j-1,k}}{(\Delta y)^2} \quad (5.43)$$

$$\left(\frac{\partial^2 f}{\partial z^2}\right)_{i,j,k} \approx \frac{f_{i,j,k+1} - 2f_{i,j,k} + f_{i,j,k-1}}{(\Delta z)^2} \quad (5.44)$$

O procedimento computacional de solução consiste em trocar as derivadas que aparecem nas equações governantes por suas aproximações correspondentes em diferenças finitas. Na próxima seção, são descritos alguns detalhes técnicos sobre este procedimento e o algoritmo de resolução do problema.

## Implementação Computacional

O código computacional que implementa as equações governantes deste problema, através das técnicas descritas anteriormente, foi escrito em linguagem Fortran 90 e segue o algoritmo mostrado na figura 5.1.

A malha é gerada antes do início do processo iterativo. Em cada simulação utiliza-se uma malha com 6,5 milhões de pontos, sendo 400 pontos na direção  $x$  e 128 pontos nas direções  $y$  e  $z$ . Esta malha é igualmente espaçada na simulação para a chama Sandia-D e é refinada junto a saída do injetor e próximo a linha central do jato na simulação para a chama Sandia-H. O refinamento da malha utilizada na simulação da chama Sandia-H é feito da seguinte forma:

- Define-se o tamanho do passo inicial que é da ordem de  $1 \times 10^{-4}$ ;

- Define-se o próximo passo como sendo de 2% a 5% maior que o passo anterior;
- O tamanho do passo aumenta até atingir um valor limite da ordem de  $5 \times 10^{-3}$ ;
- Após atingir o valor limite, o espaçamento é constante até o final do domínio.

O refinamento da malha ocorre a partir da saída do injetor em direção ao final da câmara de combustão na direção  $x$ , e a partir do centro da câmara em direção as paredes nas direções  $y$  e  $z$ .

A seguir, são inseridas as condições iniciais e de contorno de cada problema. Em ambas simulações utiliza-se as seguintes condições iniciais:

- Os componentes da velocidade nas direções  $y$  e  $z$  são nulos e o componente na direção  $x$  é igual a velocidade do fluxo de ar externo. Este fluxo é diferente para cada problema e seus valores são apresentados nas tabelas (6.2) e (6.3), do próximo capítulo;

- A pressão e a temperatura iniciais recebem o valor normalizado associado com o fluxo de ar externo. Estes valores também são mostrados nas tabelas (6.2) e (6.3);

- As frações de massa de todos os elementos químicos são iguais a zero em todo domínio, exceto a fração de massa de  $O_2$  que definida como sendo  $Y_{O_2} = 0,23$ .

Como condições de contorno, define-se todos os componentes da velocidade como sendo iguais a zero junto as paredes (Condições do tipo Dirichlet). Utiliza-se condições do tipo Neumann nas paredes para as demais variáveis. Na saída da câmara de combustão utiliza-se condições de contorno do tipo “Far Field” para

todas as variáveis. Condições do tipo Dirichlet também são utilizadas na entrada da câmara de combustão seguindo os dados das tabelas (6.2) e (6.3).

Então, inicia-se o processo iterativo através do cálculo das componentes da velocidade, as frações de massa, a fração de mistura e a temperatura. Todas as equações são implementadas de maneira explícita. Logo após, é realizado o cálculo da pressão utilizando-se os valores de velocidade calculados na mesma iteração. O cálculo da pressão é necessário para a correção das componentes da velocidade, de modo a satisfazer a equação da continuidade. O processo se repete até que seja atingido o critério de parada. Após o critério de parada ser atingido são gerados os arquivos de dados que serão utilizados para a análise dos resultados.

Utiliza-se como critério de parada o número de iterações, que está relacionado com o tempo equivalente de simulação, ou seja, o intervalo de tempo real que a simulação está descrevendo. Por exemplo, utilizando-se um minicluster composto por quatro microcomputadores com processador Pentium IV<sup>®</sup> 2GHz com 256 MBytes de memória, rodando um sistema operacional Linux, necessita-se de aproximadamente 6 horas de processamento para um tempo de simulação equivalente a 2,5 segundos.

Acredita-se que o tempo de processamento possa ser substancialmente reduzido com a utilização de técnicas de paralelização e a otimização do algoritmo. Há a possibilidade da utilização de redes neurais com o objetivo de diminuir o custo computacional deste código. Todas estas alternativas estão sendo estudadas para serem implementadas futuramente.

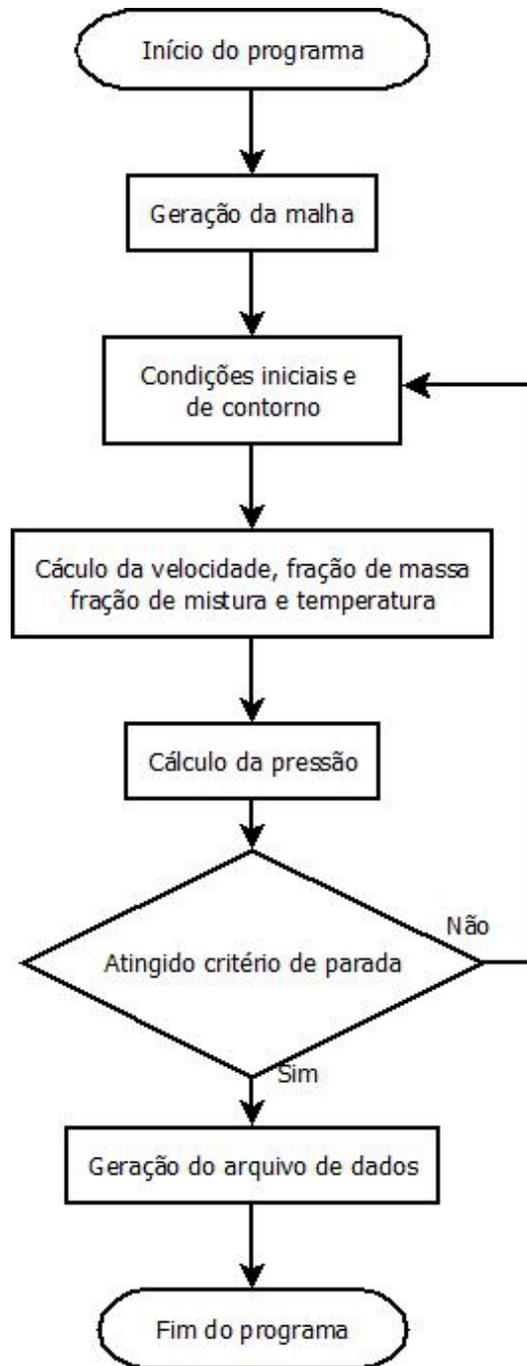


Figura 5.1: *Algoritmo de solução do problema de combustão.*

## 6 RESULTADOS NUMÉRICOS

Neste capítulo, são apresentados os resultados obtidos para as técnicas de estabilização consideradas mais relevantes do ponto de vista prático e teórico. As técnicas escolhidas para simulação são:

- a rotação dos reagentes;
- o uso de chamas *pilot*.

As demais técnicas não são aqui comparadas pois seus mecanismos de estabilização possuem certo nível de similaridade aos mecanismos que agem nas técnicas acima. Estes dois métodos de estabilização ainda possuem a vantagem de serem bastante utilizados industrial e experimentalmente, o que fornece uma quantidade razoável de dados para comparações.

Devido a especificidade de cada método, as condições iniciais, as condições de contorno, o espaçamento das malhas e outros parâmetros, serão descritos separadamente para cada uma das técnicas.

O perfil de turbulência do jato é comparado com aquele obtido pelo autor Gokarn [15] para a variável fração de mistura  $Z$ . O objetivo desta comparação é evidenciar a capacidade, do código computacional, de reproduzir o desenvolvimento dos vórtices e o comportamento do escoamento sem a influência da combustão.

Os dados referentes à combustão, como a fração de massa dos reagentes e produtos, a difusão da temperatura e da fração de mistura, serão comparados com os dados disponibilizados pelo complexo Sandia<sup>1</sup> para a chama conhecida como Sandia-D [3], no caso de estabilização por chamas *pilot*. Para o caso de estabilização por rotação, a comparação será feita através dos dados disponibilizados pelo labo-

---

<sup>1</sup>Disponível em: <<http://www.sandia.gov/TNF/DataArch/FlameD.html>>. Acesso em: 30 nov. 2011, 16:30:30.

ratório de Engenharia Espacial, Mecânica e Mecatrônica<sup>2</sup> da Universidade de Sydney [23] para a chama conhecida como Sandia-H, seguindo a configuração denominada SMA1.

## 6.1 Perfil de Vorticidade

Uma diferença relevante entre chamas laminares e turbulentas é o comprimento da chama. Chamas laminares são mais longas e o comprimento de chama pode atingir 200 vezes o diâmetro do injetor. Chamas turbulentas, por sua vez, são mais curtas, devido ao alto caráter dissipativo da turbulência, e seu comprimento normalmente não excede 120 vezes o diâmetro do injetor [21]. Isto está diretamente relacionado a geometria do combustor que utiliza fluxos paralelos de reagentes, chamada de *coflow*. Este mesmo comportamento é obtido em jatos confinados inertes como apresentado nos livros de Pai [35] ou Volker [53], ou outros.

Tabela 6.1: Parâmetros do escoamento considerado pelo autor Gokarn et al [15].

Parâmetro	Valor Numérico
Número de Reynolds	3000
Razão entre velocidade do jato e do escoamento	3
Proporção do duto	$10 \times 1$
Diâmetro do injetor	0,02
comprimento do injetor	0,1

Em situações reais o mesmo experimento realizado duas ou mais vezes, em condições aparentemente iguais, dificilmente apresenta resultados idênticos [31]. Isto ocorre devido a grande dependência das condições iniciais no desenvolvimento da turbulência [13]. Assim, faz-se uso de métodos estatísticos para a análise dos resultados obtidos, o que implica que todo o valor numérico ou perfil de escoamento deve ser entendido como um valor médio.

---

<sup>2</sup>Disponível em: <<http://sydney.edu.au/engineering/aeromech/thermofluids/swirl.htm>>. Acesso em: 05 dez. 2011, 08:40:00.

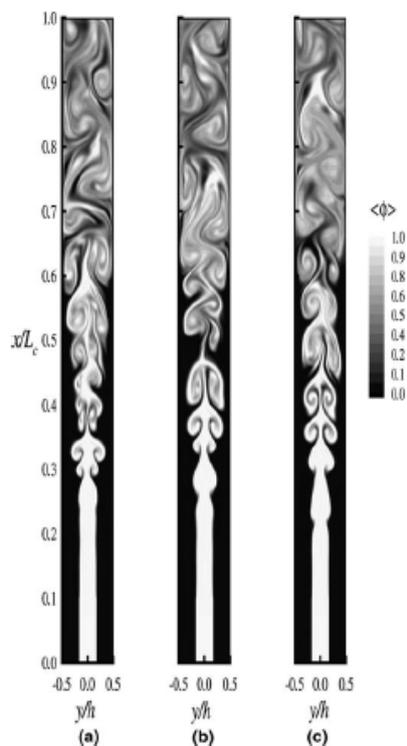


Figura 6.1: *Distribuição da fração de mistura para os instantes de tempo (a) 40s, (b) 41s, (c) 42,5s, conforme Gokarn et al.[15].*

Do ponto de vista numérico, espera-se que o mesmo código computacional apresente os mesmos resultados, independente do número de vezes que ele é utilizado. Isto se deve ao fato de que, em simulações computacionais, os dados iniciais e de contorno podem ser controlados rigorosamente. Entretanto, para códigos diferentes os resultados obtidos apresentam diferenças que, normalmente, são decorrentes dos modelos utilizados, das malhas, e da própria implementação computacional[12].

Posto isto, são apresentadas as figuras 6.1 obtidas pelo autor Gokarn et al. [15] para a simulação de um jato planar inerte no interior de um duto. As principais características do escoamento, propostas pelo autor Gokarn et al. [15], estão descritas na tabela (6.1).

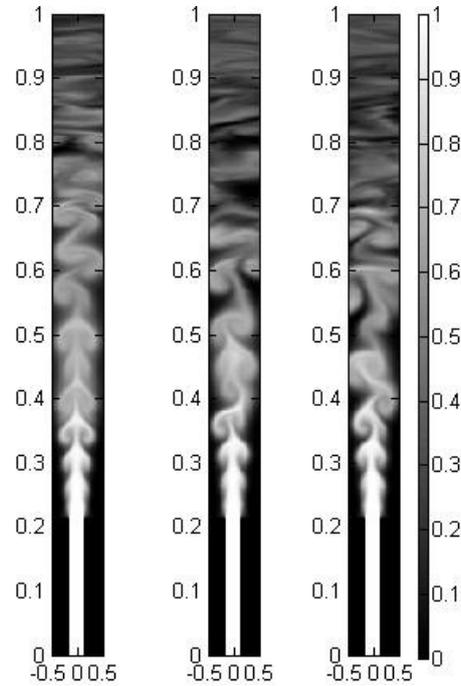


Figura 6.2: *Escoamento obtido neste trabalho para  $t = 40s$ ,  $t = 42,5s$  e  $t = 45s$ .*

Utilizando os mesmos parâmetros presentes na tabela (6.1), obteve-se os resultados da figura 6.2, apresentadas a seguir, para instantes de tempo variando de 40s a 45s. Todas estas figuras foram obtidas para uma malha de  $512 \times 128$  com refinamento próximo a saída do injetor.

Conforme esperado, a difusão da fração de mistura mostrada nas figuras 6.1, obtidas por Gokarn et al. [15], e aquela mostrada nas figuras 6.2, obtidas neste trabalho, não são idênticas. Um possível motivo desta discrepância decorre dos modelos utilizados neste trabalho e pelo autor Gokarn, que são distintos. Diferenças na implementação dos algoritmos utilizados ou na aplicação das condições iniciais e de contorno também podem provocar diferenças entre os dois resultados.

## 6.2 Comparação de Chamas com *Pilot*

Nesta seção, são apresentadas as comparações dos resultados numéricos obtidos com os dados experimentais disponibilizados pelos laboratórios Sandia [3] para a configuração denominada Sandia-D. A Sandia-D é uma chama difusiva turbulenta de metano ( $CH_4$ ) que utiliza a técnica de *pilots* para sua estabilização. Uma pré-mistura parcial é feita para facilitar os procedimentos experimentais de medição; esta pré-mistura impede a formação de fuligem mas não afeta o caráter difusivo da chama. Os parâmetros utilizados neste experimento estão indicados na tabela (6.2).

Tabela 6.2: Parâmetros experimentais para a chama Sandia-D.

Parâmetro	Valor Numérico
Número de Reynolds	22400
Diâmetro interno do anel de <i>pilots</i>	7,7mm
Diâmetro externo do anel de <i>pilots</i>	18,2mm
Diâmetro da parede externa do queimador	18,9mm
Diâmetro do interno do injetor	7,2mm
Dimensões do queimador	30cm × 30cm
Velocidade do <i>coflow</i>	0,9m/s
Temperatura do <i>coflow</i>	291K
Pressão do <i>coflow</i>	0,993atm
Composição do jato principal	25% $CH_4$ , 75% de ar por volume
Velocidade do jato principal	49,6m/s
Temperatura do jato principal	294K
Pressão do jato principal	0,993atm

Os dados da tabela (6.2) são utilizados para a definição das condições de contorno do código computacional, assim como os parâmetros de normalização. Por exemplo, conforme visto na seção 5.2, é necessária a definição de uma velocidade de referência para a normalização das equações governantes. Neste caso, a velocidade de referência foi definida como sendo  $u_0 = 49,6 \text{ m/s}$ , isto é, a velocidade do jato de combustível. Os demais parâmetros de normalização são os seguintes: comprimento de referência  $L = 3,0m$ , tempo de referência  $t_0 = L/u_0 = 3,0/49,6 \approx 0,06s$ , temperatura de referência  $T_0 = 291K$ . Os demais parâmetros utilizados foram definidos como sendo iguais aos do nitrogênio, devido a sua dominância em relação

às demais espécies. Portanto, a massa específica de referência é  $\rho_0 = 1,2506 \text{ kg/m}^3$ , o calor específico é  $c_p = 1040 \text{ J/(kg} \cdot \text{K)}$ .

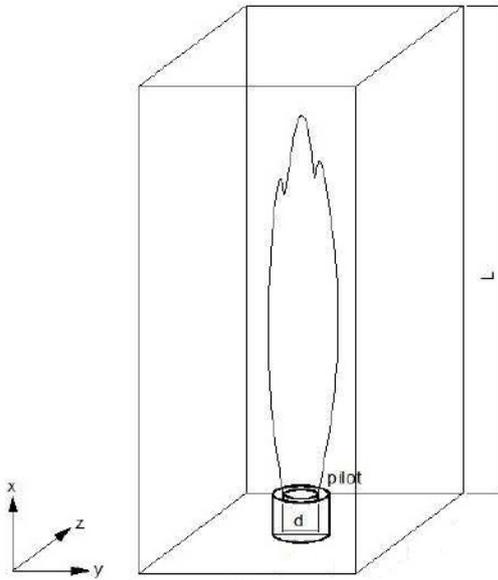


Figura 6.3: *Representação do queimador utilizado na simulação.*



Figura 6.4: *Fotografia da chama Sandia-D onde vê-se os pilots [3].*

A figura 6.3 mostra a representação esquemática do queimador utilizado na simulação numérica com o detalhe do sistema de coordenadas. A figura 6.4 apresenta uma fotografia da chama Sandia-D onde vê-se as chamas *pilot* junto a saída do injetor.

Os gráficos a seguir são referentes à fração de mistura, a temperatura e a fração de massa das principais espécies químicas reagentes. Os valores são analisados em diversas regiões da chama definidas da seguinte forma:  $x$  é a distância na direção axial medida a partir do bordo do injetor,  $r$  é a distância radial medida a partir do eixo central do jato e  $d$  é o diâmetro do injetor.

Assim, o gráfico 6.5 mostra a distribuição da fração de mistura na posição  $x/d = 15$ , isto é, a uma distância do injetor equivalente a 15 vezes o seu diâmetro. Neste gráfico, o eixo das abscissas (horizontal) representa a distância

radial em relação ao eixo central do jato ( $r/d$ ), ou seja,  $r/d = 3$  significa que a distância radial é equivalente a três diâmetros do injetor. A mesma representação é utilizada nos demais gráficos.

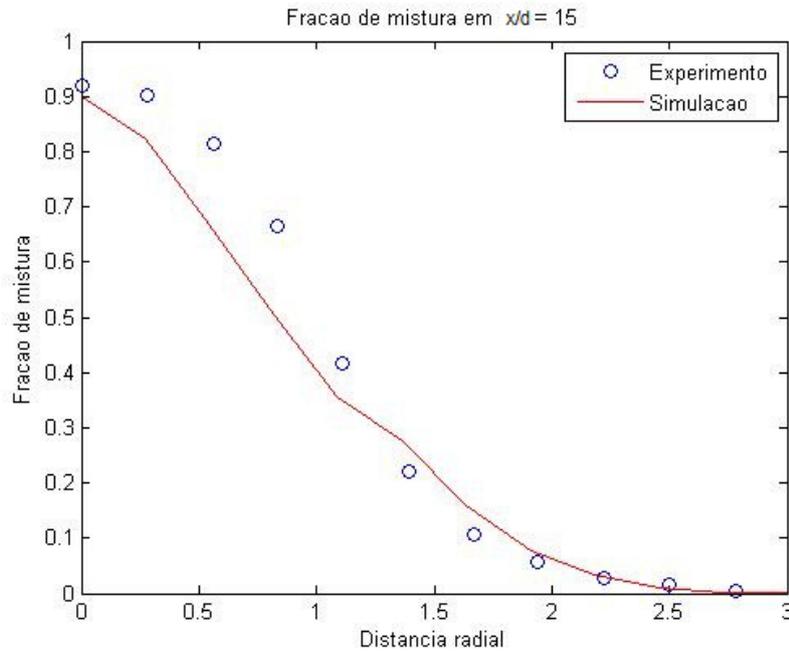


Figura 6.5: Comparação da fração de mistura em  $x/d = 15$ .

Todos os resultados apresentados nesta seção foram obtidos após um tempo de processamento equivalente a 2,5s, tempo considerado suficiente para o completo desenvolvimento do escoamento. Em relação ao sistema de coordenadas utilizado, considera-se um sistema de coordenadas cartesiano cuja origem corresponde ao canto inferior esquerdo da câmara de combustão. Deste modo, o domínio normalizado do problema é  $0 \leq x \leq 1$ ,  $0 \leq y \leq 0,1$  e  $0 \leq z \leq 0,1$ . Todos os resultados apresentados nesta seção são referentes ao plano  $z = 0,05$ , isto é, um dos planos que contém o eixo central do jato.

Devido a relevância da fração de mistura, que é utilizada para calcular as frações de massa das espécies e a temperatura, a análise começará por esta

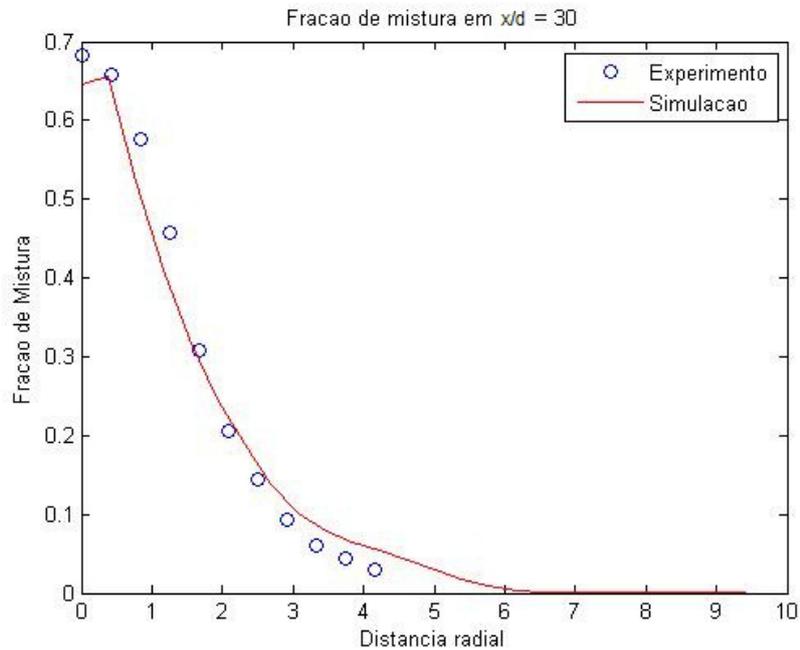


Figura 6.6: Comparação da fração de mistura em  $x/d = 30$ .

variável e seus valores serão comparados para todas as regiões da chama, conforme disponibilidade dos dados experimentais.

Logo, será mostrada a distribuição da fração de mistura em  $x/d = 15, 30, 45$  e  $60$ , além da sua distribuição axial. A distribuição dos demais parâmetros será analisada apenas em duas destas regiões, escolhidas arbitrariamente, para evitar que o trabalho torne-se muito extenso.

Em todas as figuras, a linha contínua representa os resultados obtidos pela simulação numérica enquanto que os círculos representam os dados experimentais. Certa discrepância entre estes dois resultados é admissível considerando que o erro experimental é da ordem de 10%. Cada círculo, na verdade, não representa uma única medida experimental mas uma média de diversas medidas realizadas na mesma região da chama.

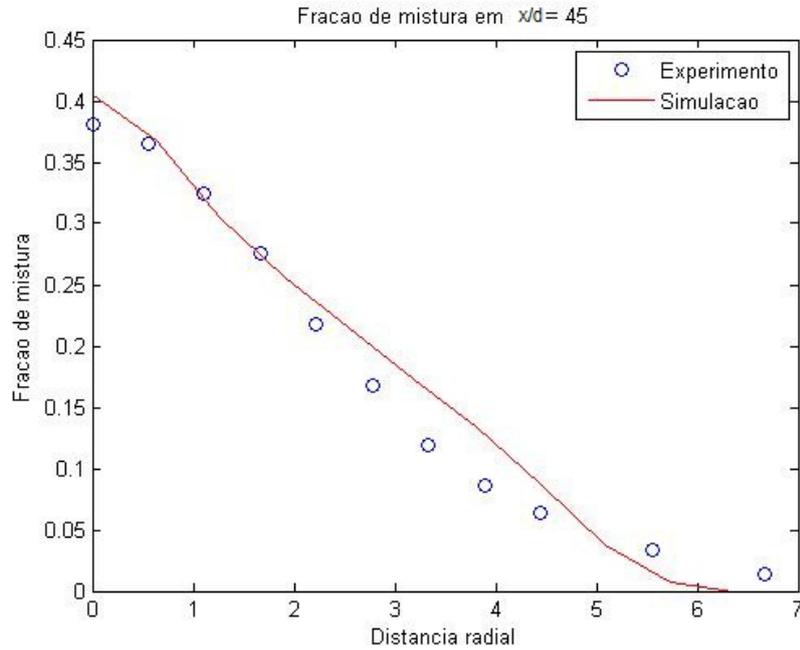


Figura 6.7: Comparação da fração de mistura em  $x/d = 45$ .

Na figura 6.5 ve-se o decaimento da fração de mistura de um valor próximo a 0,9, na região próxima ao eixo, até um valor aproximadamente nulo a uma distância  $r/d \approx 3$ . Isto significa que o combustível está sendo totalmente consumido à medida que a mistura estequiométrica é atingida.

Para as duas regiões mais próximas do injetor, isto é  $x/d = 15$  e  $x/d = 30$ , a distribuição da fração de mistura aproxima-se de uma curva gaussiana, que é característica de processos difusivos.

Devido as proporções iniciais dos reagentes no jato, 25% de  $CH_4$  e 75% de ar atmosférico, a fração de mistura estequiométrica deste sistema é  $Z_{st} \approx 0,34$ . Isto significa que a largura visível da chama limita-se à região  $Z \geq 0,34$ .

Pelas figuras 6.5, 6.6 e 6.7 pode-se estimar que esta região encontra-se em  $r/d \approx 1,5$ . Além disso, este valor para  $Z_{st}$  implica que a figura 6.8 corresponde a uma região externa à chama, pois em  $r/d = 0$  tem-se  $Z \approx 0,22 \leq Z_{st}$ .

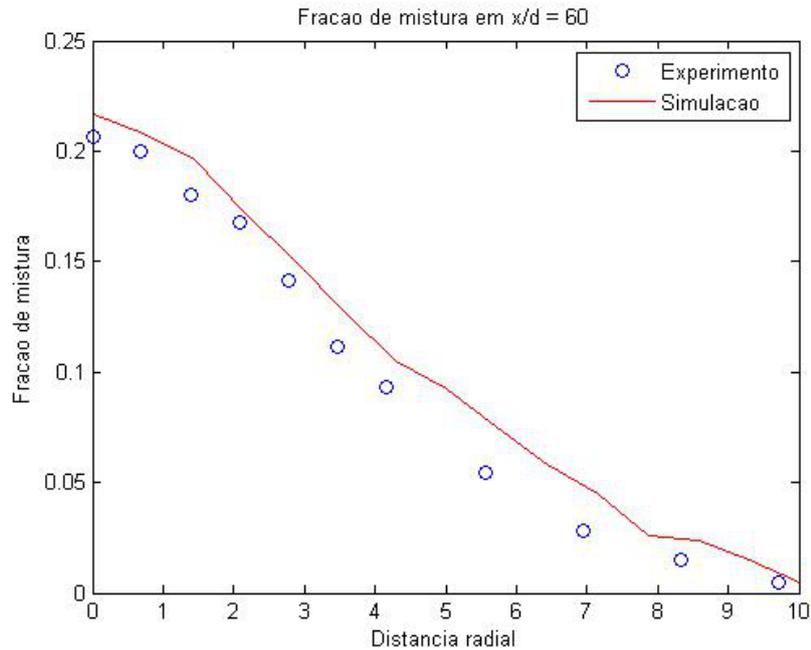


Figura 6.8: Comparação da fração de mistura em  $x/d = 60$ .

A figura 6.9 representa a distribuição da fração de mistura ao longo do eixo do jato. Verifica-se que a fração de mistura é igual a um na saída do injetor, e que o mesmo perfil difusivo, existente nas figuras anteriores, também ocorre ao longo da direção axial.

Sabendo-se que  $Z_{st} = 0,34$ , a partir da figura 6.9 determina-se o comprimento aproximado da chama que, neste caso, é de  $x/d \approx 50$ . Isto comprova que o gráfico para  $x/d = 60$  corresponde a uma região externa à parte visível da chama. Apesar de pequenas oscilações, os resultados numéricos seguem a tendência dos dados experimentais em todas as direções.

As figuras 6.10 e 6.11 apresentam a distribuição da fração de massa do vapor d'água formado no processo de combustão. Na região próxima ao injetor verifica-se que a quantidade de vapor é menor no interior da chama. Depois, há um

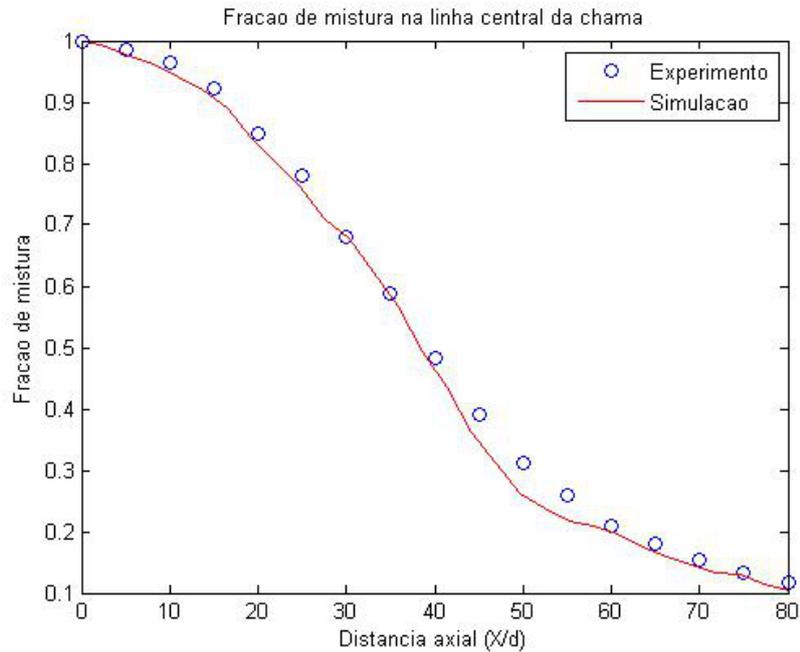


Figura 6.9: Comparação da fração de mistura na direção axial.

máximo na região próxima à superfície estequiométrica e, a seguir, o vapor d'água decai novamente até valor próximo de zero.

Conforme distancia-se do injetor, o vapor acumulado no interior da chama concentra-se na sua parte superior. A figura 6.11 demonstra este comportamento; a fração de massa de  $H_2O$  parte de um valor máximo, próximo a  $Y_{H_2O} \approx 0,11$ , e então decai devido a efeitos difusivos nas regiões distantes do eixo central.

Certa discrepância é observada na figura 6.10: a fração de massa é subestimada no interior da chama e decai mais rapidamente na parte externa. Este problema pode ser uma decorrência do modelo utilizado para a viscosidade turbulenta, que pode apresentar efeitos dissipativos superiores aos reais. Entretanto, apesar desta variação, os resultados seguem a tendência dos dados experimentais e permanecem dentro do limite de erro experimental.

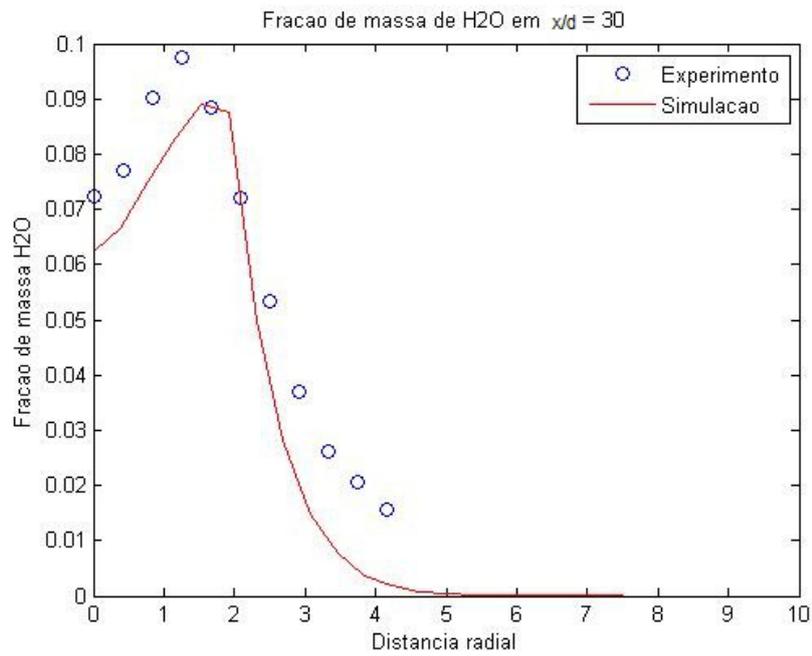


Figura 6.10: Comparação da fração de massa de H<sub>2</sub>O em  $x/d = 30$ .

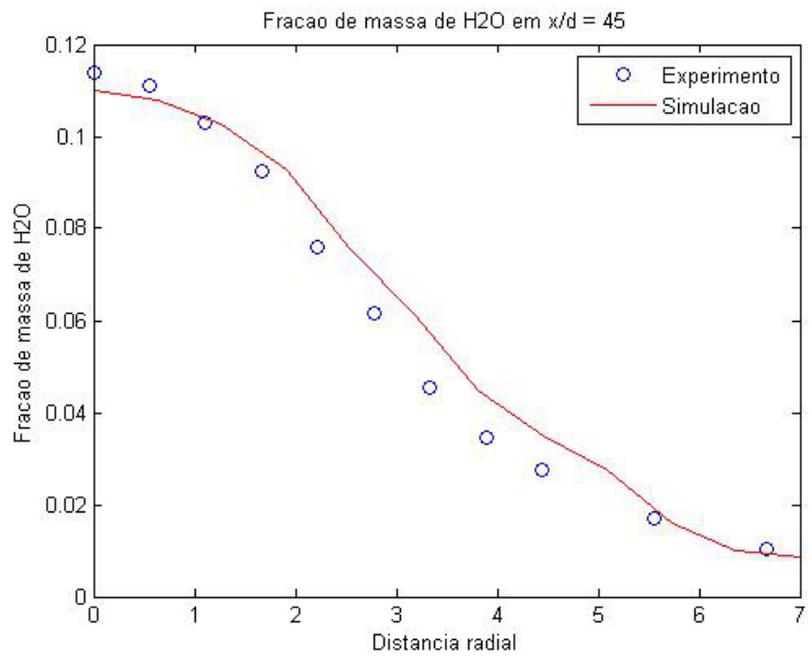


Figura 6.11: Comparação da fração de massa de H<sub>2</sub>O em  $x/d = 45$ .

As próximas figuras representam a distribuição do dióxido de carbono na região da chama. Como esta espécie também é um produto da reação de combustível, espera-se que sua distribuição seja semelhante àquela apresentada pelo vapor d'água.

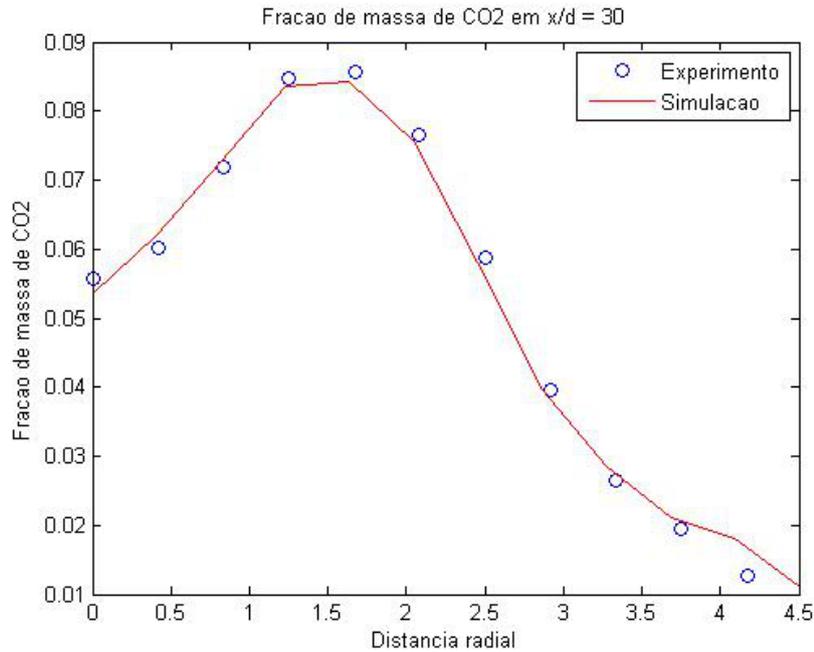


Figura 6.12: Comparação da fração de massa de  $CO_2$  em  $x/d = 30$ .

A figura 6.12 é bastante semelhante à figura 6.10, referente ao vapor d'água. A quantidade de  $CO_2$  no interior da chama e próximo ao injetor cresce até atingir um valor máximo na região da superfície estequiométrica. A partir daí, a concentração de  $CO_2$  diminui continuamente até chegar a um valor aproximadamente nulo à distância  $r/d \approx 4,5$ .

O dióxido de carbono gerado no interior da chama é transportado pelo jato e acumula-se na parte superior da chama. Este fenômeno está representado na figura 6.13 onde a fração de massa da espécie  $CO_2$  parte de um valor máximo, junto ao eixo do jato, e decai por efeitos de difusão, apresentando uma curva de

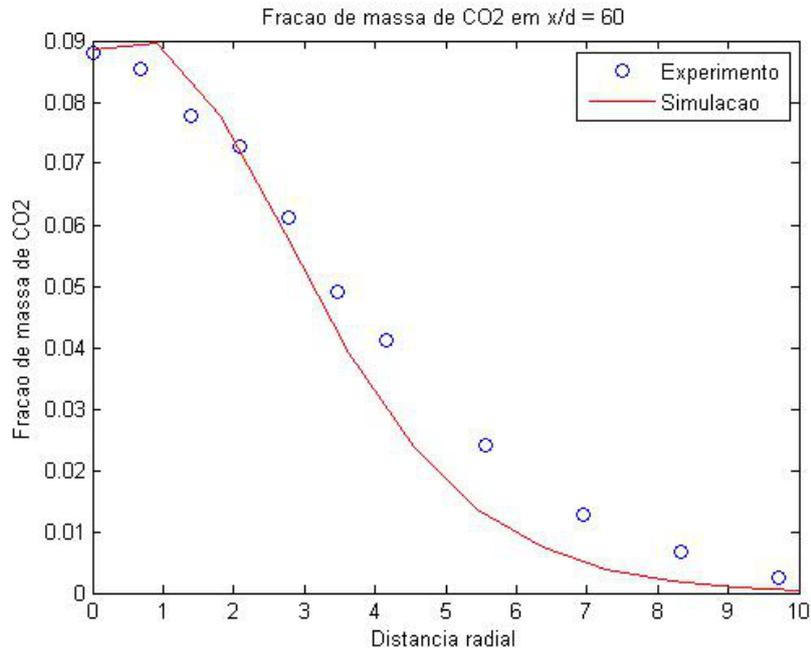


Figura 6.13: Comparação da fração de massa de CO<sub>2</sub> em  $x/d = 60$ .

distribuição semelhante a parte de uma curva gaussiana. Os resultados numéricos mostram-se bastante próximos dos experimentais.

Os gráficos das figuras 6.14 e 6.15 apresentam a distribuição do oxigênio junto à chama. Considerando que o sistema apresenta uma configuração parcialmente pré-misturada, há oxigênio no interior da chama. A fração de massa de oxigênio decai na superfície da chama e depois volta a crescer visto que o fluxo externo à chama é composto de oxigênio.

O valor mínimo de oxigênio na superfície da chama é subestimado pelo código computacional. Ao se afastar da superfície da chama, os resultados experimental e numérico voltam a se aproximar. Isto ocorre, possivelmente, pelo grande gradiente de massa específica que ocorre nesta região.

A distribuição de O<sub>2</sub> ao longo da linha axial é mostrada na figura 6.15. O perfil de distribuição é o mesmo daquele obtido no gráfico radial. Há um valor

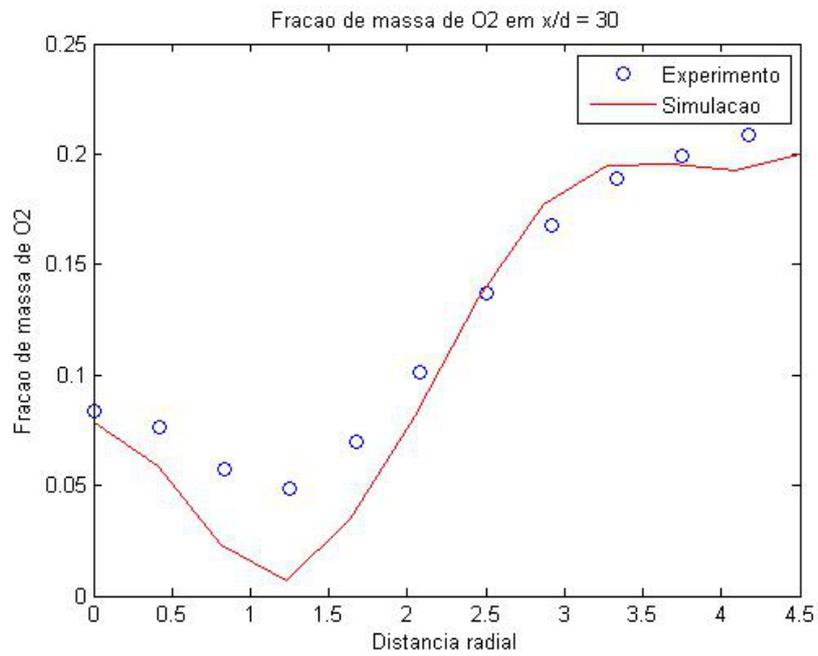


Figura 6.14: Comparação da fração de massa de  $O_2$  em  $x/d = 30$ .

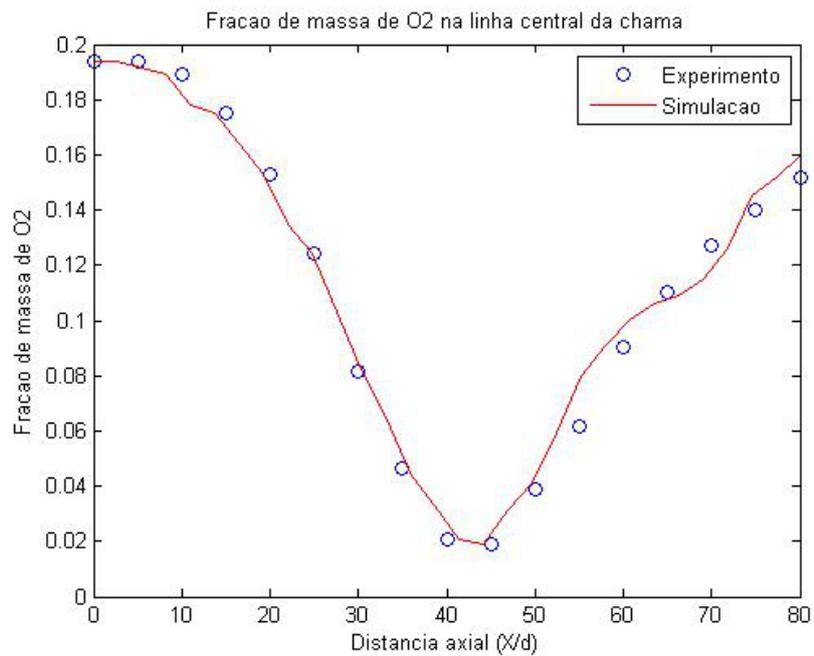


Figura 6.15: Comparação da fração de massa de  $O_2$  na direção axial.

máximo na saída do injetor correspondente ao oxigênio previamente misturado ao combustível. A seguir, esta concentração decai próximo à superfície da chama e então volta a crescer na parte externa da chama.

Para  $x/d > 50$ , a fração de massa de  $O_2$  não chega ao valor de  $Y_{O_2} = 0,23$ , que é a fração de massa de oxigênio no ar atmosférico, pois a região próxima a linha central do jato concentra grandes quantidades de produtos da combustão, causando um efeito de expulsão deste gás.

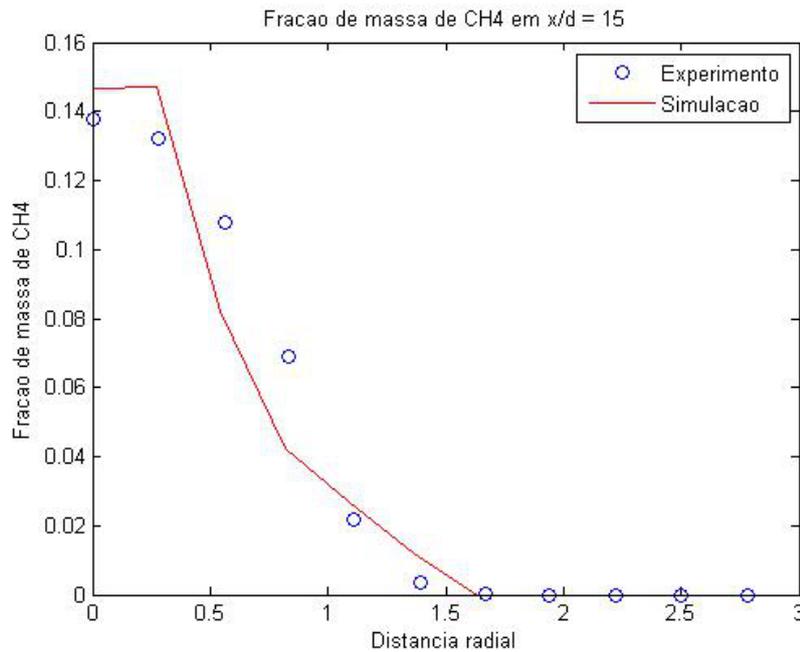


Figura 6.16: Comparação da fração de massa de  $CH_4$  em  $x/d = 15$ .

O perfil de difusão do jato e de consumo do combustível é mostrado nas figuras 6.16 e 6.17. Considerando que o metano entra no sistema apenas através do injetor de combustível e que a combustão ocorre com excesso de oxidante, espera-se que todo o combustível seja consumido no processo. Este comportamento pode ser verificado tanto na figura 6.16, que mostra a distribuição radial do metano em

$x/d = 15$ , como na figura 6.17, que mostra a distribuição do  $CH_4$  ao longo da linha axial do jato.

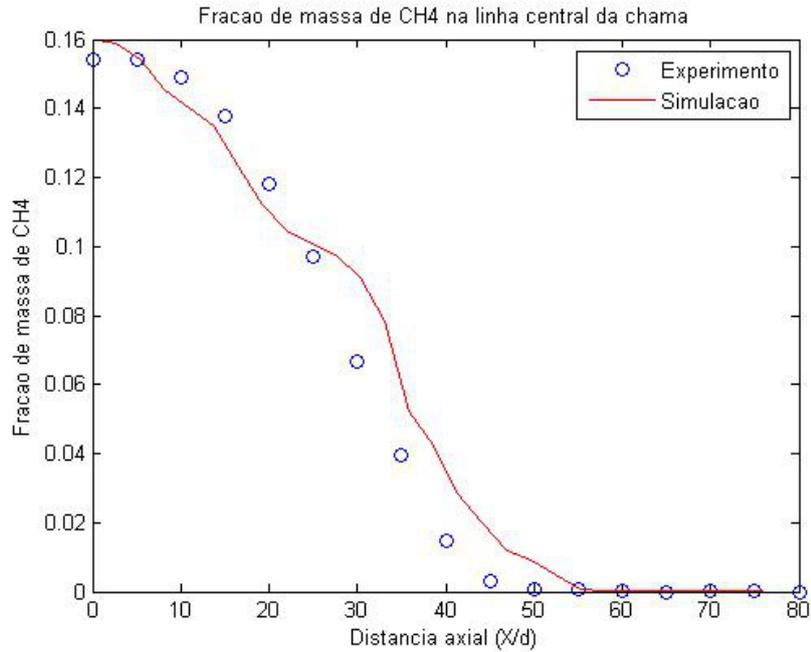


Figura 6.17: Comparação da fração de massa de  $CH_4$  na direção axial.

Os maiores valores para a fração de massa de  $CH_4$ , são obtidos junto à saída do injetor e próximo ao eixo do jato. A concentração de metano cai a zero junto à superfície estequiométrica da chama e a partir daí mantém-se aproximadamente nula. As duas figuras apresentam boa concordância com os dados experimentais.

Por fim, são apresentados os gráficos referentes à temperatura. Considerando que foi feita a adimensionalização das equações, deve-se ter em mente que  $T = 1$  significa, na verdade,  $T = 291K$  e conseqüentemente  $T = 7$  equivale à  $T = 2047K$ .

O perfil de temperatura esperado é intuitivo. A temperatura deve ser menor junto ao injetor visto que, nesta região, está sendo inserido o combustível a baixa temperatura.

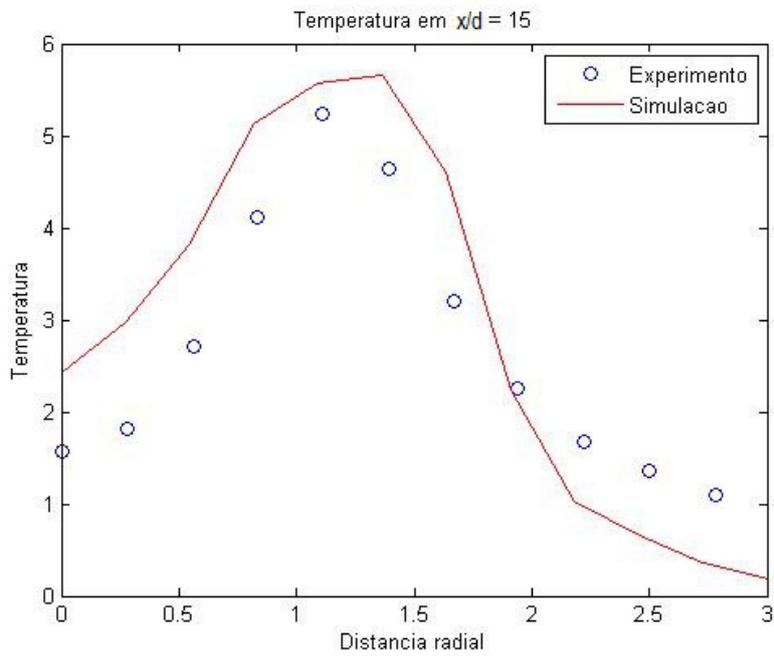


Figura 6.18: Comparação da temperatura adimensional em  $x/d = 15$ .

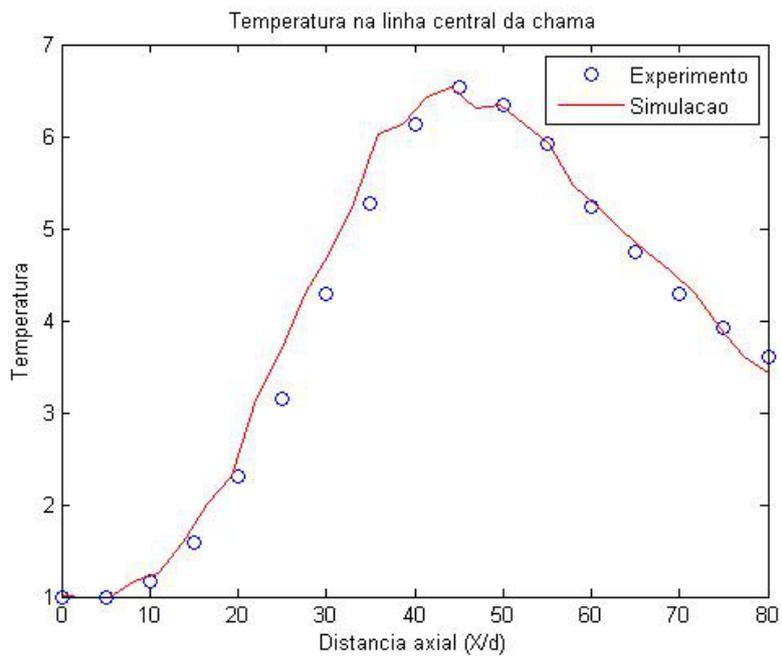


Figura 6.19: Comparação da temperatura adimensional na direção axial.

Longe da superfície da chama a temperatura também deve ser baixa devido a grande quantidade de ar atmosférico que está inicialmente a uma temperatura semelhante à do metano. O pico de temperatura deve ocorrer junto a superfície estequiométrica, pois é a região de maior intensidade da reação e, portanto, a região mais exotérmica.

Tanto a figura 6.18, que apresenta a distribuição radial em  $x/d = 15$ , quanto a figura 6.19, que apresenta a distribuição de temperatura ao longo do eixo do jato, concordam com o resultado esperado por dados experimentais.

Na figura 6.19 verifica-se que, após a superfície da chama, a temperatura não cai muito rapidamente devido ao acúmulo dos gases quentes, provenientes da combustão, nesta região.

### 6.3 Comparação de Chamas com Rotação

Nesta seção, são apresentadas as comparações dos resultados numéricos obtidos com os dados experimentais disponibilizados pelo laboratório de Engenharia Espacial, Mecânica e Mecatrônica da Universidade de Sydney [23] para a configuração denominada Sandia-H do tipo *SMA1*. A Sandia-H é uma chama difusiva e turbulenta de metano ( $CH_4$ ) que utiliza a técnica de rotação para sua estabilização. Esta rotação é induzida em uma região anular em torno do injetor de combustível. Diversos arranjos são possíveis, sendo que o escolhido para a comparação é aquele que utiliza um fluxo rotacional composto de ar atmosférico e com um número de rotação (*Swirl number*) igual a 0,66. Assim como no caso anterior, uma pré-mistura parcial é feita para facilitar os procedimentos experimentais de medição. Os parâmetros utilizados neste experimento são indicados na tabela (6.3).

Tabela 6.3: Parâmetros experimentais para a chama Sandia-H.

Parâmetro	Valor Numérico
Número de Reynolds	15400
Diâmetro interno do injetor	3,6mm
Diâmetro externo do injetor	50,0mm
Diâmetro do anel de fluxo rotacional	60,0mm
Diâmetro do queimador	305,0mm
Velocidade axial do <i>coflow</i>	32,9m/s
Velocidade angular do <i>coflow</i>	21,6m/s
Velocidade da corrente externa	20,0m/s
Temperatura do <i>coflow</i>	286K
Pressão do <i>coflow</i>	0,993atm
Composição do jato principal	33,3% CH <sub>4</sub> , 66,7% de ar por volume
Velocidade do jato principal	66,3m/s
Temperatura do jato principal	296K
Pressão do jato principal	0,993atm

O número de rotação, citado no parágrafo anterior, é definido da seguinte forma:

$$S = \frac{\text{Velocidade angular do coflow}}{\text{Velocidade axial do coflow}} = \frac{32,9}{21,6} = 0,66. \quad (6.1)$$

Este número adimensional caracteriza o tipo de escoamento que será obtido. Quanto maior este número, maior será o nível de rotação resultante.

A figura 6.20 mostra a representação esquemática do queimador utilizado nos experimentos com a chama Sandia-H. Nesta figura,  $u_j$  é a velocidade do jato de combustível,  $u_s$  é a velocidade do fluxo rotacional e  $u_e$  é a velocidade do fluxo de ar externo. A figura 6.21 apresenta uma fotografia da chama Sandia-H onde vê-se a saída do injetor e o perfil da chama.

Analogamente ao que foi feito para a chama Sandia-D, utiliza-se os dados da tabela (6.3) para a definição das condições de contorno do código computacional, assim como os parâmetros de normalização. Neste caso, a velocidade de referência foi definida como sendo  $u_0 = 66,3 \text{ m/s}$ , isto é, a velocidade do jato de combustível. Os demais parâmetros de normalização são os seguintes: comprimento de referência  $L = 3,0\text{m}$ , tempo de referência  $t_0 = L/u_0 = 3,0/66,3 \approx 0,045\text{s}$ , tem-

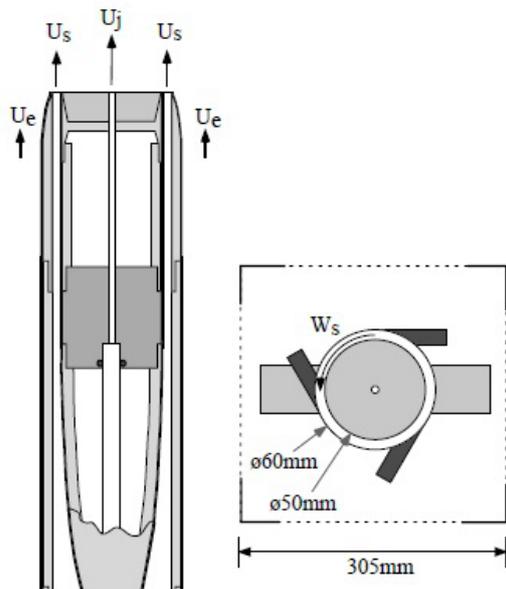


Figura 6.20: *Representação esquemática do queimador utilizado na chama Sandia-H.*



Figura 6.21: *Fotografia da chama Sandia-H onde vê-se a saída do injetor [23].*

peratura de referência  $T_0 = 286K$ . Os demais parâmetros utilizados foram definidos como sendo iguais aos do nitrogênio, devido a sua dominância em relação às demais espécies.

Os gráficos a seguir são referentes à fração de mistura, a temperatura e a fração de massa de dióxido de carbono e de vapor d'água. Dados sobre a distribuição espacial dos reagentes, oxigênio e metano, não foram disponibilizadas e, portanto, não é possível a comparação destes dados.

Como foi feito na última seção, os valores são analisados em diversas regiões da chama na direção axial. Neste caso, os dados disponíveis correspondem às regiões  $x/d = 10, 25, 35, 50, 75, 90$  e  $120$ . A distribuição das frações de massa das espécies ao longo do eixo central do jato também não está disponível. Nos gráficos a seguir, o eixo das abscissas (horizontal) representa a distância radial em relação ao eixo central do jato que é dada em milímetros ( $mm$ ). Para manter a semelhança

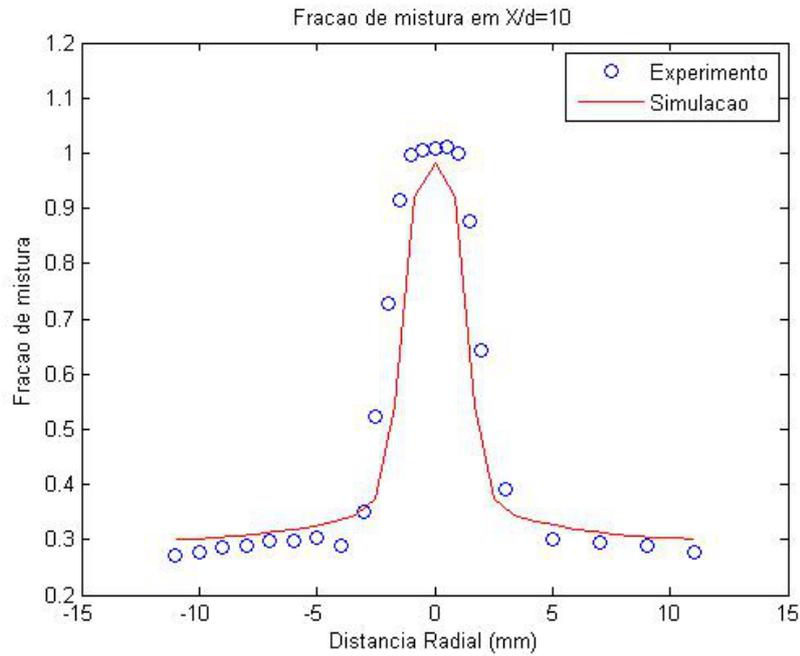


Figura 6.22: Comparação da fração de mistura em  $x/d = 10$ .

com o caso anterior, todos os resultados apresentados nesta seção foram obtidos após um tempo de processamento equivalente a 2,5s, tempo considerado suficiente para o completo desenvolvimento do escoamento.

O sistema de coordenadas utilizado permanece o mesmo; entretanto, a malha computacional utilizada precisou ser refinada próximo à região do injetor de combustível. O número de pontos da malha permaneceu o mesmo, a saber,  $400 \times 128 \times 128$ .

Assim como foi feito anteriormente, será apresentado um maior número de resultados para a variável fração de mistura pois as demais variáveis são calculadas a partir desta. Nas figuras 6.22 e 6.23 verifica-se que a fração de mistura tem valores próximos a um no centro do jato, visto que estas regiões estão relativamente próximas ao injetor de combustível. O decaimento menos acentuado dos resultados numéricos em relação aos dados experimentais, que ocorre na figura 6.23,

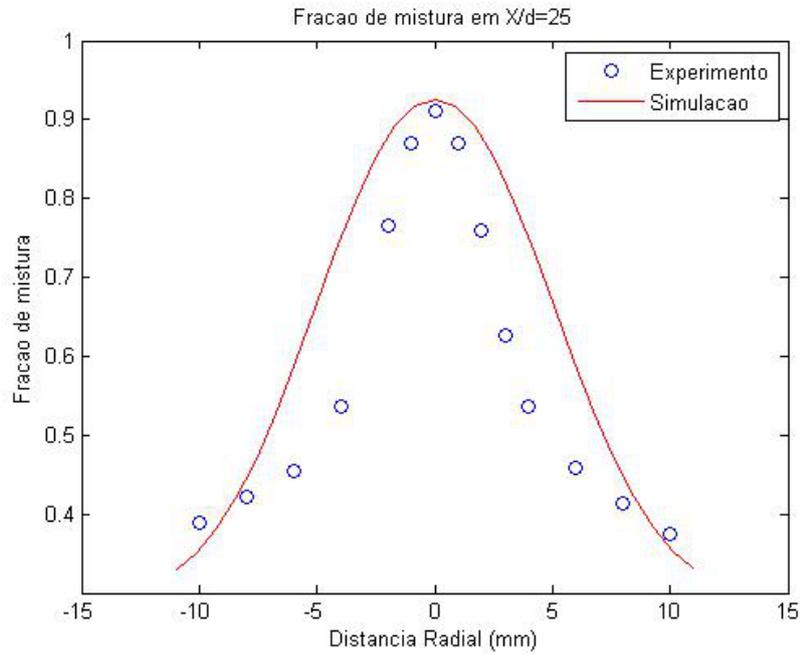


Figura 6.23: Comparação da fração de mistura em  $x/d = 25$ .

pode ser devido ao modelo de turbulência utilizado que apresenta um caráter menos dissipativo nesta região. É provável que modelos de turbulência mais sofisticados apresentem resultados mais próximos dos experimentais, como os modelos de Germano ou modelos analíticos.

Nas figuras 6.24 e 6.25, verifica-se que a difusão modifica o perfil da curva de distribuição da fração de mistura. Além do ponto de máximo da fração de mistura estar diminuindo conforme esta distancia-se do ponto de injeção do combustível, a curva vai alongando, o que é um efeito típico dos fenômenos de difusão.

A figura 6.26 apresenta o mesmo comportamento daqueles das figuras 6.24, 6.25. Entretanto, a figura 6.27 é mais estreita que as anteriores. Isto ocorre porque  $X/d = 120$  é, justamente, o comprimento aproximado da chama. Nesta região, ou seja, na ponta da chama, o combustível não tem tempo suficiente para se difundir e é rapidamente consumido.

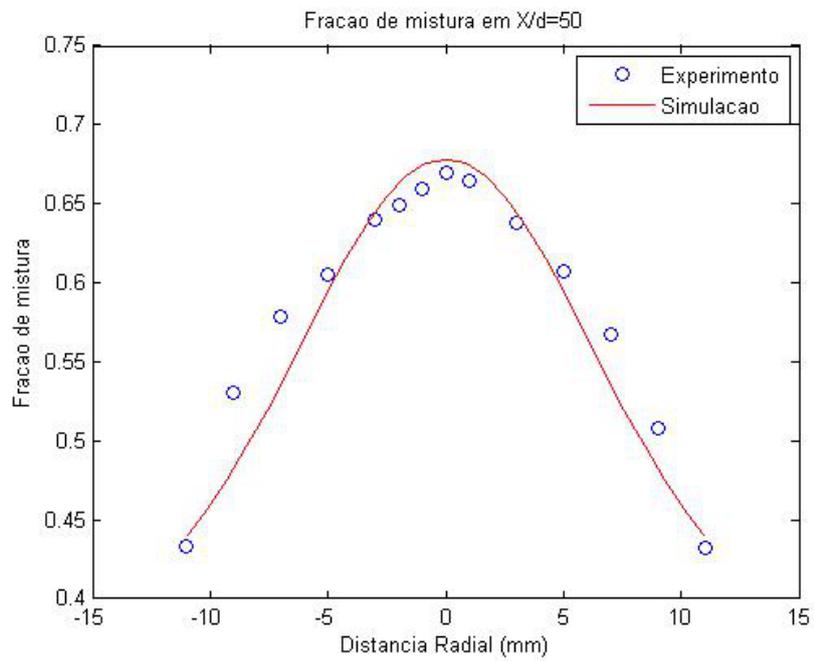


Figura 6.24: Comparação da fração de mistura em  $x/d = 50$ .

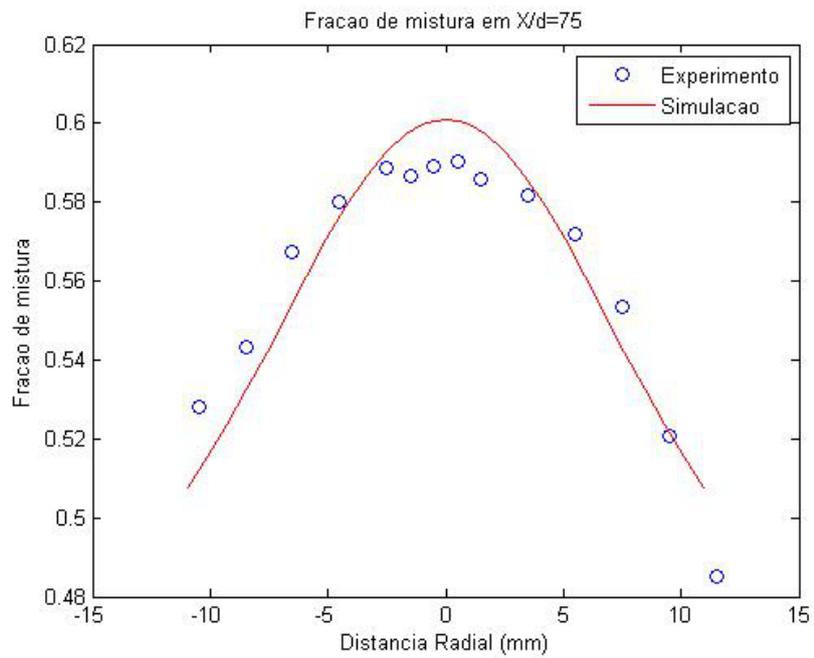


Figura 6.25: Comparação da fração de mistura em  $x/d = 75$ .

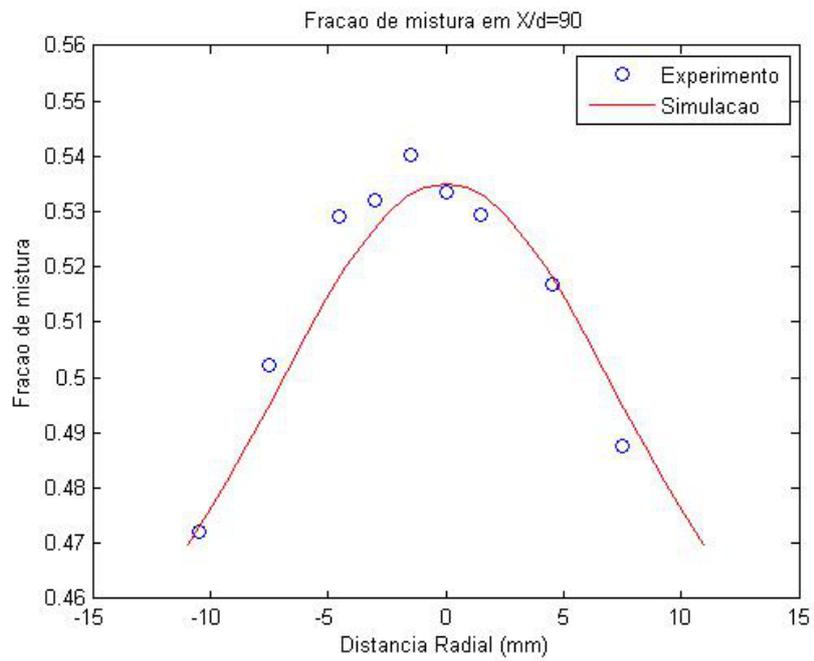


Figura 6.26: Comparação da fração de mistura em  $x/d = 90$ .

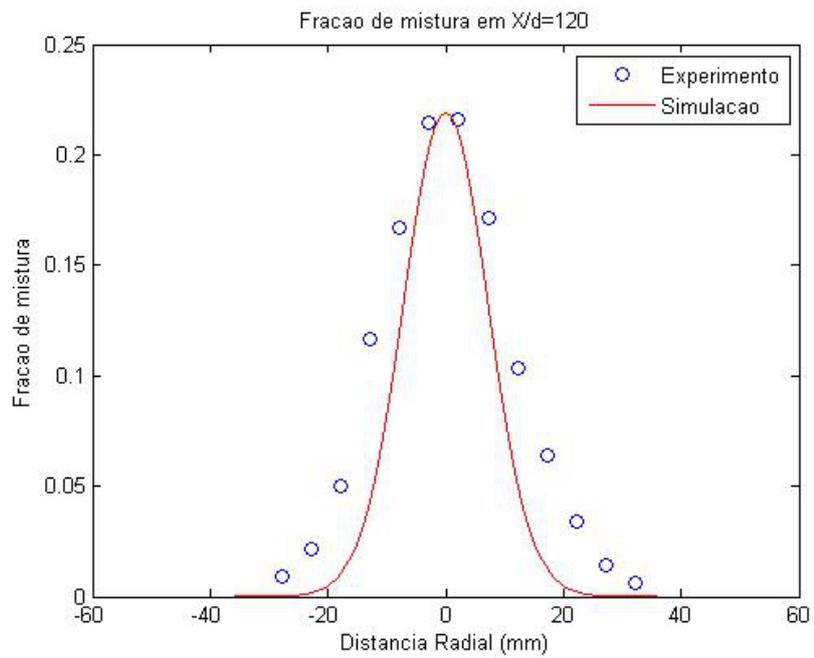


Figura 6.27: Comparação da fração de mistura em  $x/d = 120$ .

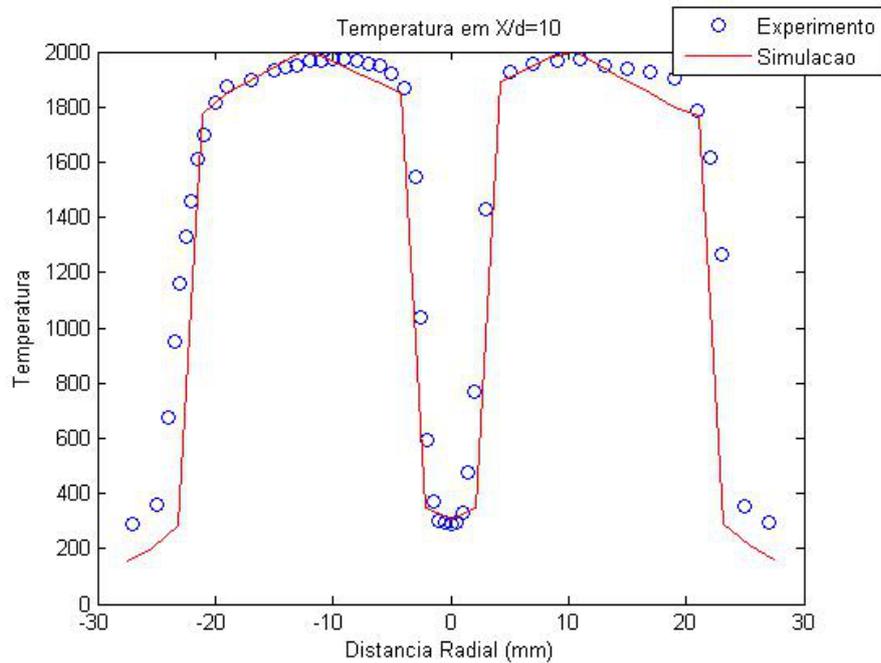


Figura 6.28: Comparação da temperatura em  $x/d = 10$ .

As figuras 6.28 e 6.29 correspondem a distribuição de temperatura (em Kelvin) ao longo da direção radial da chama em  $x/d = 10$  e  $x/d = 50$ , respectivamente. Por outro lado, sobre a superfície estequiométrica a reação química ocorre de forma mais intensa e a temperatura é mais elevada. Afastado da superfície estequiométrica a temperatura tende a temperatura ambiente.

O resultado desta combinação é um perfil de temperatura parecido com a letra **M**, que é bastante visível na figura 6.28 e que vai sendo atenuado ao se distanciar do injetor.

O eixo central da chama torna-se cada vez mais aquecido conforme aproxima-se do topo da chama, como demonstram as figuras 6.29 e 6.30. Isto ocorre devido ao acúmulo dos gases quentes, provenientes da combustão nesta região, e ao próprio aquecimento do combustível.

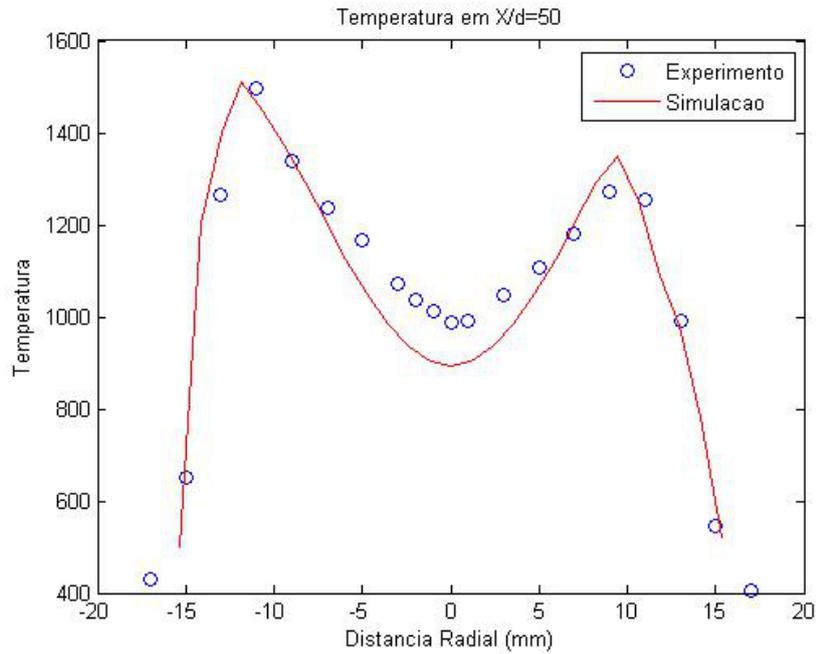


Figura 6.29: Comparação da temperatura em  $x/d = 50$ .

A figura 6.31 refere-se ao topo da chama, ou seja,  $x/d = 120$ , nesta região o perfil de temperatura em forma de **M** desaparece pois nesta região a superfície estequiométrica da chama cruza o eixo do jato. Cabe ressaltar que o eixo do jato é apenas um referencial geométrico.

Outro detalhe a ser observado na figura 6.31, referente à temperatura em  $x/d = 120$ , é que a temperatura longe do centro do jato é mais alta do que nas demais figuras 6.30, 6.29 e 6.28. Ou seja, para a distância radial  $r/d = 20$  na figura 6.30 observa-se uma temperatura de aproximadamente  $400K$ , enquanto que na figura 6.31 tem-se uma temperatura de aproximadamente  $800K$ , para  $r/d = 20$ . Isso mostra que a chama também está aquecendo o gás externo à ela, como era de se esperar.

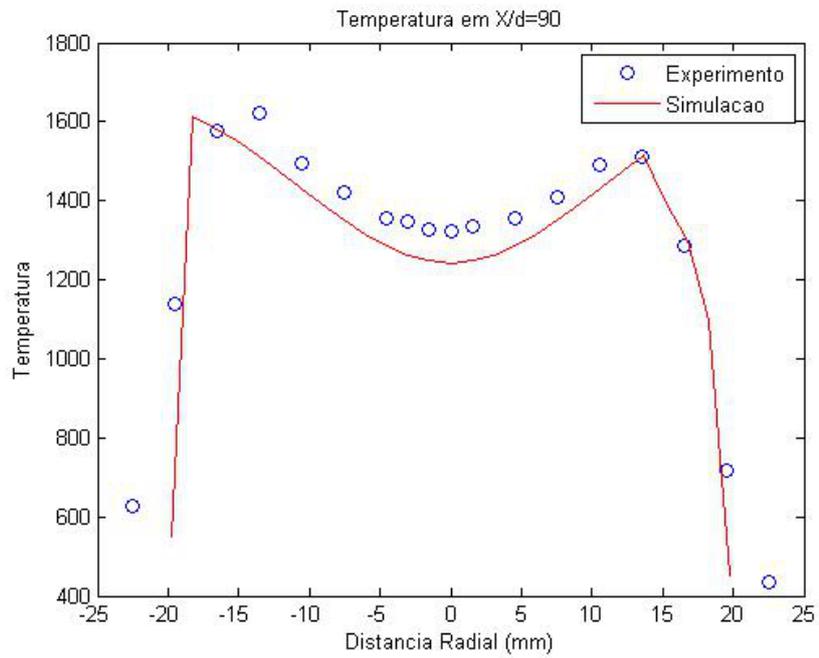


Figura 6.30: Comparação da temperatura em  $x/d = 90$ .

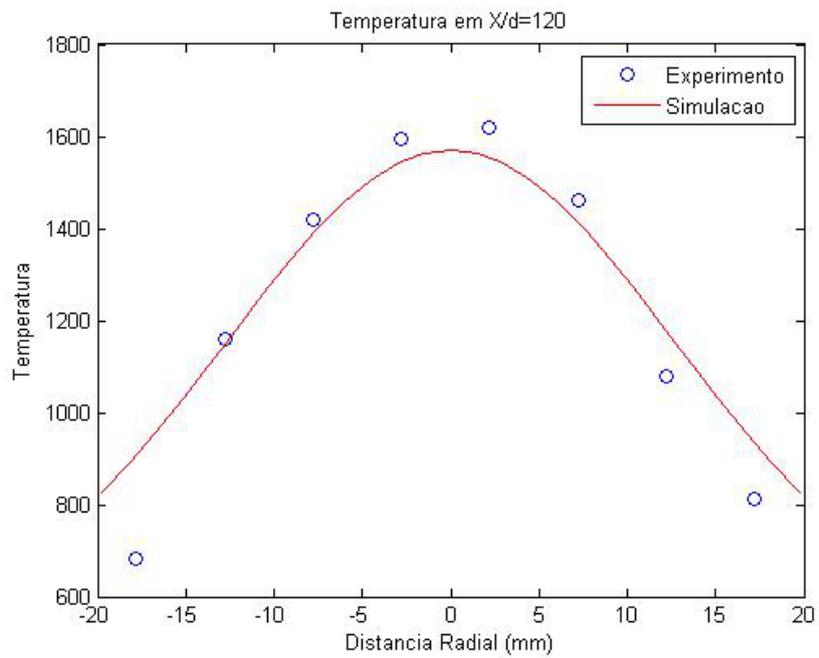


Figura 6.31: Comparação da temperatura em  $x/d = 120$ .

Deste modo, conforme aproxima-se do fim da câmara de combustão a corrente de ar externa aquece-se, mesmo que o oxigênio contido neste fluxo não tenha participado do processo reativo.

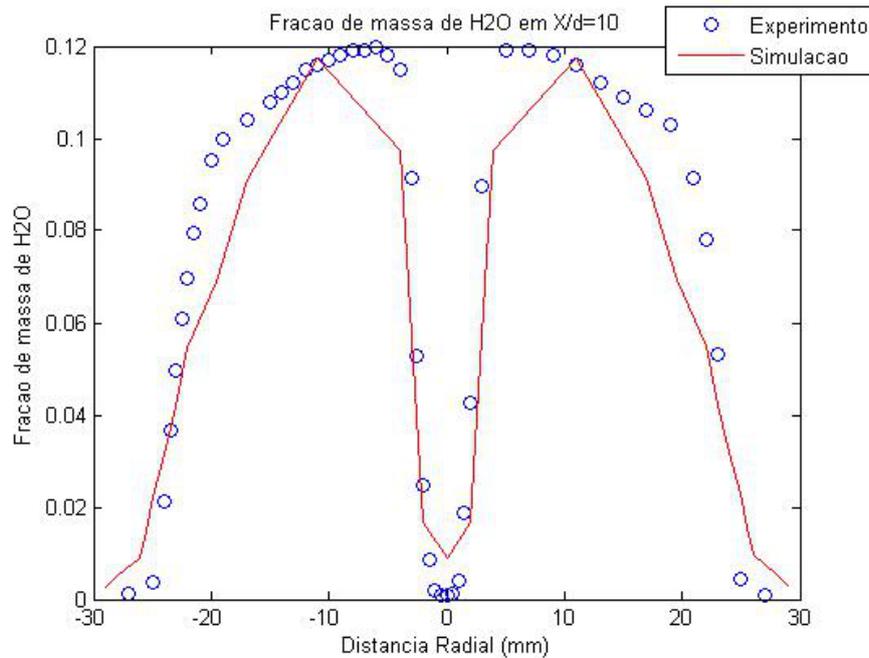


Figura 6.32: Comparação da fração de massa de  $H_2O$  em  $x/d = 10$ .

As figuras 6.32, 6.33, 6.34 e 6.35 são referentes a distribuição da fração de massa do vapor d'água produzido no processo de combustão. Como a reação é mais intensa junto a superfície estequiométrica, nesta região é que se verifica uma maior concentração de  $H_2O$ . A partir da superfície da chama, tanto na direção externa à chama, quanto internamente, a concentração de vapor decai por difusão.

No centro da chama, o vapor gerado é arrastado pelo fluxo de combustível para o topo da chama fazendo com que a concentração de  $H_2O$  junto ao eixo central do jato aumente gradativamente conforme distancia-se do injetor.

A mudança no perfil do gráfico que ocorre da figura 6.34 para a figura 6.35, se deve ao fato que em  $x/d = 120$  a superfície estequiométrica da chama

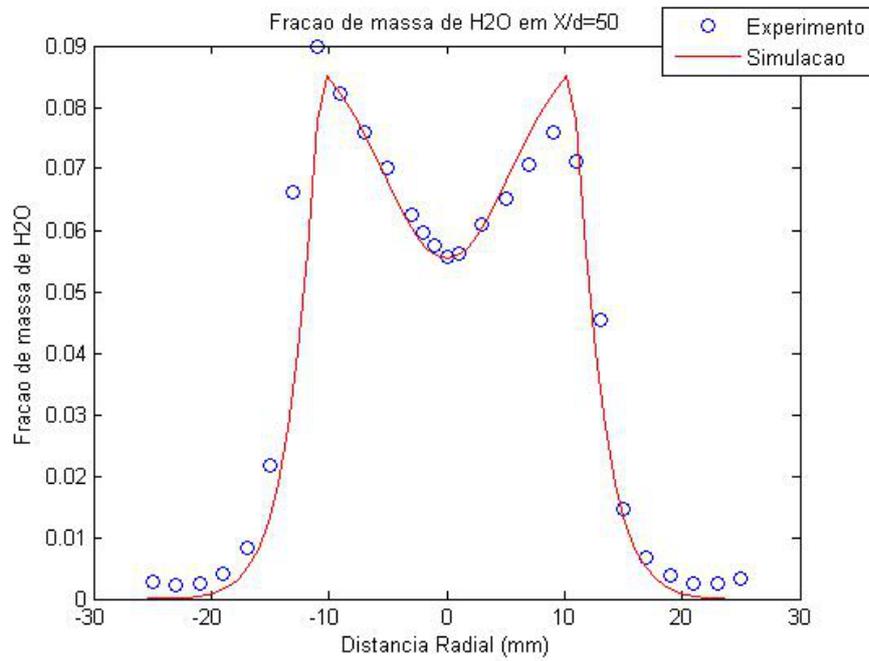


Figura 6.33: Comparação da fração de massa de H<sub>2</sub>O em  $x/d = 50$ .

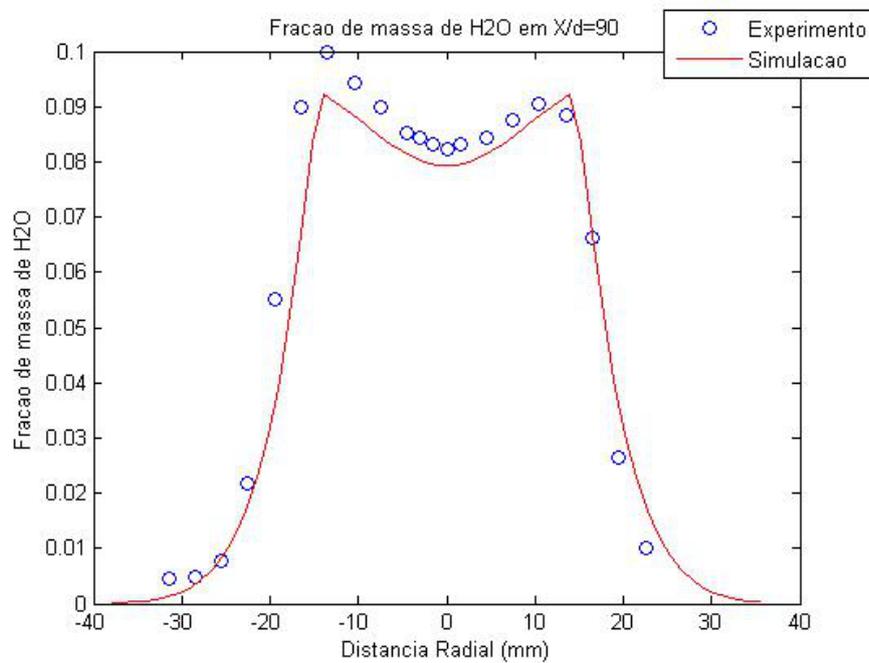


Figura 6.34: Comparação da fração de massa de H<sub>2</sub>O em  $x/d = 90$ .

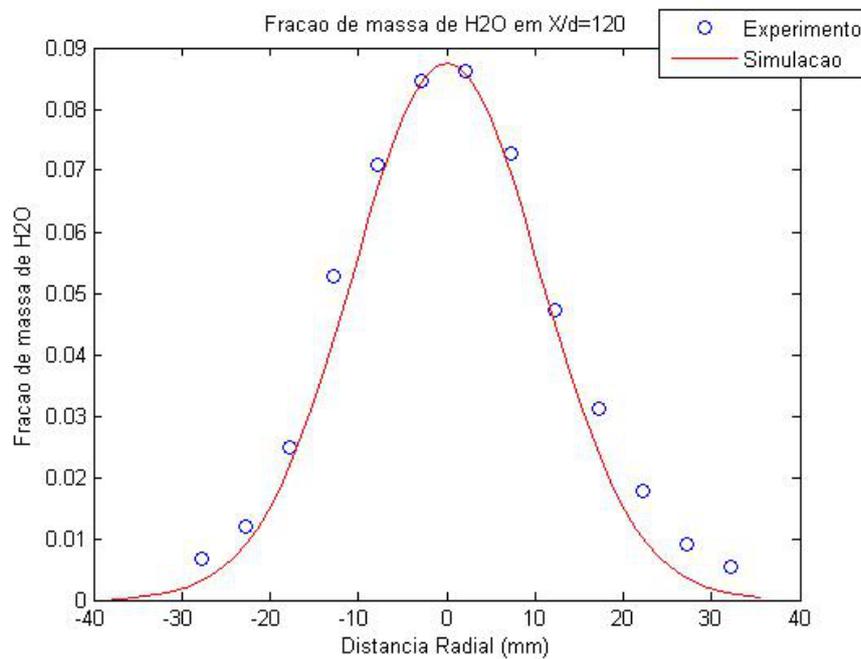


Figura 6.35: Comparação da fração de massa de  $H_2O$  em  $x/d = 120$ .

encontra o eixo central do jato, obtendo-se assim, uma região de grande formação de produtos.

O dióxido de carbono, assim como o vapor d'água, são os principais produtos resultantes desta reação de combustão. Espera-se que a distribuição das frações de massa dos dois componentes apresente a mesma distribuição, pois eles são gerados simultaneamente. Este comportamento pode ser verificado com clareza nas figuras 6.36, 6.37, 6.38 e 6.39, que são bastante similares àquelas obtidas para a fração de massa de  $H_2O$ .

As curvas referentes à fração de massa de  $CO_2$  e de  $H_2O$  apresentam pouca suavidade em  $x/d = 10$ . Isto ocorre, provavelmente, pela pouca quantidade de pontos da malha computacional nesta região que, apesar da utilização de refinamento, apresenta dificuldades em seguir com suavidade os dados experimentais.

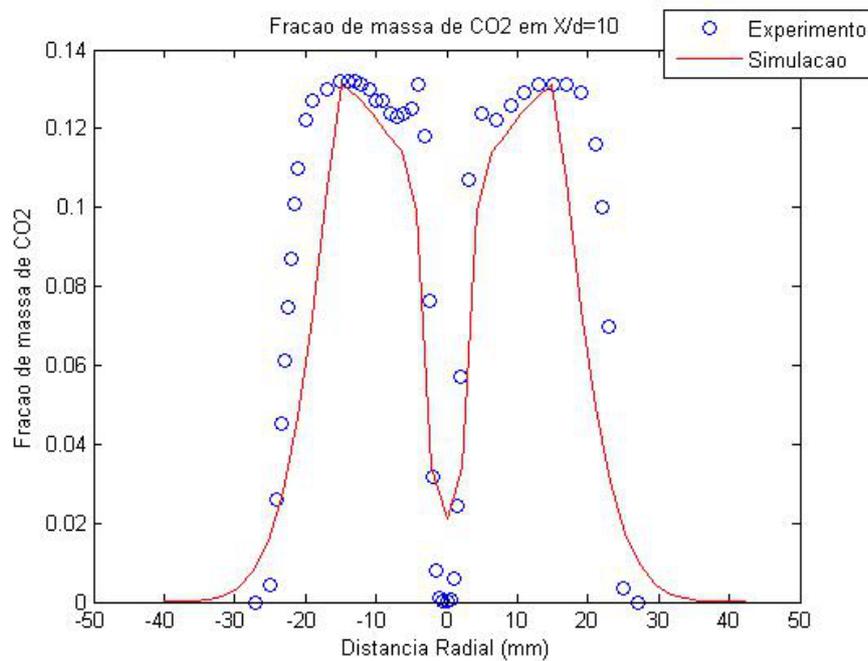


Figura 6.36: Comparação da fração de massa de  $CO_2$  em  $x/d = 10$ .

Este problema pode ser resolvido com o aumento do número de pontos da malha, mas isto implica em um aumento considerável no custo computacional.

Para as figuras referentes as regiões onde  $x/d = 50$  e  $x/d = 90$ , verifica-se que os resultados numéricos apresentam uma simetria que não ocorre nos dados experimentais. O motivo da falta de simetria dos dados experimentais pode ser decorrente de pequenas variações no bordo do injetor que podem induzir um fluxo turbulento maior em uma certa direção e menor em outra.

Por mais precisa que seja a usinagem desse tipo de peça, esse tipo de imperfeição é sempre possível. No caso da simulação numérica, as paredes do injetor são definidas matematicamente e, portanto, perfeitamente simétricas. Logo, é de se esperar que a solução apresente certo grau de simetria.

Considerando a ordem de exatidão dos dados experimentais, que é de 10%, todos os resultados obtidos numericamente apresentam boa concordância com

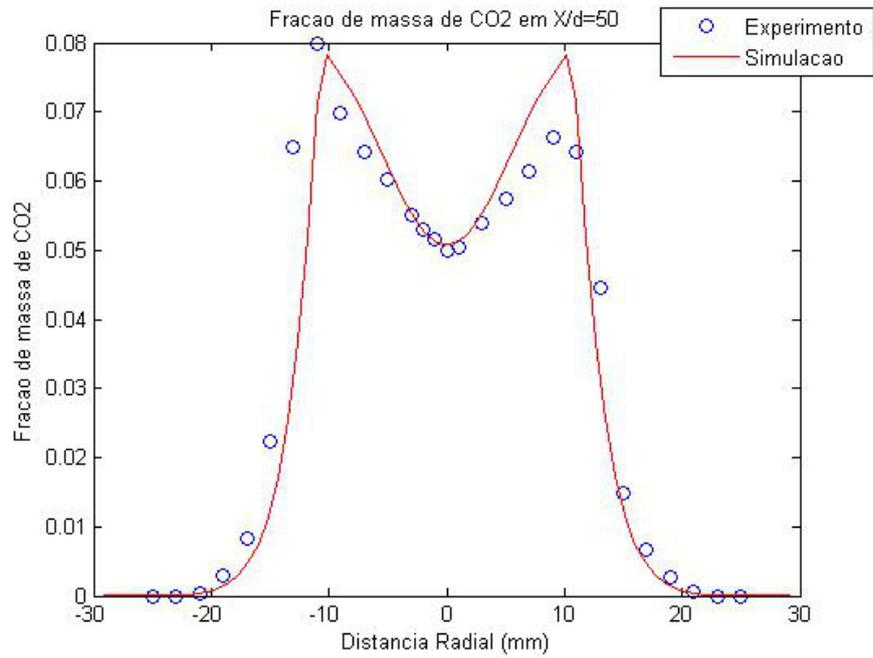


Figura 6.37: Comparação da fração de massa de CO<sub>2</sub> em  $x/d = 50$ .

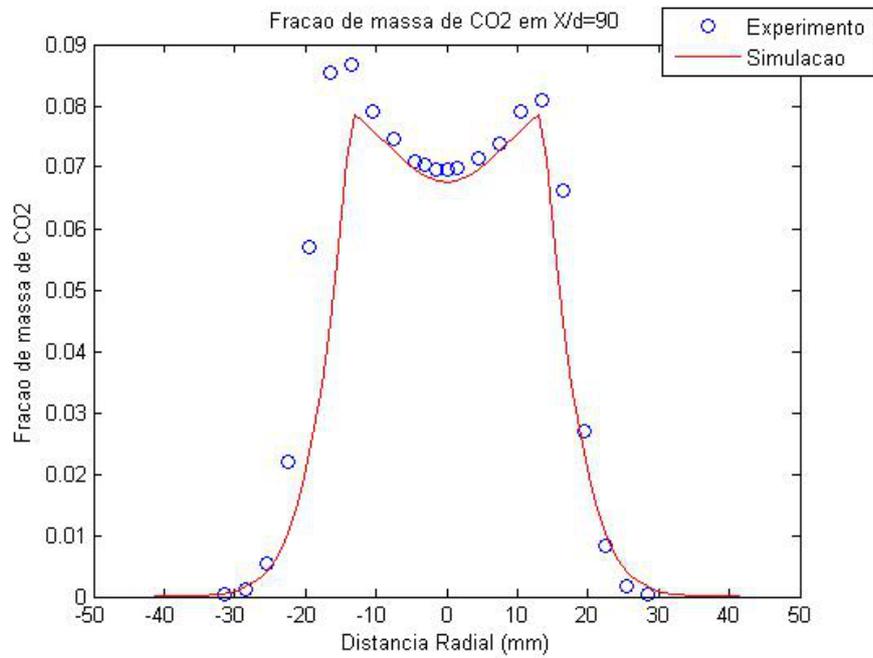


Figura 6.38: Comparação da fração de massa de CO<sub>2</sub> em  $x/d = 90$ .

estes. As discrepâncias observadas estão limitadas à variação da margem de erro do experimento.

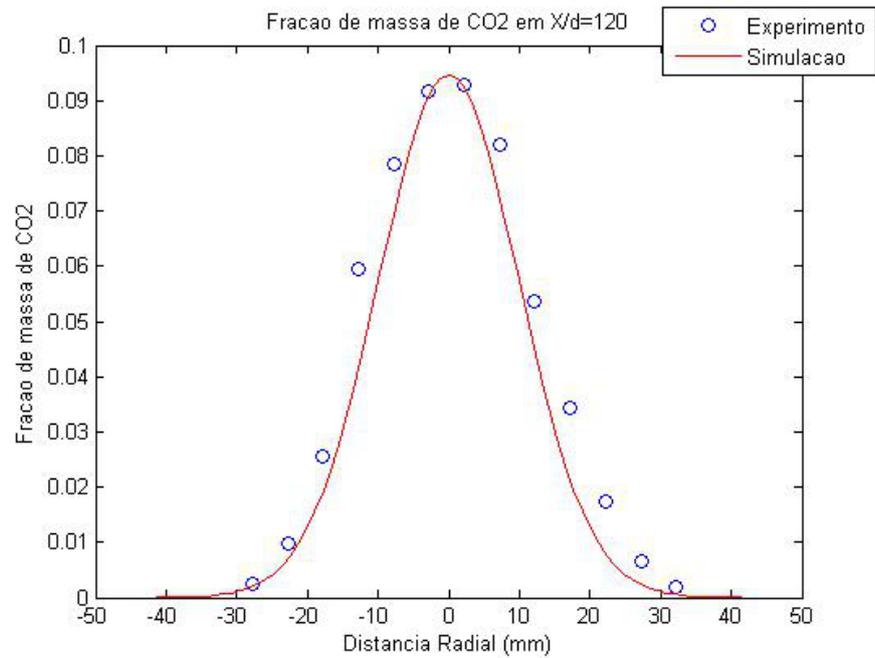


Figura 6.39: Comparação da fração de massa de CO<sub>2</sub> em  $x/d = 120$ .

## 7 CONSIDERAÇÕES FINAIS E CONCLUSÕES

O propósito geral deste trabalho foi aprofundar o conhecimento sobre chamas difusivas, através da perspectiva da dinâmica dos fluidos, dando ênfase ao caráter transiente deste fenômeno. Neste contexto, a revisão sobre as técnicas de estabilização via rotação de reagentes e o uso de chamas *Pilot* possibilitou um melhor entendimento do efeito das condições iniciais e de contorno sobre o comportamento global do escoamento, visto que cada técnica de estabilização age de forma distinta sobre o fluxo de produtos e reagentes.

Adicionalmente, a coleta de informações sobre cada técnica possibilitou um grande contato com os conceitos físicos do problema, tornando este trabalho interdisciplinar e possibilitando a aquisição de certa quantidade de conhecimento que não seria possível em uma abordagem mais específica como num tratamento puramente numérico ou teórico.

O número de técnicas analisadas, tanto teórica, quanto numericamente, não foi muito expressivo, mas entende-se que as técnicas apresentadas são capazes de dar uma ideia geral sobre o comportamento do problema. O número reduzido de técnicas analisadas numericamente se deve a complexidade de modelagem do fenômeno que envolve turbulência, vários níveis de escalas temporais e espaciais, grande número de equações e seu caráter altamente não-linear, além de restrições como custo computacional e tempo de modelagem de cada problema.

Diversas simplificações foram necessárias para se obter uma solução aproximada para este problema. Estas simplificações tornam o problema mais acessível mas geram pequenos erros. Em geral esta perda é insignificante quando as simplificações são feitas de maneira correta.

Os resultados obtidos apresentam, de modo geral, boa concordância com os dados experimentais. As diferenças são inerentes ao processo de simplificação e vão tornando-se menos relevantes a cada melhoramento, sendo que este é um processo contínuo. A técnica de simulação de grandes escalas (LES), em especial, mostrou-se bastante eficaz na descrição do fenômeno, sendo que o uso do modelo de viscosidade turbulenta de Smagorinsky é um dos próximos itens a serem melhorados. É provável que a utilização de um modelo dinâmico para a viscosidade turbulenta, como o modelo de Germano, apresente resultados mais realísticos.

A principal contribuição deste trabalho foi o desenvolvimento de uma metodologia que mostrou-se eficaz na solução de problemas de combustão. Esta metodologia foi validada através da comparação de seus resultados com dados experimentais. Futuramente, outras técnicas de estabilização, que não foram consideradas neste trabalho, podem ser abordadas. A utilização de queimadores em meios porosos tem se desenvolvido muito nos últimos anos e parece ser um bom tema de estudo. O melhoramento do código produzido também é necessário e deve ocorrer através da utilização de modelos para a viscosidade turbulenta mais sofisticados, através da geração automática das malhas computacionais e da utilização de modelos químicos mais realísticos.

Devido a presente utilização de combustíveis fósseis, que deve reduzir nos próximos anos, e a possibilidade de utilização de combustíveis de fontes renováveis como o etanol e o bio-diesel, cada vez mais presente, acredita-se que um bom entendimento dos fenômenos que regem a combustão seja um fator determinante no desenvolvimento científico e tecnológico do nosso país. Neste contexto, este trabalho apresenta uma modesta contribuição no sentido de propor possíveis abordagens para a modelagem e simulação numérica destes fenômenos.

## Referências Bibliográficas

- [1] AGENCY, I. E. Key world energy statistics. Tech. rep., International Energy Agency, 2010.
- [2] ALLARDICE, C., AND TRAPNELL, E. R. The first reactor. Tech. rep., U.S. Atomic Energy Commission - Division of Technical Information, 1946.
- [3] BARLOW, R., AND FRANK, J. Piloted  $CH_4$ /air flames C, D, E and F - release 2.1. Tech. rep., Sandia National Laboratories, 2007.
- [4] BELHI, M., DOMINGO, P., AND VERVISCH, P. Effect of electric field on flame stability. *Proceedings of the European Combustion Meeting* (2009), 1–6.
- [5] BOERSMA, B. J., AND LELE, S. K. Large eddy simulation of compressible turbulent jets. *CTR-Annual Research Briefs* (1999), 365–377.
- [6] BUCKMASTER, J. *The Mathematics of Combustion*. Society for Industrial and Applied Mathematics, 1985.
- [7] BURKE, S. P., AND SCHUMANN, T. E. W. Diffusion flames. *Industrial and Engineering Chemistry* 20, 10 (1928), 998–1004.
- [8] CHORIN, A. J. *Vorticity and Turbulence*. Springer-Verlag New York, Inc., 1994.
- [9] DOLD, J. Flame propagation in a nonuniform mixture: analysis of a slowly varying triple flame. *Combustion and Flame* 76, 71 (1989), 71–88.
- [10] DOUGLASS, H. W., SCHMIDT, H., AND LEVINSON, L. Liquid rocket engine combustion stabilization devices. Tech. rep., National Aeronautics and Space Administration - NASA, 1974.

- [11] FERREIRA, V. G., NAVARRO, H. A., AND KAIBARA, M. K. *Modelagem Matemática e Simulação Numérica em Dinâmica dos Fluidos*. SBMAC, 2005.
- [12] FOX, R. O. *Computational Models for Turbulent Reacting Flows*. Cambridge University Press, 2003.
- [13] FRISCH, U. *Turbulence: The Legacy of A.N. Kolmogorov*. Cambridge University Press, 1996.
- [14] GHOSAL, S., AND VERVISCH, L. Theoretical and numerical investigation of a symmetrical triple flame using a parabolic flame type approximation. *Journal Fluid Mechanics* 415 (2000), 227–260.
- [15] GOKARN, A., BATTAGLIA, F., FOX, R. O., AND HILL, J. C. Simulations of mixing for a confined co-flowing planar jet. *Computers and Fluids* 35 (2006), 1228–1238.
- [16] GREENBLATT, D., AND WYGNANSKY, I. The control of flow separation by periodic excitation. *Progress in Aerospace Sciences* 36 (2000), 487–545.
- [17] GRUNDMANN, S., KLUMPP, T., AND TROPEA, C. Stabilizing a laminar boundary layer using plasma actuators. *Proceedings of the 25th International Congress of the Aeronautical Sciences* (2006), 1–10.
- [18] GRUNDMANN, S., AND TROPEA, C. Experimental damping of boundary-layer oscillations using DBD plasma actuators. *International Journal of Heat and Fluid Flow* 30 (2009), 394–402.
- [19] HUGHES, W. F., AND BRIGHTON, J. A. *Dinâmica dos Fluidos*. McGraw-Hill do Brasil LTDA, 1974.
- [20] JOSLIN, R., ERLEBACHER, G., AND HUSSAINI, M. Y. Active control of instabilities in laminar boundary-layer flow. part 1: An overview. Tech.

- rep., Institute for Computer Applications in Science and Engineering - Hampton- Virginia, 1994.
- [21] KANURY, M. A. *Introduction to combustion*. Gordon and Breach Science Publishers, 1975.
- [22] KAPLAN, C. R., BAEK, S. W., ORAN, E. S., AND ELLZEY, J. L. Dynamics of a strongly radiating unsteady ethylene jet diffusion flame. *Combustion and Flame* 96 (1994), 1–21.
- [23] KENT, J., AND MASRI, A. Conditional mean calculations for swirl, bluff-body and piloted flames database. Tech. rep., University of Sydney, 2004.
- [24] KIM, W., DO, H., MUNGAL, M. G., AND CAPPELLI, M. A. Plasma-discharge stabilization of jet diffusion flames. *IEEE Transactions on Plasma Science* 34, 6 (2006), 2545–2551.
- [25] KIONI, P., ROGG, B., BRAY, K., AND LIÑÁN, A. Flame spread in laminar mixing layers: the triple flame. *Combustion and Flame* 95, 276 (1993), 276–290.
- [26] KIRKBEY, L., AND SCHMITZ, R. An analytical study of the stability of a laminar diffusion flame. *Combustion and Flame* 10, 3 (1966), 205–220.
- [27] KUNDU, P. K., AND COHEN, I. M. *Fluid Mechanics*. Elsevier Science, 2002.
- [28] KUO, K. K. *Principles of Combustion*. John Wiley, 2005.
- [29] KURIMOTO, N., SUZUKI, Y., AND KASAGI, N. Coaxial jet control for lifted flame stabilization with arrayed miniature actuators. *12th International Symposium on Applications of Laser Techniques to Fluid Mechanics* (2004), 1–12.

- [30] LAW, C. K. *Combustion Physics*, first ed. Cambridge University Press, New York, NY, 2006.
- [31] LEUSIEUR, M., METAIS, O., AND COMTE, P. *Large-Eddy Simulations of Turbulence*. Cambridge University Press, 2005.
- [32] LIÑÁN, A. *Combustion in high speed flows*. Kluwer Academic Publications, 1994.
- [33] MITCHELL, R., SAROFIM, A., AND CLOMBURG, L. Experimental and numerical investigation of confined laminar diffusion flames. *Combustion and Flame* 37 (1980), 227–244.
- [34] MODI, V. Moving surface boundary-layer control: A review. *Journal of Fluids and Structures* 11 (1997), 627–663.
- [35] PAI, S. I. *Fluid Dynamics of Jets*. D. Van Nostrand Company, Inc., 1954.
- [36] PARK, J. S., HWANG, D. J., PARK, J., KIM, J. S., KIM, S., KEEL, S. I., KIM, T. K., AND NOH, D. S. Edge flame instability in low-strain-rate counterflow diffusion flames. *Combustion and Flame* 146, 4 (2006), 612–619.
- [37] PETERS, N. *Turbulent combustion*, first ed. Cambridge University Press, Cambridge, UK, 2000.
- [38] PHILLIPS, H. Flame in a buoyant methane layer. *10th Symposium on Combustion - The Combustion Institute* (1965), 1277–1283.
- [39] PITSCH, H., AND STEINER, H. Large-eddy simulation of a turbulent piloted methane/air diffusion flame. *Physics of Fluids* 12 (2000), 2541–2554.
- [40] POINSOT, T., AND VEYNANTE, D. *Theoretical and Numerical Combustion*, first ed. R.T. Edwards Inc., Philadelphia, PA, 2001.

- [41] QUINTIERE, J. G. *Fundamentals of Fire Phenomena*. John Wiley and Sons LTD, 2006.
- [42] RILEY, J. J., EL HAK, M. G., AND METCALFE, R. Complaint coatings. *Annual Review of Fluid Mechanics* 20, 1 (1988), 393–420.
- [43] ROSA, E. S. *Notas de Aula em Modelagem de escoamentos turbulentos*. Departamento de energia - Unicamp, 2003.
- [44] SCHLICHTING, H. *Boundary-Layer Theory*. McGraw-Hill Book Company, 1979.
- [45] SEMENOV, N. N. *Chemical Kinetics and Chain Reactions*. Oxford University Press, 1935.
- [46] SHEPHERD, D. G. *Wind Turbine Technology: Fundamental Concepts in Wind Turbine Engineering*, second ed. ASME Press, New York, NY, 2009.
- [47] TAKAHASHI, F., AND SCHMOLL, W. Lifting criteria of jet diffusion flames. *23rd Symposium on Combustion - The Combustion Institute* 23 (1990), 677–683.
- [48] TAKAHASHI, F., SCHMOLL, W. J., AND BELOVICH, V. M. Suppression of bluff-body stabilized diffusion flames. *Joint Propulsion Conference and Exhibit* (1998), 1–7.
- [49] TRIMIS, D., AND WAWRZINEK, K. Flame stabilization of highly diffusive gas mixtures in porous inert media. *Journal of Computational and Applied Mechanics* 5, 2 (2004), 367–381.
- [50] TURNS, S. R. *An Introduction to Combustion*, second ed. Mcgraw Hill Higher Education, Singapore, SG, 2000.

- [51] VANCE, R., MIKLAVCIC, M., AND WICHMAN, I. S. On the stability of one-dimensional diffusion flames established between plane, parallel, porous walls. *Combustion Theory and Modelling* 5 (2001), 147–161.
- [52] VEYNANTE, D., VERVISCH, L., POINSOT, T., LIÑÁN, A., AND RUTSCH, G. Triple flame structure and diffusion flame stabilization. *Proceedings of the Summer Program - Center for Turbulence Research* (1994), 55–73.
- [53] VOLKER, J. *Large Eddy Simulation of Turbulent Incompressible Flows*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2004.
- [54] WARNATZ, J., MAAS, U., AND DIBBLE, R. *Combustion: Physical and Chemical Fundamentals, Modeling and Simulation, Experiments, Pollutant Formation*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2006.
- [55] WILLIAMS, F. A. *Combustion Theory*, second ed. The Benjamin-Cummings Publishing Company Inc., Menlo Park, CA, 1985.
- [56] WISMAN, D. L., MARCUM, S. D., AND GANGULY, B. N. Electrical control of the thermodiffusive instability in premixed propane-air flames. *Combustion and Flame* 151, 639-648 (2007).