

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
ESCOLA DE ENGENHARIA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA

**DESENVOLVIMENTO DE SOLUÇÕES
ANALÍTICO/NUMÉRICAS PARA CHAMAS DIFUSIVAS
TURBULENTAS DE HIDROGÊNIO**

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

FELIPE NORTE PEREIRA

**PORTO ALEGRE, RS
2012**

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
ESCOLA DE ENGENHARIA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA

**DESENVOLVIMENTO DE SOLUÇÕES
ANALÍTICO/NUMÉRICAS PARA CHAMAS DIFUSIVAS
TURBULENTAS DE HIDROGÊNIO**

FELIPE NORTE PEREIRA

Dissertação de Mestrado apresentada como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Engenharia.

Área de Concentração: Fenômenos de Transporte e Operações Unitárias

Orientador:
Prof. Dr. Álvaro Luiz de Bortoli

Colaborador:
Prof. Dr. Nilson Romeu Marcilio

**PORTO ALEGRE, RS
2012**

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
ESCOLA DE ENGENHARIA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA

A Comissão Examinadora, abaixo assinada, aprova a Dissertação *Desenvolvimento de Soluções Analítico/Numéricas para Chamas Difusivas Turbulentas de Hidrogênio*, elaborada por Felipe Norte Pereira como requisito parcial para obtenção do Grau de Mestre em Engenharia.

Comissão Examinadora:

Prof. Dr^a. Ligia Damasceno Ferreira Marczak

Prof. Dr. André Rodrigues Muniz

Prof. Dr^a. Manuela Longoni de Castro

Grandes realizações não são feitas por impulso, mas por uma soma de pequenas realizações.

Vicent Van Gogh

Agradecimentos

Agradeço aos professores Álvaro Luiz de Bortoli e Nilson Romeu Marcílio pela orientação e auxílio prestados no desenvolvimento deste trabalho.

Agradeço aos meus pais pelo incentivo dado no decorrer do mestrado.

Agradeço aos meus colegas da FEPAM, especialmente a Dr^a Elba Calesso Teixeira por todo apoio fornecido.

Resumo

Os processos de conversão de energia tendem a considerar cada vez mais restrições econômicas e ambientais, tornando-se necessário o entendimento da interação entre combustão e turbulência. Este trabalho tem como objetivo o desenvolvimento de soluções analíticas para a fração de mistura de uma chama difusiva, sob forma de um jato turbulento axissimétrico. Foi desenvolvida, também, uma metodologia analítico-numérica para a determinação das frações mássicas dos componentes, considerando uma reação de combustão de dois passos. Os resultados foram comparados com dados experimentais encontrados na literatura para uma chama de hidrogênio H_2/N_2 (50/50% em volume). De modo geral, os resultados obtidos foram satisfatórios frente aos dados experimentais, sendo a principal limitação o fato das expressões analíticas obtidas não serem capazes de representar o jato próximo à saída do bocal, sendo válidas a partir de, aproximadamente, $x/d > 10$, onde x é a coordenada ao longo do comprimento do jato. A principal vantagem do método empregado neste trabalho é a diminuição da complexidade do sistema de equações a ser resolvido numericamente.

Palavras-chave: Chamas Difusivas, Fração de Mistura, Soluções Analítico-numérica

Abstract

The energy conversion processes tend to consider even more economical and environmental constraints, making it necessary to understand the interaction between combustion and turbulence. This study aims at the development of analytical solutions for the mixture fraction of a diffusive flame in the form of an axisymmetric turbulent jet. It was also considered an analytical-numerical approach for the determination of the mass fractions of the compounds, for a two-step reaction. The results were compared with data found in literature for a hydrogen flame H_2/N_2 (50/50 % by volume). Overall, the results were satisfactory when compared with the experimental data, however the principal limitation was the fact that the analytical expressions were not able to represent the jet near the nozzle exit, being the solution valid from, approximately, $x/d > 10$, where x is the coordinate along the jet length. The main advantage of the method employed in this work is the decrease in the complexity of the equations system to be solved numerically.

Key-words: Diffusive Flames, Mixture Fraction, Analytical-numerical Solutions

Sumário

1	Introdução	1
2	Revisão Bibliográfica	3
3	Definição do Problema	13
3.1	Turbulência	13
3.1.1	Definição	13
3.1.2	Escalas de Turbulência	14
3.1.3	Escoamentos cisalhantes livres	16
3.2	Chamas	17
3.3	Equações Governantes	22
3.3.1	Continuidade	24
3.3.2	Quantidade de Movimento	24
3.3.3	Energia	25
3.3.4	Fração de Mistura	26
4	Metodologia	28
4.1	Formulação Analítica	28
4.1.1	Aproximação por série de Taylor truncada no 2º termo	32
4.1.2	Aproximação por série de Taylor truncada no 3º termo	35
4.2	Solução de Burke-Schumann	38
4.3	Solução Analítico-Numérica	39
4.3.1	Discretização em Diferenças Finitas	44
5	Resultados	47

<i>SUMÁRIO</i>	viii
5.1 Resultado Analítico	47
5.2 Resultado Analítico-Numérico	50
6 Conclusões e Perspectivas	54
Referências Bibliográficas	56

Lista de Figuras

2.1	Representação das camadas de desenvolvimento de um jato turbulento circular axissimétrico ao longo da coordenada axial	12
2.2	Representação das camadas de um jato turbulento circular axissimétrico ao longo da coordenada radial	12
3.1	Desenvolvimento espacial da camada de mistura. (Brown e Roshko, 1974)	18
3.2	Esteira turbilhonar a jusante de uma esfera (Faber, 1995)	18
3.3	Definição esquemática de um jato planar turbulento (Adaptado de Rajaratnam (1976))	18
3.4	Representação esquemática de esteira, jato e camada de mistura planares (Adaptado de Tennekes e Lumley (1972))	19
3.5	Representação de uma chama pré-misturada	20
3.6	Representação de uma chama difusiva	20
4.1	Representação esquemática de uma chama difusiva	29
5.1	Comparação entre a fração de mistura analítica e a experimental ao longo da linha de centro do jato, utilizando a viscosidade turbulenta de Agrawal e Prasad (2003)	48
5.2	Comparação entre a fração de mistura analítica e a experimental para $x = 20d$, utilizando a viscosidade turbulenta de Agrawal e Prasad (2003)	49
5.3	Comparação entre a fração de mistura analítica e a experimental para $x = 40d$, utilizando a viscosidade turbulenta de Agrawal e Prasad (2003)	49
5.4	Comparação entre a fração de mistura analítica e a experimental para $x = 60d$, utilizando a viscosidade turbulenta de Agrawal e Prasad (2003)	50
5.5	Comparação de \tilde{Z}_1 e \tilde{Z}_2 com dados experimentais ao longo da linha de centro do jato	51
5.6	Comparação de \tilde{Z}_1 e \tilde{Z}_2 com dados experimentais para $x/d = 20$	52

5.7	Comparação de \tilde{Z}_1 e \tilde{Z}_2 com dados experimentais para $x/d = 40$	52
5.8	Comparação entre a temperatura com dados experimentais	53

Lista de Símbolos

- c = Parâmetro da equação da viscosidade turbulenta
 C = Parâmetro de Chapman-Rubesin
 c_p = Calor específico a pressão constante
 d = Diâmetro do bocal de saída do jato
 D = Difusividade
 F = Função corrente adimensional
 h_i = Entalpia do composto i
 Le = Número de Lewis
 Pr = Número de Prandtl
 Q = Calor de reação
 q_r = Taxa de calor radiativo por volume
 r = Coordenada ao longo do raio do jato
 r_i = Taxa de geração do componente i por volume
 \bar{r} = Coordenada radial ponderada pela massa específica
 Sc_i = Número de Schmidt do componente i
 t = Tempo
 T = Temperatura
 \tilde{T} = Temperatura na média de Favre
 u_0 = Velocidade de saída do jato pelo bocal
 \tilde{u} = Velocidade axial na média de Favre
 \tilde{v} = Velocidade radial na média de Favre
 u'', v'' = Componentes flutuantes da velocidade
 W_i = Fração molar do composto i
 x = Coordenada ao longo do comprimento do jato
 Y_i = Fração mássica do composto i
 \tilde{Y}_i = Fração mássica do composto i na média de Favre
 \tilde{Z} = Fração de mistura na média de Favre
 \tilde{Z}_{cl} = Fração de mistura ao longo da linha de centro da chama na média de Favre
 ζ, η = Coordenadas utilizadas na transformação de similaridade

- λ = Condutividade térmica
- ν_t = Viscosidade turbulenta
- ν_{tr} = Viscosidade turbulenta de um jato com massa específica constante
- ρ_0 = Massa específica do combustível
- ρ_∞ = Massa específica do oxidante
- $\bar{\rho}$ = Massa específica na média de Reynolds
- v_i = Coeficiente estequiométrico do componente i
- ψ = Função corrente
- ω = Fração de mistura normalizada

Capítulo 1

Introdução

Desde os primórdios da humanidade, o fogo é utilizado pelo homem para as mais diversas finalidades. Várias civilizações observaram e especularam sobre este fenômeno desde tempos remotos.

Os povos antigos enxergavam o fogo como uma manifestação dos deuses. Os gregos interpretavam a combustão em termos de doutrinas filosóficas, acreditando que um certo "princípio inflamável" estaria contido em todos os materiais combustíveis, sendo liberado durante o processo de combustão.

Uma das primeiras teorias científicas para tentar explicar o fenômeno da combustão foi desenvolvida pelo químico e médico alemão Georg Ernst Stahl entre 1703 e 1731. Segundo Stahl, os corpos combustíveis possuíam uma matéria chamada flogisto, que era liberada ao ar pelos processos de combustão e calcinação. De acordo com essa teoria, as substâncias combustíveis eram ricas em flogisto, e o ar atuava absorvendo esse composto durante a queima. A teoria de Stahl foi aceita por membros da comunidade científica da época, perdurando até o final do século XVIII (Gregory, 1934).

Os principais opositores da teoria de Stahl apontavam para o fato de que alguns metais, como o magnésio, ganhavam massa após serem oxidados, o que era inviável sob a ótica dessa teoria, uma vez que eles teriam perdido flogisto. No entanto, a teoria do flogisto só foi amplamente refutada após o trabalho do químico francês Antoine Lavoisier por volta de 1772. Lavoisier, baseando-se na descoberta do oxigênio por Josef Priestley, determinou, por meio de experimentos, que a combustão era um processo reativo entre o combustível e o ar; e o aumento de massa dos metais quando oxidados era igual à massa do oxigênio consumido na formação do óxido. Dessa maneira, surgia a primeira aproximação da verdadeira natureza da combustão.

Os estudos de John Dalton sobre a estrutura atômica em 1808 e o descobrimento dos gases nitrogênio, dióxido de carbono e monóxido de carbono ajudaram a sedimentar a teoria de Lavoisier. Apesar destas descobertas, a teoria materialista da combustão carecia de um conceito claro sobre energia e a sua relação com a combustão. O desenvolvimento da teoria cinética dos gases, termodinâmica e termoquímica no século XIX finalmente elucidaram os aspectos energéticos da combustão. O surgimento da espectroscopia, incluindo a teoria de espectros atômicos e moleculares, contribuíram para a

compreensão da natureza das chamas.

Atualmente a combustão é indispensável para o funcionamento da civilização moderna, sendo utilizada em inúmeras aplicações como nos setores de transporte, doméstico, industrial e de serviços.

Devido a problemas de poluição ambiental e aquecimento global advindos principalmente da queima de combustíveis fósseis, os processos de conversão de energia tendem a considerar cada vez mais restrições econômica e ambientais, tornando-se necessário o entendimento das interações entre combustão e turbulência.

Neste trabalho, analisa-se uma formulação conveniente baseada na fração de mistura, objetivando-se o desenvolvimento de soluções analíticas simplificadas para a fração de mistura de chamas difusivas turbulentas, sob a forma de um jato axissimétrico.

Considerou-se, também, neste estudo, o desenvolvimento de soluções analítico-numéricas para as frações mássicas dos componentes da reação de combustão, através da decomposição da fração de mistura em partes constitutivas, considerando uma reação de dois passos para uma chama de hidrogênio. A principal vantagem da metodologia adotada neste estudo consiste na diminuição do trabalho numérico necessário para resolver o sistema de equações governantes.

Este trabalho dividi-se em seis capítulos:

- O Capítulo 1 salienta a importância da combustão e explica os objetivos da tese.
- O Capítulo 2 descreve parte da bibliografia consultada referente à escoamentos turbulentos e desenvolvimento de soluções para chamas.
- No Capítulo 3, são apresentados alguns conceitos básicos referente ao escoamento de jatos turbulentos e chamas difusivas, bem como as equações diferenciais governantes.
- No Capítulo 4, apresenta-se as metodologias utilizadas, sendo dividido em duas partes: (i) descrição da metodologia analítica utilizada para o cálculo simplificado da fração de mistura, (ii) apresentação da metodologia analítico-numérica para o cálculo dos componentes da reação de combustão, mediante a decomposição da fração de mistura, para uma reação de combustão de hidrogênio de dois passos.
- O Capítulo 5 compara os resultados analíticos e analítico-numéricos com dados obtidos na literatura.
- O Capítulo 6 mostra as conclusões e perspectivas deste trabalho.

Capítulo 2

Revisão Bibliográfica

Neste capítulo, será apresentada parte da bibliografia consultada relativa à escoamentos turbulentos e desenvolvimento de soluções analíticas e numéricas para chamas, dando ênfase à geometria de jatos.

Chervinsky e Manheimer-Timnat (1969) estudaram equações de conservação de quantidade de movimento, energia e massa para uma chama axissimétrica, considerando o número de Lewis (razão entre as difusividades térmica e mássica) como unitário no plano de Von Mises, que corresponde a uma transformação de coordenadas, passando do plano (x, t) para (ψ, s) , onde $\psi = \int_0^x \rho dx$ e $s = t$. A variável ρ corresponde a massa específica média da mistura gasosa. Os autores determinaram os coeficientes de troca turbulenta, desenvolvendo expressões para o comprimento e formato da chama. Os resultados analíticos de velocidade e temperatura foram comparados com dados experimentais de gás liquefeito de petróleo, obtendo-se resultados razoáveis.

Liñán (1974) desenvolveu expressões analíticas aproximadas para a temperatura em função do número de Damköhler em chamas difusivas do tipo contra-corrente, considerando uma reação de combustão de um único passo e irreversível. O autor obteve expressões para a temperatura da chama em termos de cinco parâmetros: Da (número de Damköhler), T_α (energia de ativação adimensional), T_∞ (temperatura adimensional do oxidante), $\beta = (T_\infty - T_{-\infty})$ e $\alpha = \left(\frac{Y_{O_\infty}}{vY_{F-\infty}} \right)$.

Eickhoff e Grethe (1979) desenvolveram e testaram modelos para uma chama não confinada, assumindo uma estrutura quase-laminar, combinada com uma função densidade de probabilidade (FDP) representante da concentração de combustível no jato. A mistura turbulenta foi calculada através de uma abordagem semi-empírica.

Os resultados do modelo foram comparados com dados experimentais e modelos de equilíbrio, mostrando desvios consideráveis dos mesmos. De acordo com os autores, esses desvios são decorrentes do modelo não considerar as espécies intermediárias da reação, e superestimar as concentrações dos componentes quando comparado com o modelo de equilíbrio químico.

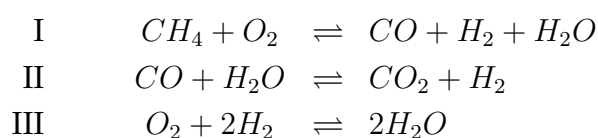
Peters e Donnerhack (1981) obtiveram expressões algébricas para a taxa de produção de monóxido de nitrogênio em uma chama turbulenta. Os autores utilizaram como base as equações da continuidade, quantidade de movimento e fração de mistura na média Favre (média ponderada pela massa específica). Os autores aplicaram, a essas equações, uma transformação de similaridade combinada com uma função densidade de probabilidade e uma expansão assintótica para altas energias de ativação na reação de obtenção de NO. Os resultados analíticos foram comparados com dados experimentais de concentração de NO para diferentes tipos de chama: H₂, CH₄, C₃H₈, gás natural e mistura CO/H₂.

Os autores identificaram uma dependência do diâmetro do jato na comparação dos dados analíticos com os experimentais, o que indica uma influência da escala de comprimento turbulento, e chegaram à conclusão de que grandes estruturas coerentes podem ser responsáveis por uma redução na produção de NO nas chamas estudadas neste trabalho.

Eickhoff (1982) analisou chamas de hidrocarbonetos sob a forma de jatos turbulentos, considerando-as como uma combinação de chamas laminares rugosas, obtendo informações úteis sobre os detalhes do processo de combustão através do estudo das interfaces reativo-difusiva.

O autor concluiu que, devido à liberação de calor na região de maior cisalhamento do jato, estruturas de fluxo ordenado são mais pronunciadas em jatos de chamas de hidrocarbonetos do que em jatos não reativos, sendo que a liberação de calor na região de maior cisalhamento influencia o desenvolvimento de turbulência na região inicial da chama. O autor ainda inferiu que a influência dos gradientes de massa específica no campo de fluxo turbulento é negligenciável na maior parte das chamas difusivas.

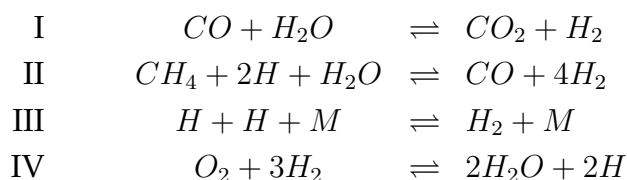
Peters e Williams (1987) analisaram a estrutura assintótica de chamas pré-misturadas de metano. Os autores desenvolveram uma redução do mecanismo de reações elementares C₁ mediante hipóteses de estado estacionário para compostos com baixas concentrações, eliminando as reações cuja velocidade apresenta ordens de magnitude mais elevadas. Dessa maneira, obtiveram o seguinte mecanismo de três passos para chama de metano:



Os autores concluíram que a estrutura assintótica básica de chamas pré-misturadas de metano pode ser obtida a partir deste mecanismo para pressões e temperaturas suficientemente altas, de modo que o número de Damköhler das reações II e III seja elevado. A reação I, onde há oxidação do metano, ocorre em uma camada extremamente fina, englobada entre uma camada quimicamente inerte a montante, e uma camada maior, mas ainda assintoticamente fina, a jusante, onde o H₂ e o CO são oxidados. A estrutura assintótica utilizada neste estudo depende da competição entre os coeficien-

tes de taxas de reação, já que as energias de ativação das equações mais relevantes do ponto de vista cinético não são elevadas.

Seshadri e Peters (1990) analisaram a estrutura de um jato de chama pré-misturada de metano, obtendo um mecanismo de reação reduzido de quatro passos, dado por:



Na formulação analítica desenvolvida pelos autores, há presença de um parâmetro ω , que representa a razão entre a espessura da camada de consumo de combustível com a de consumo de radicais livres. Foram desenvolvidas soluções analíticas para o autovalor da velocidade de queima (L), entre os limites $\omega \rightarrow 0$ e $\omega \rightarrow \infty$. Para a obtenção de expressões analíticas, os autores expressaram L como função de ω , sendo que esta função possui diversos parâmetros que representam a influência das reações elementares.

Utilizando as expressões obtidas nessa análise, os autores calcularam a velocidade de queima de uma chama de metano estequiométrica para pressões entre 1 e 80 atm, situando-se razoavelmente próximo dos dados experimentais. À medida que os autores utilizaram pressões mais elevadas, a velocidade de queima decresceu, novamente de acordo com os dados experimentais. Esta análise corresponde a uma expansão do trabalho de Peters e Williams (1987).

Peters e Göttgens (1991) determinaram soluções analíticas aproximadas para o comprimento de jatos verticais de chama em função do número de Froude. Este número corresponde a razão entre uma velocidade característica e a velocidade de onda gravitacional, separando os escoamentos sub-críticos ($Fr < 1$) dos super-críticos ($Fr > 1$).

Os pesquisadores utilizaram perfis aproximados para a velocidade e fração de mistura, bem como, a utilização de uma equação diferencial simples para a largura do jato, decorrente da troca turbulenta que ocorre nas fronteiras do mesmo.

Os autores concluíram que, em regimes governados pela flutuabilidade, o comprimento do jato possui uma dependência assintótica com o número de Froude da ordem $Fr^{1/5}$, enquanto que, para regimes governados pela quantidade de movimento, o comprimento do jato é independente do número de Froude.

Kennel, Göttgens e Peters (1991) estudaram a estrutura das chamas de propano pobres em combustível. Partindo de um mecanismo de 88 reações elementares, os autores obtiveram uma mecanismo de 4 passos para a combustão de propano.

Aproveitando a análise assintótica realizada anteriormente para chamas de metano (Peters e Donnerhack, 1981), deduziram expressões simplificadas para a temperatura

interna e velocidade de queima da chama, Foi analisada a variação da velocidade de queima frente a mudanças na temperatura dos gases da mistura queimada, a fim de determinar a energia de ativação global.

Göttgens, Mauss e Peters (1992) desenvolveram aproximações analíticas para velocidade de queima e espessura de chamas pobres pré-misturadas de hidrogênio, metano, etileno, etano, acetileno e propano. Os autores utilizaram um mecanismo cinético composto por 82 reações elementares, sendo realizadas computações numéricas para pressões entre 1 e 40 bar e temperatura inicial da mistura não queimada entre 298K e 800K.

Baseado na análise assintótica de Peters e Donnerhack (1981), os autores realizaram um ajuste de curva de modo a obter uma expressão analítica para a velocidade de queima da chama. Essa função foi capaz de prever a velocidade com um desvio padrão inferior a 7,6%.

Chen et al. (1996) estudaram a estrutura fenomenológica de chamas turbulentas pré-misturadas de metano-ar em um bico de Bunsen. Medidas de velocidade, temperatura e concentração de espécies químicas foram realizadas com um anemômetro a laser-Doppler, termometria Rayleigh e fluorescência induzida por plano laser, respectivamente.

Os autores concluíram que uma chama pré-misturada interage diretamente com o campo de fluxo turbulento, respondendo as escalas de tempo e comprimento, impostas por este fluxo, com um aumento ou decréscimo da área da chama.

Diversos regimes de combustão podem ser identificados com a ajuda de diagramas em termos de comprimentos e velocidades características. Vários desses regimes estão descritos na literatura, como Bray (1980), Williams (1985), Peters (1986), entre outros, e podem ser caracterizados de acordo com os números adimensionais de Reynolds (Re), Damköhler (Da) e Karlovitz (Ka). O número de Damköhler corresponde a razão entre a escala de tempo turbulento (τ_t) e a escala de tempo da reação química (τ_c). O número de Karlovitz corresponde a razão entre a escala de tempo da reação química (τ_c) e a menor escala de tempo turbulento, chamada de escala de tempo de Kolmogorov (τ_η).

Os autores analisaram a chama para velocidades de saída do bocal de 65, 50 e 30 m/s. Nos três casos, o regime de chama situou-se na zona de distribuição reativa, sendo que a reação química não foi rápida o suficiente para queimar os grandes vórtices.

Amielh et al. (1996) analisaram o campo de velocidade de jatos turbulentos, procurando identificar a influência da massa específica na estrutura do jato. As medidas de velocidade foram realizadas por um anemômetro à laser Doppler, para jatos de hélio, ar e dióxido de carbono.

Os autores concluíram que a relação inicial entre a massa específica do combustível e do oxidante (ρ_0/ρ_∞) afeta fortemente o desenvolvimento dos jatos utilizados neste estudo. No estado assintótico, a velocidade na linha de centro teve bastante influência

desse parâmetro, enquanto os níveis de turbulência sofreram muito pouca influência. Fatores como o número de Reynolds, confinamento e contrafluxo de ar também afetaram o desenvolvimento do jato, porém em uma escala menor.

Lubbers et al. (2001) estudaram a auto-similaridade de um jato turbulento. A teoria de similaridade possui como premissa que, quando corretamente dimensionadas, variáveis de fluxo, como o perfil de velocidades médias, podem ser expressas em termos de uma função única para cada ponto a jusante ao longo do eixo do jato.

Os autores realizaram simulação numérica direta (DNS) de um jato turbulento em combinação com a mistura de um escalar passivo no jato. Por escalar passivo, estende-se como uma substância que é transportada pelo jato sem alterar o seu campo de velocidades. Os resultados para as médias de Reynolds e flutuações turbulentas de concentração estiveram de acordo com dados experimentais. Eles concluíram que a concentração média possui uma auto-similaridade geral, enquanto as flutuações turbulentas da concentração não apresentam auto-similaridade.

Chassaing (2001) analisou diversos modelos para a viscosidade turbulenta (ν_t) em fluxos turbulentos cisalhantes, levando em consideração as influências da massa específica variável e do número de Mach sobre o modelo.

Foram analisados três tipos de modelos: (i) modelos baseados na variação da massa específica, com ajustes de compressibilidade realizados em modelos incompressíveis; (ii) modelos que utilizam termos de dilatação escritos explicitadamente para representar os efeitos compressíveis; (iii) modelos onde os efeitos da variação de massa específica são tratados implicitamente em associação com as mudanças estruturais do campo turbulento. O autor chegou as seguintes conclusões, entre outras:

- Em fluxos de baixa velocidade, não reativos, variações na massa específica surgem devido a mudanças na temperatura ou composição que podem produzir altos níveis de variação de massa específica $\left(\sqrt{\rho'^2/\bar{\rho}}\right)$ em fluxos turbulentos. Neste caso, para a obtenção de equações médias são desenvolvidas equações onde aparece o termo de flutuação turbulenta da massa específica. Fluxos cisalhantes não confinados podem ser descritos utilizando equações similares a de fluxos incompressíveis, porém fornecendo equações de fechamento adequadas para a flutuação da massa específica
- Em camadas limites a elevadas velocidades, com números de Mach supersônicos, os efeitos de flutuação turbulenta da massa específica e pressão na parede, sob condições adiabáticas, são pequenos. Neste caso, os efeitos compressíveis são, na maior parte dos casos, devido a variações na temperatura e massa específica médias (Reynolds ou Favre).

Agrawal e Prasad (2003) desenvolveram soluções analíticas para o perfil de velocidade de jatos, plumas e esteiras. Para o desenvolvimento de soluções analíticas na região de auto-similaridade, o primeiro passo, geralmente, é realizar uma análise da ordem de magnitude dos termos da equação de Navier-Stokes, aplicando a hipótese

de camada limite para redução do número de termos da equação. Os termos resultantes são dimensionados utilizando as escalas adequadas de comprimento, velocidade e temperatura. Utilizando a equação de conservação de quantidade de movimento obtém-se as variações axiais de largura, velocidade axial e temperatura (Tennekes e Lumley, 1972). No entanto, seguindo essa análise, não é possível obter as variações transversais dessas quantidades, pois o número de variáveis desconhecidas ultrapassa o número de equações. Uma aproximação possível para fechar o sistema de equações seria assumir a viscosidade turbulenta (ν_t) constante (Tennekes e Lumley, 1972).

O trabalho realizado por Agrawal e Prasad vai na direção oposta à metodologia de Tennekes e Lumley (1972), selecionando uma expressão para a velocidade axial de modo a completar o sistema de equações, e obtendo expressões analíticas para velocidade, temperatura e viscosidade turbulenta. Para jatos e esteiras, as equações governantes utilizadas pelos autores foram as equações de continuidade e conservação de quantidade de movimento na direção axial. Para plumas foi necessário considerar a conservação de energia para fechar o sistema de equações.

Os autores desenvolveram as expressões na média de Favre, realizando as seguintes considerações:

- Estado estacionário.
- Desprezou-se a variação da massa específica.
- Desprezaram-se os efeitos do gradiente de pressão.
- Na equação do movimento, desprezou-se a componente de tensão viscosa ($\overline{\tau_{j,i}}$) comparado à tensão de Reynolds ($\overline{\rho V_j V_i}$).
- A tensão de Reynolds foi modelada considerando a hipótese de gradiente do transporte (Peters, 1992). Com essa consideração, foi possível obter o termo de viscosidade turbulenta (ν_t) a partir dos valores de velocidade axial e tensão de Reynolds.

$$\overline{U''V''} = -\nu_t \frac{\partial \tilde{U}}{\partial r} \quad (2.1)$$

- Desprezou-se a troca térmica por radiação.
- Na equação diferencial para a temperatura, desprezou-se o termo de transporte molecular quando comparado ao transporte turbulento ($\overline{\rho V_j T}$).

Os autores seguiram basicamente os seguintes passos:

- Assumiram uma expressão analítica para a velocidade axial média \tilde{U} , baseados em dados experimentais. O tipo de curva escolhido foi uma função gaussiana, cujo perfil melhor se adequou aos pontos experimentais.
- A expressão para \tilde{U} foi substituída na equação da continuidade, sendo a expressão resultante integrada para a determinação da velocidade radial \tilde{V} .
- As expressões para as velocidades axial e radial, \tilde{U} e \tilde{V} , foram substituídas na equação de quantidade de movimento simplificada, e integradas para a obtenção

da tensão de Reynolds.

- De posse das expressões para as velocidades e tensão de Reynolds, obtiveram a expressão para a viscosidade turbulenta.
- Para o caso da pluma, os autores calcularam a difusividade térmica turbulenta (γ_t), e o n° de Prandtl turbulento (Pr_t).

No caso de um jato axissimétrico, a expressão para a velocidade axial utilizada pelos autores foi

$$\tilde{U}(r, z) = U_c(z) \exp(-\xi^2), \quad \xi = \frac{r}{c z} \quad (2.2)$$

onde c corresponde a um parâmetro empírico, enquanto z e r correspondem as coordenadas axiais e radiais, respectivamente.

Resolvendo as equações da Continuidade e Quantidade de Movimento simplificadas, equações (2.3) e (2.4), os autores obtiveram expressões analíticas para a velocidade radial, tensão de Reynolds e viscosidade turbulenta, mostradas nas equações (2.5), (2.6) e (2.7), respectivamente.

$$\frac{1}{r} \frac{\partial (r\tilde{V})}{\partial r} + \frac{\partial \tilde{U}}{\partial z} = 0 \quad (2.3)$$

$$V \frac{\partial \tilde{U}}{\partial r} + U \frac{\partial \tilde{U}}{\partial z} + \frac{1}{z} \frac{\partial (r\widetilde{U''V''})}{\partial r} = 0 \quad (2.4)$$

$$\frac{\tilde{V}}{U_c} = \frac{c}{2\xi} (-1 + \exp(-\xi^2) + 2\xi^2 \exp(-\xi^2)) \quad (2.5)$$

$$\frac{\widetilde{U''V''}}{U_c^2} = \frac{c}{2\xi} (\exp(-\xi^2) - \exp(-2\xi^2)) \quad (2.6)$$

$$\frac{\nu_t}{U_c c z} = \frac{c}{4} \frac{(1 - \exp(-\xi^2))}{\xi^2} \quad (2.7)$$

Os autores concluíram, por fim, que as variações transversais das grandezas turbulentas de viscosidade, difusividade térmica e n° de Prandtl são significativas.

Klein, Sadiki e Janicka (2003) estudaram a influência do número de Reynolds em um jato planar, utilizando simulação numérica direta (DNS). Os autores utilizaram as equações da continuidade e de Navier-Stokes para escoamento incompressível, aplicando o método dos volumes finitos nas simulações numéricas. Como condição de contorno, os autores consideraram uma velocidade média na saída do jato, dada por:

$$\bar{U} = \frac{U_0}{2} + \frac{U_0}{2} \tanh \left(\frac{-|z| + \frac{D}{2}}{2\theta} \right) \quad (2.8)$$

onde, z corresponde a coordenada ao longo da altura do jato, D corresponde a altura do bocal e θ corresponde a espessura de momento, considerada igual a $D/20$ pelos autores.

Eles concluíram que há uma forte influência do número de Reynolds no desenvolvimento de jatos planares para $Re \leq 6000$. Outra conclusão desses autores foi a existência de uma forte influência das condições de saída do jato em $x = 0$, citando, como exemplo, a ocorrência de uma taxa de espalhamento do jato entre 0,08 para um perfil tipo "canal", e superior a 0,106 para um perfil "top hat" (perfil no qual a velocidade é nula em $r > R$, e constante para $r \leq R$, sendo R o raio do bocal de saída do jato).

Remie et al. (2006) analisaram a estrutura de uma chama pré-misturada do tipo Bunsen após a expansão da frente de chama. Os autores obtiveram relações entre o raio do jato e as velocidades da mistura não queimada e do jato de chama, e também desenvolveram expressões para a largura do jato. Algumas simplificações foram realizadas, desprezando-se gradientes na direção radial, efeitos de estiramento, curvatura da chama e flutuabilidade.

Os autores compararam os resultados obtidos pelo modelo com dados experimentais para chamas com diferentes frações de oxigênio na corrente de oxigenação. Para chamas de metano-ar e metano-oxigênio, os dados experimentais estiveram de acordo com os dados do modelo. No entanto, para chamas de metano-ar ricas em oxigênio, foram obtidos desvios consideráveis do modelo em relação aos dados experimentais. Segundo os autores, tais desvios foram obtidos em casos no qual a área da região da ponta da chama é relativamente grande quando comparada com a área total da chama, o que ocorreu nas chamas de metano-ar ricas em oxigênio.

Gokarn et al. (2006) realizaram simulações numéricas bidimensionais para a evolução de uma camada de mistura, em uma estrutura tipo canal com duas placas separadoras na entrada. Os autores investigaram o desenvolvimento das camadas de cisalhamento, realizando simulações que capturaram as estruturas de vórtices de larga escala formados no bordo de fuga das placas separadoras, incluindo a influência dessas camadas de cisalhamento a jusante do canal.

Os pesquisadores concluíram que, de modo geral, a mistura aumenta para velocidades maiores, como resultado do aumento da advecção devido a formação de uma camada de cisalhamento mais intensa. Os autores ainda salientaram que uma análise dos efeitos de turbulência, de modo geral, exigiria simulações tridimensionais nesta geometria.

Fellouah, Ball e Pollard (2009) investigaram os efeitos do número de Reynolds no desenvolvimento de um jato turbulento circular axissimétrico. Um jato circular axissimétrico pode ser dividido em três regiões ao longo de sua coordenada axial: (i) uma região próxima da origem do jato, conhecida na literatura como "near field region"; (ii) uma região intermediária ("intermediate field region"); (iii) e uma região distante da origem ("far field region").

Na região próxima à origem do jato, as características do fluxo são similares ao perfil apresentado na saída do bocal. De acordo com Fiedler (1988), essa região situa-se, geralmente, em $0 \leq x/D \leq 6$. A região distante da origem, aproximadamente em $x/D \geq 30$ (Fiedler, 1988), é completamente desenvolvida e apresenta auto-similaridade.

Um esquema ilustrativo das três regiões de um jato turbulento circular pode ser visto na Figura 2.1.

Ao longo de sua coordenada radial, o jato também pode ser dividido em três regiões, chamadas de: (i) região da linha de centro ("centerline region"); (ii) camada de cisalhamento ("shear layer"); (iii) camada externa ("outer layer").

A região da linha de centro corresponde ao conjunto de pontos onde a velocidade axial é máxima ao longo da coordenada radial. Na camada de cisalhamento, há formação de vórtices que se desenvolvem e se aglomeram formando turbilhões maiores, devido ao alto gradiente de velocidades na direção radial. Esses turbilhões se quebram formando turbilhões menores à medida que a escala de turbulência decresce. A Figura 2.2 mostra um esquema dessas três regiões.

Os autores realizaram experimentos nestas regiões, concluindo que os efeitos do número de Reynolds no jato dependem da região analisada. Próximo do bocal de saída do jato, a espessura da camada limite decresce levemente com o número de Reynolds. Na região à jusante da origem do jato, a variação da velocidade média na linha de centro independe do número de Reynolds. À medida que o jato se desenvolve na direção axial, a velocidade média axial se aproxima mais rapidamente da auto-similaridade quando comparada com as intensidades de turbulência, como a tensão de Reynolds.

Veser et al. (2011) analisaram experimentalmente o perfil de velocidades e concentrações de uma chama turbulenta, com hidrogênio como combustível. Os autores consideraram a situação hipotética de rompimento de um duto transportando hidrogênio líquido pressurizado, realizando simulações para o jato de hidrogênio na temperatura ambiente (293 K) e em temperaturas criogênicas (80 e 35 K), de maneira a estimar as consequências desse tipo de acidente.

Os pesquisadores realizaram duas séries de experimentos: a primeira considerando somente o desenvolvimento do jato, sem combustão; a segunda com a ignição do jato após o escoamento ter alcançado o estado estacionário. Verificaram que, para uma concentração inicial de hidrogênio $> 11\%$, a chama se propaga em ambas as direções, a montante e a jusante do jato. Já para concentrações $< 11\%$ a chama se propaga somente a jusante. Os autores concluíram que, à temperatura ambiente, a chama é capaz de se desenvolver rapidamente e de forma eficaz somente se o coeficiente de expansão da mistura hidrogênio-ar (razão entre as massas específicas da mistura queimada e não queimada) for superior a 3,75.

No presente trabalho, serão determinadas expressões analíticas simplificadas para a fração de mistura de chamas difusivas turbulentas, utilizando a transformação de similaridade aplicada por Peters e Donnerhack (1981), e considerando a expressão semiempírica obtida por Agrawal e Prasad (2003) para a viscosidade turbulenta, que varia ao longo do comprimento e do raio da chama. No próximo capítulo serão apresentados alguns conceitos básicos relacionados com jatos turbulentos e chamas difusivas, sendo mostradas as equações diferenciais governantes utilizadas neste trabalho.

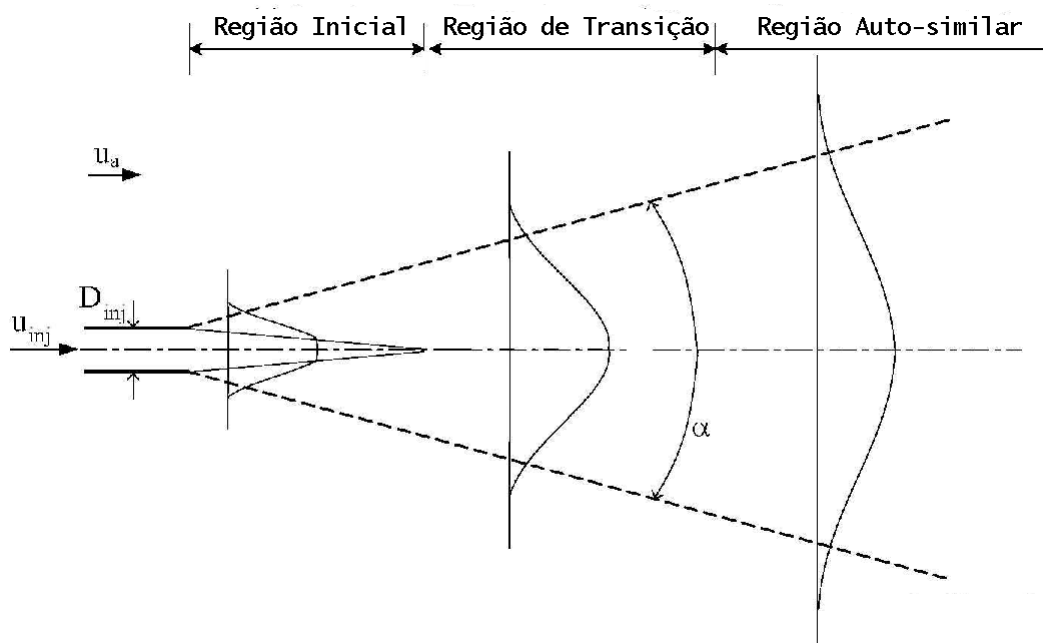


Figura 2.1: Representação das camadas de desenvolvimento de um jato turbulento circular axissimétrico ao longo da coordenada axial

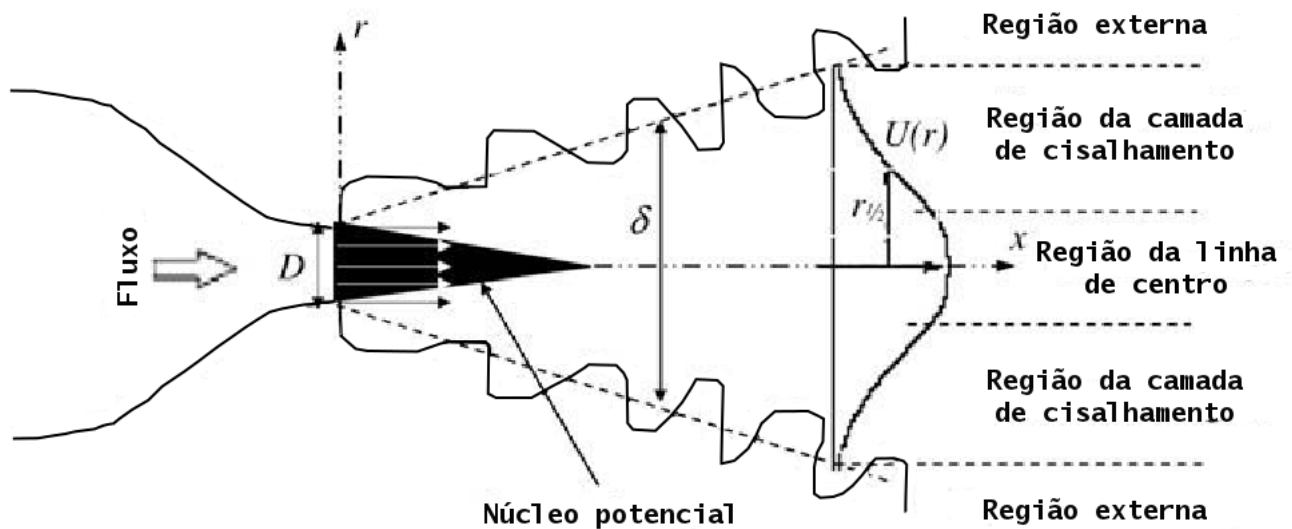


Figura 2.2: Representação das camadas de um jato turbulento circular axissimétrico ao longo da coordenada radial

Capítulo 3

Definição do Problema

Nesse capítulo serão discutidos alguns tópicos básicos envolvendo escoamento de jatos turbulentos e chamas difusivas.

3.1 Turbulência

3.1.1 Definição

A maior parte dos regimes de escoamento que ocorrem na natureza e em aplicações de engenharia são turbulentos. Alguns exemplos usuais são: camada limite atmosférica (exceto em casos de atmosfera muito estável); escoamento de gás natural e óleos em oleodutos e gasodutos; fluxo de água em rios e canais; escoamento de fluidos em bombas e turbinas.

O estudo da turbulência é claramente uma atividade interdisciplinar, que possui uma ampla gama de aplicações. Em dinâmica dos fluidos, fluxo laminar é a exceção, não a regra, pois deve-se ter dimensões pequenas e viscosidades altas para se encontrar fluxos laminares (Tennekes e Lumley, 1972).

Hinze (1959) define a turbulência como uma condição irregular de escoamento em que as diversas quantidades envolvidas mostram uma variação aleatória com as coordenadas de tempo e espaço, que podem ser diferenciadas estatisticamente dos seus valores médios.

O escoamento turbulento possui algumas características marcantes, ou seja:

- Irregularidade: o fluxo turbulento é caótico. Diversas grandezas como velocidade, temperatura e pressão apresentam flutuações que se sobrepõem ao valor médio de cada propriedade.
- Difusividade: a turbulência possui uma grande capacidade de mistura. O escoamento turbulento aumenta as taxas de transferência de massa, calor e quantidade de movimento. Essa característica é importante em inúmeras aplicações.

- Número de Reynolds elevado: o fluxo turbulento origina-se, geralmente, a partir de uma instabilidade em um escoamento laminar quando o número de Reynolds é suficientemente elevado. Essa instabilidade está relacionada com interações entre os termos viscosos e os termos de inércia não lineares provenientes das equações de quantidade de movimento.
- Flutuações tridimensionais: a turbulência é rotacional e tridimensional, apresentando altos níveis de vorticidade.
- Dissipação: o escoamento turbulento necessita de um suprimento de energia contínuo, caso contrário, a turbulência decai rapidamente à medida que a energia cinética é convertida em energia interna por tensões cisalhantes viscosas.
- Contínuo: a turbulência é um fenômeno contínuo, governada pelas equações da mecânica dos fluidos. Mesmo as menores escalas de turbulência que ocorrem em um escoamento turbulento são maiores que as escalas de tamanho molecular.

As formas mais convencionais de escoamento podem ser classificadas como:

- Escoamentos cisalhantes livres.
- Escoamentos parietais.
- Escoamentos devidos à convecção térmica.
- Escoamentos sob rotação.

3.1.2 Escalas de Turbulência

O campo turbulento de velocidades pode ser representado por turbilhões de diferentes tamanhos. Um turbilhão pode ser descrito como um movimento turbulento, localizado dentro de uma região de dimensão l , que apresenta uma estrutura moderadamente coerente nesta região (Pope, 2000). Entende-se por estrutura coerente como uma região do espaço que, em um determinado momento, tem algum tipo de organização em relação a qualquer quantidade relacionada com o fluxo (velocidade, vorticidade, pressão, densidade, temperatura, etc).

As escalas de turbulência representam a ordem de magnitude das variáveis envolvidas no escoamento. As principais escalas de turbulência estão relacionadas com comprimento, tempo, velocidade, vorticidade e energia.

Kolmogorov definiu as menores escalas significativas que podem ocorrer em um escoamento turbulento. Ele baseou-se na hipótese de que os turbilhões de maior tamanho transferem energia a turbilhões menores, e estes, por sua vez, transferem energia para turbilhões de tamanho ainda menor. Esse processo resulta em uma transferência de energia em forma de cascata, dos turbilhões maiores para os menores, até que a energia dos turbilhões com menor tamanho seja dissipada sob forma de calor por forças viscosas.

Considerando um turbilhão de tamanho característico r e velocidade característica v_r , defini-se um número de Reynolds local, dado pela equação (3.1)

$$Re_r = \frac{v_r r}{\nu} \quad (3.1)$$

onde ν corresponde a viscosidade cinemática do fluido.

A taxa de dissipação viscosa ϵ é um importante parâmetro que representa o fluxo de energia injetado das grandes escalas de turbulência para as pequenas escalas. Essa taxa pode ser descrita pela equação (3.2) (Tennekes e Lumley, 1972)

$$\epsilon = \frac{A v_r^3}{r} \quad (3.2)$$

onde A corresponde a um parâmetro empírico, cujo valor pode ser da ordem de $A \approx 1$ (Lesieur, 2008).

Substituindo a equação (3.2) na (3.1), obtém-se uma expressão para o Reynolds turbulento em função de ϵ (Eq. 3.3).

$$Re_r = \frac{(\epsilon r^4)^{1/3}}{\nu} \quad (3.3)$$

Considerando que, para a escala r analisada, os efeitos viscosos são pequenos, é possível afirmar que $Re > 1$. Caso a dimensão r diminua, o número de Re também diminuirá. Portanto, há um tamanho limite (l_η), no qual, para escalas de comprimento inferior a esse valor, o número de Reynolds torna-se menor do que 1 e os efeitos viscosos passam a dominar sobre os efeitos de inércia. Os turbilhões de tamanhos menores que l_η são dissipados por efeitos viscosos e não conseguem se desenvolver. Esta escala, l_η , corresponde a escala de Kolmogorov para o comprimento, e pode ser escrita de acordo com a equação (3.4).

$$l_\eta = \left(\frac{\nu^3}{\epsilon} \right)^{1/4} \quad (3.4)$$

Realizando-se uma análise dimensional, e expressando o tempo característico em função de ϵ e ν , obtém-se a escala de Kolmogorov para o tempo, descrito pela equação (3.5).

$$\tau_\eta = \left(\frac{\nu}{\epsilon} \right)^{1/2} \quad (3.5)$$

Efetuando-se a razão entre as escalas de comprimento (Eq. 3.4) e tempo (Eq. 3.5), chega-se na expressão para a velocidade na escala de Kolmogorov (Eq. 3.6).

$$v_\eta = (\nu \epsilon)^{1/4} \quad (3.6)$$

A vorticidade de um fluido corresponde a um campo vetorial dado pelo rotacional de velocidades. Desse modo, a vorticidade apresenta dimensão de $tempo^{-1}$.

Utilizando-se a expressão (3.5) para a escala de tempo, é possível determinar a escala de Kolmogorov para a vorticidade, de acordo com a equação (3.7).

$$\omega_\eta = \left(\frac{\epsilon}{\nu}\right)^{1/2} \quad (3.7)$$

Partindo-se do conceito de que a dimensão de energia por unidade de massa é *comprimento*²/*tempo*², pode-se escrever a escala de Kolmogorov para energia como sendo o quadrado da escala de velocidade (Eq. 3.8).

$$e_\eta = (\nu \epsilon)^{1/2} \quad (3.8)$$

As maiores escalas de um escoamento, por sua vez, são determinadas pela geometria que lhes deu origem. Considerando L uma escala de comprimento representativa da estrutura do escoamento e U uma escala representativa da velocidade, pode-se descrever as escalas de tempo, vorticidade e energia de acordo com as equações (3.9), (3.10) e (3.11), respectivamente.

$$t = \frac{L}{U} \quad (3.9)$$

$$\omega = \frac{U}{L} \quad (3.10)$$

$$E = U^2 \quad (3.11)$$

3.1.3 Escoamentos cisalhantes livres

Os escoamentos cisalhantes livres são caracterizados pela ausência de paredes ou obstáculos em seu interior. Eles podem ser divididos em três grupos distintos: camadas de mistura, esteiras e jatos.

— Camada de mistura ocorre quando duas camadas de fluidos escoando paralelamente se encontram, formando uma interface. A região interfacial apresenta elevado cisalhamento, dando origem a instabilidades do tipo Kelvin-Helmholtz, resultando em turbilhões característicos que crescem ao longo da coordenada axial. Esse escoamento apresenta um ponto de inflexão no perfil radial da velocidade axial. Uma representação esquemática deste tipo de escoamento é mostrada na Figura 3.1.

— Esteiras são escoamentos que se desenvolvem à jusante de um corpo sólido que se encontra em movimento em relação a um fluido, sendo formadas pelo fluxo ao redor deste corpo. Um exemplo comum desse tipo de escoamento é o movimento na água provocado pelo deslocamento de um navio. A Figura 3.2 mostra o desenvolvimento de uma esteira.

— Jato pode ser definido como uma corrente de fluido de alta velocidade, forçada, sob pressão, através de um orifício ou bocal. Os jatos podem ser classificados de acordo com a geometria que os formam. Um jato é denominado redondo quando gerado através de um orifício circular ou denominado plano quando formado por uma cavidade

retangular. Similar ao que acontece na camada de mistura, a transição à turbulência ocorre pela formação de instabilidades e turbilhões de Kelvin-Helmholtz, sendo que essa transição acontece, geralmente, próximo ao bocal de origem do jato. A Figura 3.3 ilustra a estrutura de um jato.

Apesar das diferenças técnicas existentes entre os mecanismos responsáveis pelo surgimento desses três tipos de escoamentos cisalhantes, há um grande grau de similaridade entre eles, incluindo o desenvolvimento de uma região auto-similar a jusante da origem (Bernard e Wallace, 2002).

Esse trabalho de dissertação terá como enfoque a geometria de jatos, pelo fato desta ser representativa da classe de chamas não pré-misturadas. A Fig. 3.4 compara os perfis de velocidade para camadas de mistura, esteiras e jatos.

3.2 Chamas

A combustão pode ser definida como um conjunto de reações químicas exotérmicas entre um combustível e um oxidante, levando a conversão de energia química em térmica. As chamas podem ser classificadas em dois tipos distintos: pré-misturadas e difusivas.

A chama pré-misturada ocorre quando o oxidante e o combustível são misturados antes da zona de combustão. Um exemplo desse fenômeno é a queima em um Bico de Bunsen, onde a mistura de combustível e oxidante entra em ignição, formando uma frente de chama que se propaga através do queimador, até atingir a posição de estado estacionário, sob a forma de um cone. Uma representação esquemática é mostrada na Fig 3.5.

Na chama difusiva, por sua vez, não há uma mistura prévia entre oxidante e combustível. Diferente da chama pré-misturada, onde há uma frente de chama que se propaga através do tubo queimador, na chama difusiva o combustível e o oxidante se misturam por convecção e difusão durante o processo de combustão. A região da chama em que o combustível e o oxidante estão em proporção estequiométrica apresenta maior temperatura e maior taxa de reação. Na maior parte dos casos, a reação de combustão é muito mais rápida do que a difusão, o que faz com que esse último mecanismo seja a etapa governante do processo. Uma representação esquemática de uma chama difusiva é apresentada na Fig 3.6.

Em um sistema com duas alimentações, onde uma corrente de combustível, de fluxo \dot{m}_1 , se mistura com uma corrente de oxidante, de fluxo \dot{m}_2 , a fração de mistura (Z) pode ser definida por:

$$Z = \frac{\dot{m}_1}{\dot{m}_1 + \dot{m}_2} \quad (3.12)$$

onde tanto a corrente de combustível quanto a de oxidante podem conter inertes.

Para uma mistura homogênea, a fração de massa de combustível na mistura não queimada, $Y_{F,u}$, pode ser escrita em função da fração mássica de combustível original

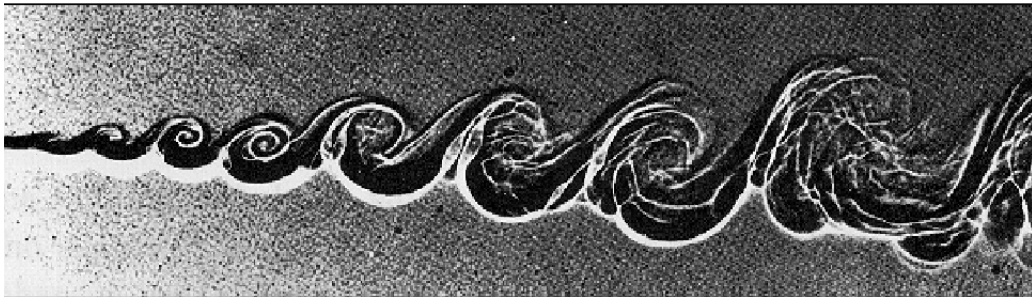


Figura 3.1: Desenvolvimento espacial da camada de mistura. (Brown e Roshko, 1974)

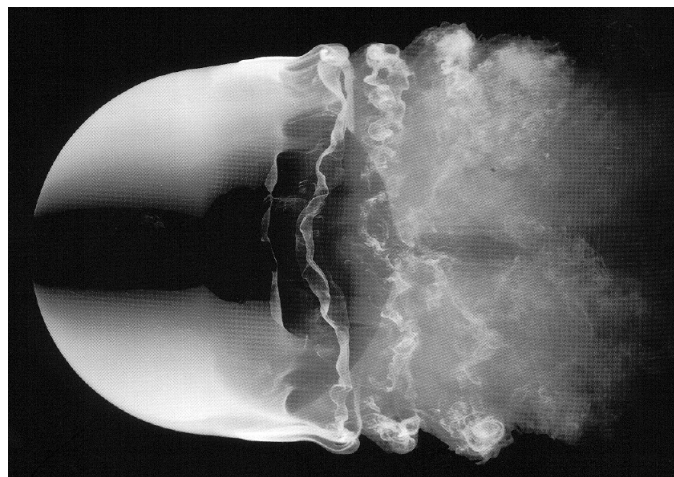


Figura 3.2: Esteira turbilhonar a jusante de uma esfera (Faber, 1995)

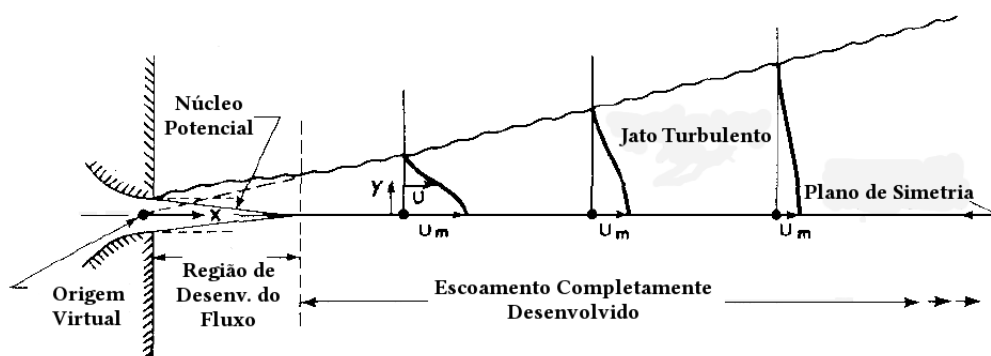


Figura 3.3: Definição esquemática de um jato planar turbulento (Adaptado de Rajaratnam (1976))

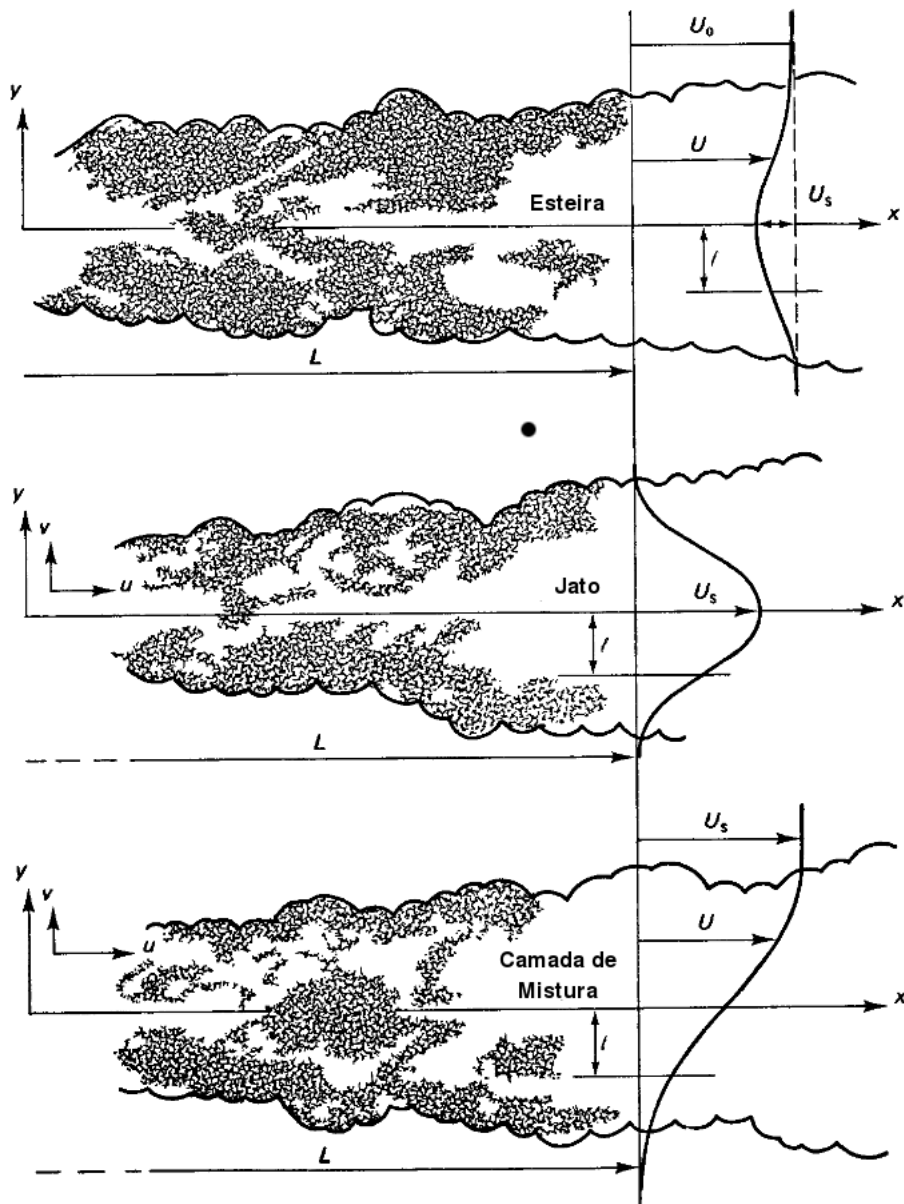


Figura 3.4: Representação esquemática de esteira, jato e camada de mistura planares (Adaptado de Tennekes e Lumley (1972))

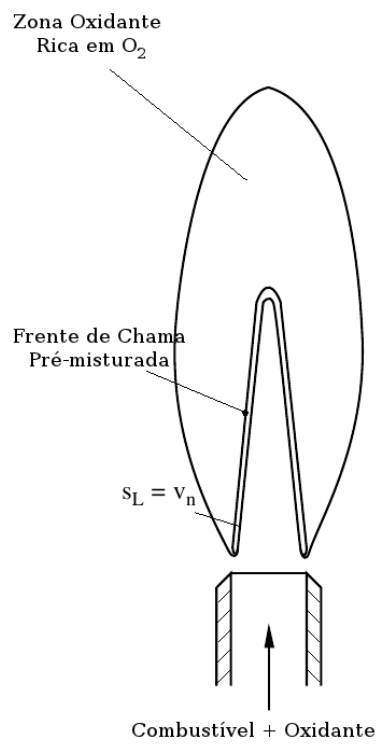


Figura 3.5: Representação de uma chama pré-misturada

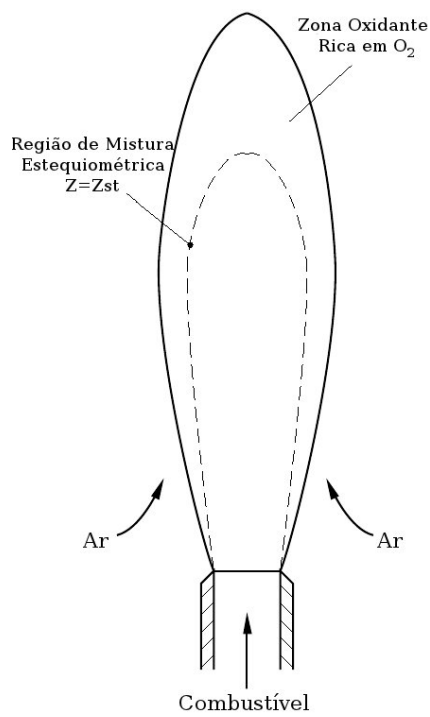


Figura 3.6: Representação de uma chama difusiva

(na corrente de combustível), $Y_{F,1}$, de acordo com a equação (3.13).

$$Y_{F,u} = Y_{F,1}Z \quad (3.13)$$

De modo análogo a equação (3.13), pode-se escrever a fração mássica de oxidante na mistura não queimada, $Y_{O_2,u}$, em função da fração mássica de oxidante na corrente de oxigenação, $Y_{O_2,2}$, como mostrado na equação (3.14).

$$Y_{O_2,u} = Y_{O_2,2}(1 - Z) \quad (3.14)$$

Considerando a reação global dada pela equação (3.15):



onde F é o combustível, e v_F e v_{O_2} os coeficientes estequiométricos de combustível e de oxigênio, respectivamente. A relação entre as variações das frações de combustível e de oxidante pode ser escrita de acordo com a equação (3.16)

$$\frac{dY_F}{v_F W_F} = \frac{dY_{O_2}}{v_{O_2} W_{O_2}} \quad (3.16)$$

onde W_F é a massa molar do combustível e W_{O_2} é a massa molar do oxidante.

Integrando a equação (3.16) desde a mistura não queimada ($t = 0$) até um tempo t qualquer, chega-se na equação (3.17).

$$vY_F - Y_{O_2} = vY_{F,u} - Y_{O_2,u}, \quad v = \frac{v_{O_2} W_{O_2}}{v_F W_F} \quad (3.17)$$

Substituindo a relação dada pela equação (3.12) na equação (3.17), resulta em uma expressão para a fração de mistura em função da fração mássica de combustível e de oxidante (Eq. 3.18).

$$Z = \frac{vY_F - Y_{O_2} + Y_{O_2,2}}{vY_{F,1} + Y_{O_2,2}} \quad (3.18)$$

Caso o combustível e o oxidante estejam em mistura estequiométrica ($Y_{F,u} = vY_{O_2,2}$), a equação (3.18) pode ser simplificada, sendo escrita de acordo com a equação (3.19)

$$Z_{st} = \left(1 + v \frac{Y_{F,1}}{Y_{O_2,2}}\right)^{-1} \quad (3.19)$$

onde Z_{st} corresponde a fração de mistura estequiométrica.

Se $Z < Z_{st}$, a mistura é pobre em combustível. Desse modo, a combustão termina quando todo o combustível é consumido, $Y_{F,b} = 0$. A fração de massa de oxidante restante no final da combustão pode ser calculada de acordo com a equação (3.20).

$$Y_{O_2,b} = Y_{O_2,2} \left(1 - \frac{Z}{Z_{st}}\right) \quad (3.20)$$

Se $Z > Z_{st}$, a mistura é rica em combustível, e a combustão termina quando todo o oxigênio é consumido, $Y_{O_2,b} = 0$. A fração de massa de combustível restante no final da combustão pode ser calculada de acordo com a equação (3.21).

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

A utilização da fração de mistura ao invés da fração mássica facilita a resolução do sistema de equações, sendo que a partir da fração de mistura é possível determinar as frações mássicas dos componentes da reação global.

Outro conceito bastante utilizado para expressar a relação entre combustível e oxidante é a razão de equivalência (ϕ). Esta variável corresponde à razão entre as frações mássicas de combustível e de oxidante na mistura não queimada e na mistura estequiométrica, podendo ser descrita pela expressão (3.22).

$$\phi = \frac{\left(\frac{Y_{F,u}}{Y_{O_2,u}} \right)}{\left(\frac{Y_{F,u}}{Y_{O_2,u}} \right)_{st}} \quad (3.22)$$

A razão de equivalência também pode ser escrita em função da fração de mistura de acordo com a expressão (3.23).

$$\phi = \left(\frac{Z}{1 - Z} \right) \left(\frac{1 - Z_{st}}{Z_{st}} \right) \quad (3.23)$$

A expressão (3.23) sugere que a fração de mistura pode ser interpretada como uma razão de equivalência combustível-ar normalizada (Peters, 2000).

3.3 Equações Governantes

As equações governantes para uma chama correspondem as equações de continuidade, quantidade de movimento, energia e fração de mistura, descritas pelas equações (3.24), (3.25), (3.26) e (3.27), respectivamente, expressas em coordenadas cartesianas para um escoamento compressível em regime transiente.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial (\rho V_j)}{\partial x_j} = 0 \quad (3.24)$$

$$\rho \left(\frac{\partial V_i}{\partial t} + V_j \frac{\partial V_i}{\partial x_j} \right) = - \frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{j,i}}{\partial x_j} + \rho g_i \quad (3.25)$$

$$\rho c_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + V_j \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) + \frac{\partial P}{\partial t} - \sum_{k=1}^m h_i \dot{m}_i - q_R \quad (3.26)$$

$$\rho \left(\frac{\partial Z}{\partial t} + V_j \frac{\partial Z}{\partial x_j} \right) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho \frac{\nu}{Sc} \frac{\partial Z}{\partial x_j} \right) \quad (3.27)$$

Na equação (3.26), empregou-se o limite de baixo número de Mach, onde os gradientes de pressão foram desprezados, considerando-se somente a variação temporal da pressão na equação. O termo $\sum_{k=1}^m h_i \dot{m}_i$ corresponde ao calor gerado pela reação química, enquanto o termo q_R expressa o calor transferido por radiação.

Para expressar o fluxo turbulento, usualmente as variáveis dependentes são expressas como sendo a soma entre uma componente média e uma flutuação, de modo a simplificar o tratamento do sistema de equações. Os tipos de média mais comumente utilizados são as médias de Reynolds e de Favre.

A média de Reynolds, também conhecida como média temporal clássica, decompõe a variável em uma componente média $\bar{\Phi}$, e uma flutuação Φ' , de acordo com as equações (3.28) e (3.29), sendo que esta decomposição apresenta certas propriedades, descritas em (3.30).

$$\Phi = \bar{\Phi} + \Phi', \quad \text{onde } \bar{\Phi}' = 0 \quad (3.28)$$

$$\bar{\Phi} = \lim_{\Delta t \rightarrow \infty} \left(\frac{1}{\Delta t} \int_{t_0}^{t_0 + \Delta t} \Phi(t) dt \right) \quad (3.29)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \bar{\bar{\Phi}} = \bar{\Phi} \\ \bar{\Phi}' = 0 \\ \overline{\Phi \cdot \chi} = \overline{(\bar{\Phi} + \Phi') \cdot \chi} = \bar{\Phi} \cdot \bar{\chi} \\ \overline{\Phi' \cdot \chi} = 0 \\ \overline{\Phi + \chi} = \overline{(\bar{\Phi} + \Phi') + (\bar{\chi} + \chi')} = \bar{\Phi} + \bar{\chi} \\ \frac{\partial \bar{\Phi}}{\partial x} = \frac{\partial (\bar{\Phi} + \Phi')}{\partial x} = \frac{\partial \bar{\Phi}}{\partial x} \\ \int \Phi dx = \int (\bar{\Phi} + \Phi') dx = \int \bar{\Phi} dx \end{array} \right. \quad (3.30)$$

A média de Favre decompõe a variável dependente em uma componente média $\tilde{\Phi}$, e uma flutuação Φ'' , sendo essa média ponderada pela massa específica, conforme mostrado nas equações (3.31) e (3.32).

$$\Phi = \tilde{\Phi} + \Phi'', \quad \text{onde } \overline{\rho \Phi''} = 0 \quad (3.31)$$

$$\tilde{\Phi} = \frac{\overline{\rho \Phi}}{\bar{\rho}} = \lim_{\Delta t \rightarrow \infty} \left[\frac{\int_t^{t+\Delta t} \rho \Phi dt}{\int_t^{t+\Delta t} \rho dt} \right] \quad (3.32)$$

Similar a média de Reynolds, a média de Favre apresenta as seguintes proprieda-

des:

$$\begin{cases} \overline{\rho\Phi} = \bar{\rho}\tilde{\Phi} \\ \overline{\rho\Phi''} \cong 0 \\ \overline{\rho\tilde{\Phi}} = \bar{\rho}\tilde{\Phi} \end{cases} \quad (3.33)$$

Em chamas turbulentas, ocorrem flutuações na massa específica devido a energia térmica liberada, de modo que a utilização da média de Reynolds acaba trazendo dificuldades na resolução do sistema de equações (Veynante e Vervish, 2002)

Desse modo, as equações da continuidade, quantidade de movimento, energia e fração de mistura serão expressas em função da média de Favre, conforme mostrado nas seções 3.3.1, 3.3.2, 3.3.3 e 3.3.4, a seguir.

3.3.1 Continuidade

Aplicando a média de Reynolds à equação da continuidade, obtém-se a expressão (3.34).

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial (\rho V_j)}{\partial x_j} = 0 \quad (3.34)$$

Substituindo a relação dada pela equação (3.31), na equação (3.34), obtém-se:

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial \left(\overline{\rho (\tilde{V}_j + V_j'')} \right)}{\partial x_j} = 0. \quad (3.35)$$

Utilizando a relação $\overline{\rho\Phi''} = 0$, obtém-se a equação da continuidade na média de Favre, (Eq. 3.36).

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{V}_j)}{\partial x_j} = 0 \quad (3.36)$$

3.3.2 Quantidade de Movimento

Utilizando a média de Reynolds na equação de conservação de quantidade de movimento, tem-se a expressão dada por (3.37).

$$\overline{\rho \left(\frac{\partial V_i}{\partial t} + V_j \frac{\partial V_i}{\partial x_j} \right)} = - \frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{j,i}}{\partial x_j} + \rho g_i \quad (3.37)$$

Realizando-se a decomposição por média de Favre na equação (3.37), obtém-se a expressão (3.38).

$$\bar{\rho} \frac{\partial (\tilde{V}_i + V_i'')}{\partial t} + \bar{\rho} (\tilde{V}_j + V_j'') \frac{\partial (\tilde{V}_i + V_i'')}{\partial x_j} = - \frac{\partial \bar{P}}{\partial x_i} + \frac{\partial \bar{\tau}_{j,i}}{\partial x_j} + \bar{\rho} g_i \quad (3.38)$$

Inserindo as relações (3.39), (3.40), (3.41) e (3.42) na equação (3.38) tem-se a equação (3.43).

$$\overline{\rho \frac{\partial V_i''}{\partial t}} = \frac{\partial (\overline{\rho V_i''})}{\partial t} - \overline{V_i'' \frac{\partial \rho}{\partial t}} = -\overline{V_i'' \frac{\partial \rho}{\partial t}} \quad (3.39)$$

$$\overline{\rho \tilde{V}_j \frac{\partial V_i''}{\partial x_j}} = \tilde{V}_j \frac{\partial (\overline{\rho V_i''})}{\partial x_j} - \overline{\tilde{V}_j V_i'' \frac{\partial \rho}{\partial x_j}} = -\overline{\tilde{V}_j V_i'' \frac{\partial \rho}{\partial x_j}} \quad (3.40)$$

$$\overline{\rho V_j'' \frac{\partial V_i''}{\partial x_j}} = \frac{\partial (\overline{\rho V_j'' V_i''})}{\partial x_j} - \overline{V_i'' \frac{\partial (\rho V_j'')}{\partial x_j}} \quad (3.41)$$

$$\overline{\rho V_j'' V_i''} = \overline{\rho \widetilde{V_j'' V_i''}} \quad (3.42)$$

$$\overline{\rho} \frac{\partial \tilde{V}_i}{\partial t} + \overline{\rho \tilde{V}_j} \frac{\partial \tilde{V}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial (\overline{\rho \widetilde{V_j'' V_i''}})}{\partial x_j} - \overline{V_i'' \left[\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial (\rho V_j'')}{\partial x_j} + \tilde{V}_j \frac{\partial \rho}{\partial x_j} \right]} = -\frac{\partial \overline{P}}{\partial x_i} + \frac{\partial \overline{\tau_{j,i}}}{\partial x_j} + \overline{\rho} g_i \quad (3.43)$$

Utilizando a equação da continuidade, (3.24), é possível escrever a relação (3.44).

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial (\rho V_j'')}{\partial x_j} + \tilde{V}_j \frac{\partial \rho}{\partial x_j} = -\rho \frac{\partial \tilde{V}_j}{\partial x_j} \quad (3.44)$$

Substituindo a relação (3.44) na equação do movimento (3.43), o 4º termo da equação (3.43) torna-se $\overline{\rho V_i'' \frac{\partial \tilde{V}_j}{\partial x_j}}$, cujo valor é nulo, obtendo-se, assim, a equação de conservação de quantidade de movimento na média de Favre, (3.45).

$$\overline{\rho} \frac{\partial \tilde{V}_i}{\partial t} + \overline{\rho \tilde{V}_j} \frac{\partial \tilde{V}_i}{\partial x_j} = -\frac{\partial \overline{P}}{\partial x_i} + \frac{\partial \overline{\tau_{j,i}}}{\partial x_j} - \frac{\partial (\overline{\rho \widetilde{V_j'' V_i''}})}{\partial x_j} + \overline{\rho} g_i \quad (3.45)$$

O termo $\overline{\rho \widetilde{V_j'' V_i''}}$ é denominado tensor de Reynolds, e representa a tensão exercida no fluido pelas flutuações turbulentas.

3.3.3 Energia

Aplicando-se a média de Reynolds na equação da conservação de energia expressa na forma da temperatura, obtém-se a expressão (3.46)

$$\overline{\rho c_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + V_j \frac{\partial T}{\partial x_j} \right)} = \frac{\partial \overline{J_{T,j}}}{\partial x_j} + \frac{\partial \overline{P}}{\partial t} - \sum_{k=1}^m \overline{h_i \dot{m}_i} - \overline{q_R} \quad (3.46)$$

sendo $J_{T,j}$ o fluxo de calor, descrito pela Lei de Fourier. Utilizando-se a decomposição por média de Favre na equação (3.46), tem-se a expressão (3.47):

$$\overline{\rho c_p \frac{\partial (\tilde{T} + T'')}{\partial t}} + \overline{\rho c_p (\tilde{V}_j + V_j'') \frac{\partial (\tilde{T} + T'')}{\partial x_j}} = -\frac{\overline{\partial J_{T,j}}}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{P}}{\partial t} - \sum_{k=1}^m \overline{h_k \dot{m}_k} - \bar{q}_R \quad (3.47)$$

Considerando a capacidade calorífica c_p constante, e utilizando as relações (3.48), (3.49), (3.50) e (3.51) na equação (3.47) tem-se a equação (3.52).

$$\overline{\rho \frac{\partial T''}{\partial t}} = \frac{\partial (\overline{\rho T''})}{\partial t} - \overline{T'' \frac{\partial \rho}{\partial t}} = -\overline{T'' \frac{\partial \rho}{\partial t}} \quad (3.48)$$

$$\overline{\rho \tilde{V}_j \frac{\partial T''}{\partial x_j}} = \tilde{V}_j \frac{\partial (\overline{\rho T''})}{\partial x_j} - \overline{\tilde{V}_j T'' \frac{\partial \rho}{\partial x_j}} = -\overline{\tilde{V}_j T'' \frac{\partial \rho}{\partial x_j}} \quad (3.49)$$

$$\overline{\rho V_j'' \frac{\partial T''}{\partial x_j}} = \frac{\partial (\overline{\rho V_j'' T''})}{\partial x_j} - \overline{T'' \frac{\partial (\rho V_j'')}{\partial x_j}} \quad (3.50)$$

$$\overline{\rho V_j'' T''} = \widetilde{\overline{\rho V_j'' T''}} \quad (3.51)$$

$$\begin{aligned} \overline{\rho c_p \left(\frac{\partial \tilde{T}}{\partial t} + \tilde{V}_j \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_j} \right)} + c_p \frac{\partial (\widetilde{\overline{\rho V_j'' T''}})}{\partial x_j} - \overline{c_p T'' \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} + V_j'' \frac{\partial \rho}{\partial x_j} + \frac{\partial (\rho V_j'')}{\partial x_j} \right)} = \\ = -\frac{\overline{\partial J_{T,j}}}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{P}}{\partial t} - \sum_{k=1}^m \overline{h_k \dot{m}_k} - \bar{q}_R \end{aligned} \quad (3.52)$$

Substituindo a relação (3.44) na equação (3.52), obtém-se a equação de conservação de energia na média de Favre (3.53).

$$\overline{\rho c_p \left(\frac{\partial \tilde{T}}{\partial t} + \tilde{V}_j \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_j} \right)} = -\frac{\overline{\partial J_{T,j}}}{\partial x_j} - c_p \frac{\partial (\widetilde{\overline{\rho V_j'' T''}})}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{P}}{\partial t} - \sum_{k=1}^m \overline{h_k \dot{m}_k} - \bar{q}_R \quad (3.53)$$

3.3.4 Fração de Mistura

A equação para fração de mistura pode ser obtida a partir do balanço de massa dos componentes da reação global. As equações de balanço de massa por componente para o combustível F e oxidante O_2 podem ser descritas conforme as equações (3.54) e (3.55), respectivamente.

$$\rho \frac{\partial Y_F}{\partial t} + \rho V_j \frac{\partial Y_F}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho \frac{\nu}{Sc} \frac{\partial Y_F}{\partial x_j} \right) + \dot{m}_F \quad (3.54)$$

$$\rho \frac{\partial Y_{O_2}}{\partial t} + \rho V_j \frac{\partial Y_{O_2}}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho \frac{\nu}{Sc} \frac{\partial Y_{O_2}}{\partial x_j} \right) + \dot{m}_{O_2} \quad (3.55)$$

Realizando-se a soma da equação (3.54) multiplicada por $(\nu/(vY_{F,1} + Y_{O_2,2}))$ com equação 3.55 multiplicada por $(-1/(vY_{F,1} + Y_{O_2,2}))$, e utilizando a definição de fração de mistura dada pela equação (3.18), obtém-se uma equação diferencial para a fração de mistura, mostrada em (3.56).

$$\rho \frac{\partial Z}{\partial t} + \rho V_j \frac{\partial Z}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho \frac{\nu}{Sc} \frac{\partial Z}{\partial x_j} \right) \quad (3.56)$$

A equação (3.56) não apresenta termo fonte, pois a fração de mistura é uma grandeza conservativa. Aplicando-se a média de Reynolds na equação (3.56), e realizando-se a decomposição por média de Favre, obtém-se a expressão (3.57).

$$\overline{\rho \frac{\partial (\tilde{Z} + Z'')}{\partial t}} + \overline{\rho (\tilde{V}_j + V_j'') \frac{\partial (\tilde{Z} + Z'')}{\partial x_j}} = \overline{\frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho \frac{\nu}{Sc} \frac{\partial Z}{\partial x_j} \right)} \quad (3.57)$$

Inserindo as relações (3.58), (3.59), (3.60) e (3.61) na equação (3.57) tem-se a equação (3.62).

$$\overline{\rho \frac{\partial Z''}{\partial t}} = \frac{\partial (\overline{\rho Z''})}{\partial t} - \overline{Z'' \frac{\partial \rho}{\partial t}} = -\overline{Z'' \frac{\partial \rho}{\partial t}} \quad (3.58)$$

$$\overline{\rho \tilde{V}_j \frac{\partial Z''}{\partial x_j}} = \tilde{V}_j \frac{\partial (\overline{\rho Z''})}{\partial x_j} - \overline{\tilde{V}_j Z'' \frac{\partial \rho}{\partial x_j}} = -\overline{\tilde{V}_j Z'' \frac{\partial \rho}{\partial x_j}} \quad (3.59)$$

$$\overline{\rho V_j'' \frac{\partial Z''}{\partial x_j}} = \frac{\partial (\overline{\rho V_j'' Z''})}{\partial x_j} - \overline{Z'' \frac{\partial (\rho V_j'')}{\partial x_j}} \quad (3.60)$$

$$\overline{\rho V_j'' Z''} = \overline{\rho \widetilde{V_j'' Z''}} \quad (3.61)$$

$$\overline{\rho} \frac{\partial \tilde{Z}}{\partial t} + \overline{\rho \tilde{V}_j} \frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_j} + \frac{\partial (\overline{\rho \widetilde{V_j'' Z''}})}{\partial x_j} - \overline{Z'' \left[\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial (\rho V_j'')}{\partial x_j} + \tilde{V}_j \frac{\partial \rho}{\partial x_j} \right]} = \overline{\frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho \frac{\nu}{Sc} \frac{\partial Z}{\partial x_j} \right)} \quad (3.62)$$

Substituindo a relação (3.44) na equação do movimento (3.43), obtém-se a equação para a conservação da fração de mistura (3.63).

$$\overline{\rho} \frac{\partial \tilde{Z}}{\partial t} + \overline{\rho \tilde{V}_j} \frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho \frac{\nu}{Sc} \frac{\partial Z}{\partial x_j} \right) - \frac{\partial (\overline{\rho \widetilde{V_j'' Z''}})}{\partial x_j} \quad (3.63)$$

No próximo capítulo serão apresentadas algumas metodologias para o cálculo da fração de mistura em uma chama difusiva na forma de jato.

Capítulo 4

Metodologia

Neste capítulo, serão apresentadas algumas soluções simplificadas para a fração de mistura de chamas difusivas sob forma de um jato turbulento axissimétrico. O capítulo será dividido em duas partes, uma com soluções analíticas, e outra com resoluções analítico-numéricas.

4.1 Formulação Analítica

Em um sistema homogêneo, onde uma corrente de combustível é misturada com um oxidante, a fração de mistura pode ser definida como a razão entre a fração mássica de combustível não queimado com a fração de combustível original, presente na corrente de combustível (Eq. 4.1).

$$\tilde{Z} = \frac{\tilde{Y}_{F,u}}{Y_{F,1}} \quad (4.1)$$

Para análise, considerou-se uma chama difusiva, na qual o combustível, que sai de um bocal de diâmetro d com velocidade u_0 , mistura-se com o ar ambiente por convecção e difusão, formando uma chama na forma de jato (Figura 4.1).

Escolheu-se a geometria de um jato, pelo fato desta ser representativa da classe de chamas não pré-misturadas. Essa estrutura conduz a um problema axissimétrico bidimensional, governado pelas equações da Continuidade (Eq. 3.36), Quantidade de Movimento (Eq. 3.45) e Fração de Mistura (Eq. 3.63) em termos da média de Favre, obtidas na Seção 3.3. A utilização da média de Favre é conveniente, pois evita o surgimento de termos como $\rho'u'$.

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{V}_j)}{\partial x_j} = 0 \quad (3.36)$$

$$\bar{\rho} \left(\frac{\partial \tilde{V}_i}{\partial t} + \tilde{V}_j \frac{\partial \tilde{V}_i}{\partial x_j} \right) = - \frac{\partial \bar{P}}{\partial x_i} + \frac{\partial \bar{\tau}_{j,i}}{\partial x_j} - \frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{V}_j \tilde{V}_i)}{\partial x_j} + \bar{\rho} g_i \quad (3.45)$$

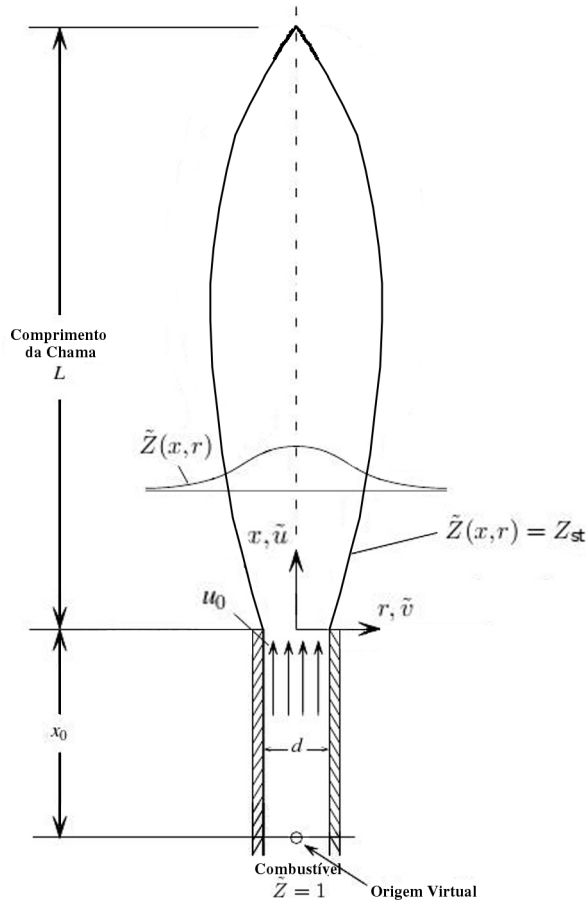


Figura 4.1: Representação esquemática de uma chama difusiva

$$\bar{\rho} \frac{\partial \tilde{Z}}{\partial t} + \bar{\rho} \tilde{V}_j \frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho \frac{\nu}{Sc} \frac{\partial Z}{\partial x_j} \right) - \frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{V}_j'' Z'')}{\partial x_j} \quad (3.63)$$

De modo a simplificar as equações (3.36), (3.45) e (3.63) foram feitas as seguintes considerações:

- Estado estacionário.
- Desprezaram-se os efeitos de flutuabilidade e gradiente de pressão.
- Considerou-se a hipótese de camada limite.
- Desprezou-se o componente de tensão viscosa ($\bar{\tau}_{j,i}$) quando comparado à tensão de Reynolds ($\bar{\rho} \tilde{V}_j'' V_i''$).
- Desprezou-se a componente molecular da fração de mistura $\frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho \frac{\nu}{Sc} \frac{\partial Z}{\partial x_j} \right)$ quando comparada com a componente turbulenta $\frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{V}_j'' Z'')}{\partial x_j}$.

Para fechar o sistema de equações foi considerado a hipótese de Boussinesq, na qual a tensão de Reynolds atua de modo similar à tensão viscosa, sendo proporcional ao gradiente de velocidades multiplicado por um coeficiente de proporcionalidade (Cebeci, 2004), como mostra a equação (4.2). Esse coeficiente de proporcionalidade corresponde à viscosidade turbulenta (ν_t).

$$-\overline{\rho u'' v''} = \overline{\rho} \nu_t r \frac{\partial \tilde{u}}{\partial r} \quad (4.2)$$

De modo análogo, a componente turbulenta na equação de fração de mistura, $\overline{\rho V_j'' Z''}$, foi modelada como sendo proporcional ao gradiente de \tilde{Z} , conforme mostrado na equação 4.3.

$$-\overline{\rho v'' Z''} = \frac{\overline{\rho} \nu_t}{Sc} r \frac{\partial \tilde{Z}}{\partial r} \quad (4.3)$$

O problema do fechamento do sistema de equações é um preço a se pagar pela não linearidade da parte convectiva da equação de Navier-Stokes e pela perda de informação através do processo de média temporal (Piquet, 1999).

Com essas simplificações, obtém-se as equações (4.4), (4.5) e (4.6) expressas em coordenadas cilíndricas.

$$\frac{\partial(\overline{\rho} \tilde{u} r)}{\partial x} + \frac{\partial(\overline{\rho} \tilde{v} r)}{\partial r} = 0 \quad (4.4)$$

$$\overline{\rho} \tilde{u} r \frac{\partial \tilde{u}}{\partial x} + \overline{\rho} \tilde{v} r \frac{\partial \tilde{u}}{\partial r} = \frac{\partial}{\partial r} \left(\overline{\rho} \nu_t r \frac{\partial \tilde{u}}{\partial r} \right) \quad (4.5)$$

$$\overline{\rho} \tilde{u} r \frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x} + \overline{\rho} \tilde{v} r \frac{\partial \tilde{Z}}{\partial r} = \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{\overline{\rho} \nu_t r}{Sc} \frac{\partial \tilde{Z}}{\partial r} \right) \quad (4.6)$$

As equações (4.4), (4.5) e (4.6) estão sujeitas às condições de contorno descritas em (4.7). Nestas condições, considerou-se que, para $r = 0$, a velocidade radial é nula e a fração de mistura é igual a \tilde{Z}_{cl} , enquanto que, em $r \rightarrow \infty$, a velocidade axial e sua derivada primeira ao longo de x são nulas, e a fração de mistura é nula devido à ausência de combustível.

$$\begin{aligned} r = 0 : \quad & \tilde{v} = 0, \quad \tilde{Z} = \tilde{Z}_{cl} \\ r \rightarrow \infty : \quad & \tilde{u} = 0, \quad \frac{\partial \tilde{u}}{\partial r} = 0, \quad \tilde{Z} = 0 \end{aligned} \quad (4.7)$$

A equação da Continuidade (Eq. 4.4) é satisfeita com a introdução da função corrente (Eq. 4.8).

$$\overline{\rho} \tilde{u} r = \frac{\partial \psi}{\partial r}, \quad \overline{\rho} \tilde{v} r = -\frac{\partial \psi}{\partial x} \quad (4.8)$$

Utilizando-se uma transformação de similaridade (Eq. 4.9) dada por Peters e Donnerhack (1981), simplifica-se o sistema de equações, conforme:

$$\eta = \frac{\bar{r}}{\zeta}, \quad \bar{r}^2 = 2 \int_0^r \frac{\bar{\rho}}{\rho_\infty} r dr, \quad \zeta = x + x_0. \quad (4.9)$$

A transformação dada pela equação (4.9) leva ao surgimento de uma coordenada radial ponderada pela massa específica (\bar{r}). A nova coordenada axial ζ corresponde à soma entre a coordenada axial x e o deslocamento virtual da chama com relação ao bocal x_0 .

Com a transformação de similaridade, o sistema de coordenadas (x, r) é transformado em (ζ, η) utilizando-se a regra da cadeia mostrada na equação (4.10).

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial \zeta} + \frac{\partial \eta}{\partial \zeta} \frac{\partial}{\partial \eta}, \quad \frac{\partial}{\partial r} = \frac{\partial \eta}{\partial \bar{r}} \frac{\partial \bar{r}}{\partial r} \frac{\partial}{\partial \eta} \quad (4.10)$$

Introduzindo-se a função corrente adimensional F (Eq. 4.11), as velocidades axial e radial podem ser escritas em função de F (Eq. 4.12).

$$F = \frac{\psi}{\rho_\infty \nu_{tr} \zeta} \quad (4.11)$$

$$\tilde{u} = \frac{1}{\eta \zeta} \frac{\partial (\nu_{tr} F)}{\partial \eta}, \quad \tilde{r} \tilde{v} r = -\rho_\infty \left(\nu_{tr} F - \eta \frac{\partial (\nu_{tr} F)}{\partial \eta} \right) \quad (4.12)$$

A variável ν_{tr} presente nas equações (4.11) e (4.12) corresponde à viscosidade turbulenta de um jato com massa específica constante. De modo a simplificar os cálculos, foi considerado que a fração de mistura corresponde ao produto de duas funções: a fração de mistura na linha de centro \tilde{Z}_{cl} , função somente de ζ , e a variável ω , como mostra a equação (4.13).

$$\tilde{Z} = \tilde{Z}_{cl} \omega \quad (4.13)$$

Substituindo as equações (4.12) e (4.13) nas equações (4.5) e (4.6), e aplicando a regra da cadeia descrita pela equação (4.10), chega-se nas equações (4.14) e (4.15)

$$-\frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{\nu_{tr} F}{\eta} \frac{\partial (\nu_{tr} F)}{\partial \eta} \right) = \frac{\partial}{\partial \eta} \left[C \nu_{tr} \eta \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{1}{\eta} \frac{\partial (\nu_{tr} F)}{\partial \eta} \right) \right] \quad (4.14)$$

$$-\frac{\partial}{\partial \eta} ((\nu_{tr} F) \omega) = \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{C}{Sc} \eta \nu_{tr} \frac{\partial \omega}{\partial \eta} \right) \quad (4.15)$$

sujeitas as condições de contorno dados por (4.16), obtidas a partir das condições expressas em (4.7).

$$\begin{aligned} \eta = 0: \quad & F = 0, \quad (\nu_{tr} F)' = 0, \quad \omega = 1 \\ \eta \rightarrow \infty: \quad & (\nu_{tr} F)' = 0, \quad (\nu_{tr} F)'' = 0, \quad \omega = 0 \end{aligned} \quad (4.16)$$

A variável C que aparece nas equações (4.14) e (4.15) corresponde ao parâmetro de Chapman-Rubesin, descrito de acordo com a equação (4.17).

$$C = \frac{\bar{\rho}^2 \nu_t r^2}{\rho_\infty^2 \nu_{tr} \bar{r}^2} \quad (4.17)$$

De acordo com Peters e Donnerhack (1981), o parâmetro de Chapman-Rubesin também pode ser escrito como:

$$C = \frac{(\rho_0 \rho_{st})^{1/2}}{\rho_\infty}. \quad (4.18)$$

Para quantificar a viscosidade turbulenta, foi utilizada uma expressão semi-empírica obtida por Agrawal e Prasad (2003) para uma chama difusiva na forma de um jato axisimétrico (Eq. 4.19).

$$\nu_{tr} = \frac{U_c c^2}{4} x \left(\frac{1 - \exp(-\xi^2)}{\xi^2} \right), \quad \xi = \frac{r}{cx} \quad (4.19)$$

A variável U_c corresponde à velocidade axial na linha de centro, que, para um jato axisimétrico, varia proporcionalmente com x^{-1} (Schlichting, 1979).

De modo a resolver as equações diferenciais (4.14) e (4.15) analiticamente utilizando a expressão de Agrawal e Prasad (2003), o termo exponencial da equação (4.19) foi aproximado por uma série de Taylor. Foram desenvolvidas duas formulações analíticas, uma com a viscosidade turbulenta aproximada por uma série de Taylor truncada no 2º termo, outra no 3º termo.

4.1.1 Aproximação por série de Taylor truncada no 2º termo

Nesta seção, será utilizada a expressão de Agrawal e Prasad para a viscosidade turbulenta (4.19) simplificada. Efetuando a expansão do termo exponencial da equação (4.19) em uma série de Taylor truncada no segundo termo, obtém-se:

$$\exp(-\xi^2) \approx 1 - \xi^2. \quad (4.20)$$

Com essa consideração, a viscosidade turbulenta pode ser escrita de acordo com a equação (4.21).

$$\nu_{tr} = \frac{U_c c^2}{4} x \quad (4.21)$$

Assim, a viscosidade turbulenta torna-se independente de η , já que U_c é função somente de ζ . Desse modo, as equações (4.14) e (4.15) podem ser simplificadas, resultando nas equações (4.22) e (4.23).

$$-\frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{F}{\eta} \frac{\partial F}{\partial \eta} \right) = \frac{\partial}{\partial \eta} \left[C \eta \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{1}{\eta} \frac{\partial F}{\partial \eta} \right) \right] \quad (4.22)$$

$$-\frac{\partial}{\partial \eta} (F\omega) = \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{C}{Sc} \eta \frac{\partial \omega}{\partial \eta} \right) \quad (4.23)$$

Resolvendo analiticamente a equação (4.22), chega-se em uma expressão para a função corrente adimensional (Eq. 4.24).

$$F = C (\gamma\eta)^2 \left(1 + \frac{(\gamma\eta)^2}{4} \right)^{-1} \quad (4.24)$$

O parâmetro γ é uma constante, com relação a η , obtido na integração da equação 4.22.

A substituição da Eq. (4.24) na Eq. (4.12), leva a uma expressão para a velocidade axial em termos de (ζ, η) (4.25).

$$\tilde{u} = \frac{2\nu_{tr}C\gamma^2}{\zeta} \left(1 + \frac{(\gamma\eta)^2}{4} \right)^{-2} \quad (4.25)$$

Analisando a expressão (4.25), verifica-se que a velocidade na linha de centro $\tilde{u}(\zeta, 0)$ é proporcional a x^{-1} , o que está de acordo com a consideração inicial feita para U_c na equação (4.19).

Combinando a equação da quantidade de movimento na direção x (Eq. 4.5) com a equação da continuidade (Eq. 4.4) e integrando desde $r = 0$ até $r \rightarrow \infty$, obtém-se:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left[\int_0^\infty \bar{\rho} \tilde{u}^2 r dr \right] + [\bar{\rho} \tilde{u} v r]_0^\infty = \left[\bar{\rho} \nu_{tr} r \frac{\partial \tilde{u}}{\partial r} \right]_0^\infty. \quad (4.26)$$

Com as condições de contorno dadas pela Eq. (4.7), os dois últimos termos da equação (4.26) são iguais a zero. Logo, o primeiro termo da equação (4.26) também possui valor nulo, o que indica que a integral do 1º termo independe de x , e portanto pode ser escrita em $x = 0$. Considerando a velocidade de saída do jato u_0 constante através de um orifício de raio R , a quantidade de movimento do jato pode ser descrita de acordo com a expressão (4.27):

$$\int_0^\infty \bar{\rho} \tilde{u}^2 r dr = \frac{\rho_0 u_0^2 R^2}{2}, \quad (4.27)$$

onde ρ_0 corresponde à massa específica da corrente de combustível na saída do bocal.

Substituindo a equação (4.25) na (4.27) e integrando, determina-se o valor de γ , cuja expressão corresponde a:

$$\gamma^2 = \frac{3}{64} \left(\frac{\rho_0}{\rho_\infty C^2} \right) \left(\frac{u_0 d}{\nu_{tr}} \right)^2. \quad (4.28)$$

Para quantificar a variação do número de Schmidt (Sc) com a composição da chama, considerou-se que Sc varia linearmente com a fração de mistura de acordo com a equação (4.29):

$$Sc = (Sc_F - Sc_{O_x}) \tilde{Z} + Sc_{O_x} \quad (4.29)$$

onde Sc_F e Sc_{Ox} correspondem ao número de Schmidt para o combustível e oxidante, respectivamente.

De modo a expressar a variação do número de Schmidt como dependente de (\tilde{Z}_{cl}, ω) (Eq. 4.30), a equação (4.13) foi substituída na equação (4.29).

$$\begin{aligned} Sc &= A_1\omega + A_2, \\ A_1 &= (Sc_F - Sc_{Ox}) \tilde{Z}_{cl} \quad A_2 = Sc_{Ox} \end{aligned} \quad (4.30)$$

Substituindo as equações (4.24) e (4.30) na equação (4.23), integra-se a equação (4.23) para determinar ω (Eq. 4.31).

$$\omega = A_2 \left[(A_1 + A_2) \left(1 + \frac{(\gamma\eta)^2}{4} \right)^{2A_2} - A_1 \right]^{-1} \quad (4.31)$$

Combinando a equação da fração de mistura (Eq. 4.6) com a equação da continuidade (Eq. 4.4), e integrando desde $r = 0$ até $r \rightarrow \infty$, obtém-se:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left[\int_0^\infty \tilde{\rho} \tilde{u} \tilde{Z} r dr \right] + \left[\tilde{\rho} \tilde{v} \tilde{Z} r \right]_0^\infty = \left[\frac{\tilde{\rho} \nu_{tr} r}{Sc} \frac{\partial \tilde{Z}}{\partial r} \right]_0^\infty \quad (4.32)$$

Analisando as condições de contorno dada por (4.7), chega-se à conclusão que os dois últimos termos da equação (4.32) são iguais a zero e, portanto, a integral dentro do primeiro termo dessa equação, que representa o fluxo de massa integrado, deve ser independente de x . Considerando a velocidade de saída do jato constante através de um orifício de raio R , chega-se na equação (4.33).

$$\int_0^\infty \tilde{\rho} \tilde{u} \tilde{Z} r dr = \frac{\rho_0 u_0 R^2}{2} \quad (4.33)$$

Substituindo as equações (4.13), (4.31), (4.25) na equação (4.33), determina-se uma expressão para a fração de mistura na linha de centro (\tilde{Z}_{cl}) de acordo com a equação:

$$\begin{aligned} \tilde{Z}_{cl} &= \frac{1}{32A_2} \left(\frac{u_0 d}{\nu_{tr}} \right) (\zeta/d)^{-1} \beta, \\ \beta &= \left[\int_1^\infty (\mu^2 ((A_1 + A_2) \mu^{2A_2} - A_1))^{-1} d\mu \right]^{-1}, \end{aligned} \quad (4.34)$$

onde μ é uma variável de integração da equação para β .

De modo a simplificar a equação (4.34), foi considerado que $A_1 \ll A_1 + A_2$. A diferença entre o número de Schmidt do combustível (hidrogênio) e do oxidante (oxigênio) é da ordem de 10^{-1} , e quando esse valor é multiplicado por \tilde{Z}_{cl} , torna-se ainda menor, o que justifica esta simplificação. Desse modo, a Eq. (4.34) pode ser escrita como Eq. (4.35).

$$\tilde{Z}_{cl} = Sc_{Ox} \left[\left(\frac{1}{32} \frac{\rho_0}{\rho_\infty C} \left(\frac{u_0 d}{\nu_{tr}} \right) (\zeta/d)^{-1} \frac{(2Sc_{Ox} + 1)}{Sc_{Ox}} \right)^{-1} - (Sc_F - Sc_{Ox}) \right]^{-1} \quad (4.35)$$

Desse modo, obtém-se a expressão analítica para a fração de mistura, que corresponde ao produto da Eq. (4.35) pela Eq. (4.31), ou seja a Eq. (4.13).

4.1.2 Aproximação por série de Taylor truncada no 3º termo

Efetuada a expansão do termo exponencial da equação (4.19) em uma série de Taylor truncada no terceiro termo, resulta em:

$$\exp(-\xi^2) \approx 1 - \xi^2 + \frac{\xi^4}{2}. \quad (4.36)$$

Desse modo, a viscosidade turbulenta pode ser escrita de acordo com a equação (4.37).

$$\nu_{tr} = \frac{U_c c^2}{4} x \left(1 - \frac{\xi^2}{2}\right) \quad (4.37)$$

Considerando $r \approx \bar{r}$, escreve-se a viscosidade turbulenta em função de η , como mostrado na equação (4.38).

$$\nu_{tr} = K \left(1 - \frac{\eta^2}{2\beta^2}\right): \quad K = \frac{U_c c^2 x}{4}, \quad \beta = \frac{cx}{\zeta} \quad (4.38)$$

Introduzindo a variável ϕ , como sendo o produto da viscosidade turbulenta, ν_{tr} com a função corrente adimensional F (equação 4.41), as equações diferenciais (4.14) e (4.15) tornam-se:

$$-\frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{\phi}{\eta} \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \right) = \frac{\partial}{\partial \eta} \left[C \nu_{tr} \eta \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{1}{\eta} \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \right) \right] \quad (4.39)$$

$$-\frac{\partial}{\partial \eta} (\phi \omega) = \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{C}{Sc} \eta \nu_{tr} \frac{\partial \omega}{\partial \eta} \right) \quad (4.40)$$

$$\phi = F \nu_{tr} \quad (4.41)$$

Integrando a equação (4.39) desde $\eta = 0$ até um valor η qualquer, chega-se na equação (4.42).

$$C \nu_{tr} \eta \frac{\partial^2 \phi}{\partial \eta^2} + \phi \frac{\partial \phi}{\partial \eta} - C \nu_{tr} \frac{\partial \phi}{\partial \eta} = 0 \quad (4.42)$$

Integrando-se cada termo da equação (4.42) separadamente, de acordo com as equações (4.43), (4.44) e (4.45),

$$\int_0^\eta C \nu_{tr} \eta \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial \eta^2} \right) d\eta = CK \left[\eta \left(\frac{\partial \phi}{\partial \eta} \right) - \phi - \frac{1}{2\beta^2} \int_0^\eta \eta^3 \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial \eta^2} \right) d\eta \right] \quad (4.43)$$

$$\int_0^\eta \phi \left(\frac{\partial \phi}{\partial \eta} \right) d\eta = \frac{\phi^2}{2} \quad (4.44)$$

$$\int_0^\eta C\nu_{tr} \left(\frac{\partial \phi}{\partial \eta} \right) d\eta = CK \left[\phi - \frac{1}{6\beta^2} \left(\frac{\partial \phi}{\partial \eta} \right) \eta^3 + \frac{1}{6\beta^2} \int_0^\eta \eta^3 \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial \eta^2} \right) d\eta \right] \quad (4.45)$$

e rearranjando os termos dados pelas equações (4.43), (4.44) e (4.45), chega-se na equação integro-diferencial descrita pela equação (4.46).

$$CK\eta \left(\frac{\partial \phi}{\partial \eta} \right) + \frac{CK}{6\beta^2} \eta^3 \left(\frac{\partial \phi}{\partial \eta} \right) - 2CK\phi + \frac{\phi^2}{2} - \frac{2CK}{3\beta^2} \int_0^\eta \eta^3 \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial \eta^2} \right) d\eta = 0 \quad (4.46)$$

Para o tipo de chama utilizado neste estudo, a variável η tende a assumir valores pequenos, uma vez que o comprimento da chama é consideravelmente maior do que seu raio. Como o termo integral da equação (4.46) possui um fator η^3 , pode-se desprezar esse termo, tornando assim possível a resolução analítica desta equação. Essa simplificação não é válida para valores pequenos de x , próximos da saída do bocal. Desprezando o termo integral da equação (4.46), e resolvendo a equação analiticamente, chega-se na expressão descrita pela equação (4.47):

$$\phi = 4CK\eta^2 \left(\eta^2 + \left(1 + \frac{\eta^2}{6\beta^2} \right) \gamma \right)^{-1} \quad (4.47)$$

na qual a variável γ é uma constante com relação a η obtida na integração da equação diferencial.

Substituindo a expressão (4.41) na equação (4.47), chega-se na equação para a função corrente adimensional (Eq. 4.48)

$$F = 4C\eta^2 \left[\left(\eta^2 + \left(1 + \frac{\eta^2}{6\beta^2} \right) \gamma \right) \left(1 - \frac{\eta^2}{2\beta^2} \right) \right]^{-1} \quad (4.48)$$

Determinando a velocidade axial pela substituição das relações (4.41) e (4.48) na equação (4.12), obtém-se a equação (4.49).

$$\tilde{u} = \frac{8CK\gamma}{\zeta} \left[\left(1 + \frac{\gamma}{6\beta^2} \right) \eta^2 + \gamma \right]^{-2} \quad (4.49)$$

De modo análogo ao resultado obtido na Seção 4.1.1, a velocidade axial na linha de centro do jato é proporcional a x^{-1} , estando em concordância com a proposição feita para U_c na equação (4.19).

Substituindo a expressão de velocidade axial (Eq. 4.49) na equação de quantidade de movimento do jato (Eq. 4.27) e integrando, chega-se a uma expressão para γ que corresponde a um polinômio de 2º grau:

$$\frac{\gamma^2}{6\beta^2} + \gamma - \frac{64}{3} \frac{\rho_\infty}{\rho_0} C^2 \left(\frac{K}{u_0 R} \right)^2 = 0 \quad (4.50)$$

sendo que somente a raiz positiva desse polinômio, mostrada na equação (4.51), é válida, uma vez que γ deve assumir valores positivos de modo que a velocidade axial do

jato seja positiva.

$$\gamma = 3\beta^2 \left[-1 + \sqrt{1 + \frac{512}{9} \left(\frac{\rho_\infty}{\rho_0} \right) \left(\frac{C}{\beta} \right)^2 \left(\frac{K}{u_0 d} \right)^2} \right] \quad (4.51)$$

Com as relações dadas pelas equações (4.49) e (4.51) tem-se uma expressão analítica para a velocidade axial do jato.

Integrando a equação diferencial para ω (Eq. 4.40) desde $\eta = 0$ até um valor η qualquer, chega-se na equação (4.52).

$$\frac{C}{Sc} \eta \frac{\partial \omega}{\partial \eta} + F\omega = 0 \quad (4.52)$$

Substituindo as expressões (4.37) e (4.48) na equação diferencial (4.52), e integrando, obtém-se a expressão para ω , de acordo com a equação (4.53).

$$\omega = \left[\left(1 - \frac{\eta^2}{2\beta^2} \right) \gamma \left(\left(1 + \frac{\gamma}{6\beta^2} \right) \eta^2 + \gamma \right)^{-1} \right]^\alpha, \quad \alpha = 6Sc \left(\frac{2\gamma}{\beta^2} + 3 \right)^{-1} \quad (4.53)$$

Para a determinação da fração de mistura na linha de centro (\tilde{Z}_{cl}), foi utilizada a expressão do fluxo de massa integrado, dada pela equação (4.33), de modo análogo ao realizado na Seção 4.1.1. Substituindo as equações (4.13), (4.53), (4.49) na equação (4.33), obtém-se o valor de \tilde{Z}_{cl} , sendo dado pela equação (4.54).

$$\tilde{Z}_{cl} = \frac{1}{288} \left(\frac{\rho_0}{\rho_\infty C} \right) \left(\frac{u_0 d}{K} \right) \left(\frac{\zeta}{d} \right)^{-1} \frac{(2\gamma + 3\beta^2 + 6Sc\beta^2)(6\beta^2 + \gamma)}{\gamma\beta^2} \left(\frac{6\beta^2 + \gamma}{3\gamma} \right)^\alpha \left[e^{i\pi\alpha} + \left(\frac{6\beta^2 + \gamma}{3\gamma} \right)^{\alpha+1} \right]^{-1} \quad (4.54)$$

A expressão (4.54) possui um termo imaginário, obtido durante a integração da expressão (4.33). Na comparação com pontos experimentais, foi utilizado a parte real da equação, mostrada na expressão (4.55)

$$\tilde{Z}_{cl} = \frac{1}{288} \left(\frac{\rho_0}{\rho_\infty C} \right) \left(\frac{u_0 d}{K} \right) \left(\frac{\zeta}{d} \right)^{-1} \frac{(2\gamma + 3\beta^2 + 6Sc\beta^2)(6\beta^2 + \gamma)}{\gamma\beta^2} \left(\frac{6\beta^2 + \gamma}{3\gamma} \right)^\alpha \left(\chi^{\alpha+1} + \cos(\pi\alpha) \right) \left(\chi^{2(\alpha+1)} + 2\chi^{\alpha+1} \cos(\pi\alpha) + 1 \right)^{-1} \quad (4.55)$$

$$\text{onde } \chi = \left(\frac{6\beta^2 + \gamma}{3\gamma} \right) \quad \text{e} \quad \alpha = 6Sc \left(\frac{2\gamma}{\beta^2} + 3 \right)^{-1}.$$

Desse maneira, a expressão analítica para fração de mistura corresponde ao produto da Eq. (4.54) pela Eq. (4.53), ou seja, $\tilde{Z} = \tilde{Z}_{cl} \omega$.

A seguir, será obtida a solução de Burke-Schumann para a temperatura da chama.

4.2 Solução de Burke-Schumann

Considere um sistema adiabático ($dq = 0$), a pressão constante ($dP = 0$), e trabalho realizado por fricção nulo ($dw_R = 0$), tem-se que $dh = 0$, podendo-se integrar a entalpia desde o estado de mistura não queimada até o estado final da combustão, de acordo com (4.56):

$$h_u = h_b \quad (4.56)$$

que leva a expressão (4.57).

$$\sum_{i=1}^n Y_{i,u} h_{i,u} = \sum_{i=1}^n Y_{i,b} h_{i,b} \quad (4.57)$$

Considerando a dependência da entalpia com a temperatura dada pelo equação (4.58), pode-se reescrever a equação (4.57) de acordo com a equação (4.59).

$$h_i = h_{i,\text{ref}} + \int_{T_{\text{ref}}}^T c_{p,i} dT \quad (4.58)$$

$$\sum_{i=1}^n (Y_{i,u} - Y_{i,b}) h_{i,\text{ref}} = \int_{T_{\text{ref}}}^{T_b} c_{p,b} dT - \int_{T_{\text{ref}}}^{T_u} c_{p,u} dT \quad (4.59)$$

As capacidades caloríficas específicas $c_{p,b}$ e $c_{p,u}$ podem ser obtidas a partir da fração mássica dos componentes na mistura, conforme equação (4.60).

$$c_{p,b} = \sum_{i=1}^n Y_{i,b} c_{p,i}; \quad c_{p,u} = \sum_{i=1}^n Y_{i,u} c_{p,i} \quad (4.60)$$

Considerando a reação global dada pela equação (3.15), pode-se escrever a variação da fração mássica de um composto i presente na reação com a variação da fração de combustível F , de acordo com a expressão (4.61).

$$Y_{i,u} - Y_{i,b} = (Y_{F,u} - Y_{F,b}) \frac{\nu_i W_i}{\nu_F W_F} \quad (4.61)$$

Multiplicando a equação (4.61) por $h_{i,\text{ref}}$ e aplicando a soma para todos os componentes da reação, resulta na equação (4.62).

$$\sum_{i=1}^n (Y_{i,u} - Y_{i,b}) h_{i,\text{ref}} = \frac{(Y_{F,u} - Y_{F,b})}{\nu_F W_F} \sum_{i=1}^n \nu_i W_i h_{i,\text{ref}} \quad (4.62)$$

O calor de combustão pode ser definido de acordo com a equação (4.63).

$$Q = - \sum_{i=1}^n \nu_i W_i h_i = - \sum_{i=1}^n \nu_i H_i \quad (4.63)$$

De modo a simplificar a formulação, o calor de combustão será considerado constante com a temperatura, igual a Q_{ref} (Eq. 4.64). Será considerado, também, $c_{p,b}$ aproximadamente constante e $T_u = T_{\text{ref}}$.

$$Q_{\text{ref}} = - \sum_{i=1}^n \nu_i H_{i,\text{ref}} \quad (4.64)$$

Considerando a mistura pobre em combustível ($Y_{F,b} = 0$), e combinando as equações (4.59), (4.62) e (4.64), obtém-se uma expressão para a temperatura em função da fração mássica de combustível na mistura não queimada, conforme mostrado na equação (4.65).

$$T_b - T_u = \frac{Q_{\text{ref}} Y_{F,u}}{c_p (-\nu_F) W_F} \quad (4.65)$$

Para o caso em que a mistura é rica em combustível ($Y_{O_2,b} = 0$), torna-se necessário escrever a variação do composto i em relação a variação da fração mássica de oxigênio, mostrada pela equação (4.66).

$$Y_{i,u} - Y_{i,b} = (Y_{O_2,u} - Y_{O_2,b}) \frac{\nu_i W_i}{\nu_{O_2} W_{O_2}} \quad (4.66)$$

Realizando o mesmo procedimento empregado na equação (4.65), obtém-se uma expressão para a temperatura no caso em que a mistura é rica em combustível, conforme indicado na equação (4.67).

$$T_b - T_u = \frac{Q_{\text{ref}} Y_{O_2,u}}{c_p (-\nu_{O_2}) W_{O_2}} \quad (4.67)$$

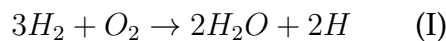
Considerando as definições de fração de mistura dadas por (3.13) e (3.14), tem-se uma expressão simplificada da temperatura da chama com relação a Z (Eq. 4.68). Essa expressão é conhecida como solução de Burke-Schumann.

$$\begin{cases} T = T_u + \frac{Q Y_{F,1}}{c_p (-\nu_F) W_F} Z & Z \leq Z_{st} \\ T = T_u + \frac{Q Y_{O_2,2}}{c_p (-\nu_{O_2}) W_{O_2}} (1 - Z) & Z \geq Z_{st} \end{cases} \quad (4.68)$$

A seguir será mostrada a metodologia analítico-numérica empregada quando se considera reações de combustão com mais de um passo.

4.3 Solução Analítico-Numérica

Considere um mecanismo de reação de dois passos para a combustão do hidrogênio.





Neste caso, a definição clássica da fração de mistura se mantém. No entanto, somente o seu valor não possibilita a determinação das concentrações dos componentes das reações intermediárias. De modo a quantificar esses compostos, torna-se necessário decompor a fração de mistura em partes constitutivas, onde cada parte está diretamente relacionada com a fração mássica de um composto que compõe o mecanismo (Floyd e McGrattan, 2007).

Escrevendo as taxas de geração dos componentes H_2 , H e H_2O , de acordo com as equações (4.69), (4.70) e (4.71), resulta:

$$\bar{r}_{H_2} = -3K_1 \left(\frac{\bar{\rho} \tilde{Y}_{H_2}}{W_{H_2}} \right)^3 \left(\frac{\bar{\rho} \tilde{Y}_{O_2}}{W_{O_2}} \right) + K_2 \left(\frac{\bar{\rho} \tilde{Y}_H}{W_H} \right)^2, \quad (4.69)$$

$$\bar{r}_H = 2K_1 \left(\frac{\bar{\rho} \tilde{Y}_{H_2}}{W_{H_2}} \right)^3 \left(\frac{\bar{\rho} \tilde{Y}_{O_2}}{W_{O_2}} \right) - 2K_2 \left(\frac{\bar{\rho} \tilde{Y}_H}{W_H} \right)^2. \quad (4.70)$$

$$\bar{r}_{H_2O} = 2K_1 \left(\frac{\bar{\rho} \tilde{Y}_{H_2}}{W_{H_2}} \right)^3 \left(\frac{\bar{\rho} \tilde{Y}_{O_2}}{W_{O_2}} \right), \quad (4.71)$$

onde K_1 e K_2 correspondem as velocidades específicas de reação para as reações *I* e *II*, respectivamente.

Combinando as taxas de geração de H_2 , H e H_2O de modo que o valor resultante seja zero, chega-se na equação (4.72).

$$2(\bar{r}_{H_2}) + 2(\bar{r}_{H_2O}) + (\bar{r}_H) = 0 \quad (4.72)$$

Partindo da equação da taxa de reação (Eq. 4.73) e substituindo-a na equação (4.72), pode-se desenvolver a equação (4.74) que relaciona a variação das frações mássicas de H_2 , H e H_2O .

$$r_i = \frac{1}{V} \frac{dn_i}{dt} \quad (4.73)$$

$$dY_{H_2} + \left(\frac{W_{H_2}}{W_{H_2O}} \right) dY_{H_2O} + dY_H = 0 \quad (4.74)$$

Utilizando a definição de fração de mistura dada pela equação (4.1), e integrando a expressão (4.74), desde o tempo $t = 0$ (considerando as concentrações de H_2O e H nulas no início da reação) até um tempo t qualquer, chega-se na expressão (4.75) para fração de mistura.

$$\tilde{Z} = \left(\tilde{Y}_{H_2} + \frac{W_{H_2}}{W_{H_2O}} \tilde{Y}_{H_2O} + \tilde{Y}_H \right) \frac{1}{Y_{H_2,1}} \quad (4.75)$$

onde $Y_{H_2,1}$ corresponde a fração mássica de H_2 no jato de combustível que sai do bocal.

Desse modo, pode-se decompor a fração de mistura em três termos, cada um relacionado com a fração mássica de um composto das reações que compõem o mecanismo de dois passos (Eq. 4.76).

$$\tilde{Z}_1 = \frac{\tilde{Y}_{H_2}}{Y_{H_2,1}}, \quad \tilde{Z}_2 = \left(\frac{W_{H_2}}{W_{H_2O}} \right) \left(\frac{\tilde{Y}_{H_2O}}{Y_{H_2,1}} \right), \quad \tilde{Z}_3 = \frac{\tilde{Y}_H}{Y_{H_2,1}} \quad (4.76)$$

O balanço de massa para os componentes H_2 , O_2 , H e H_2O pode ser descrito pelas equações (4.78), (4.79), (4.80) e (4.81), sendo feitas as seguintes considerações:

- Desprezaram-se os efeitos do gradiente de pressão.
- Desprezou-se o componente de transporte molecular $\left(\overline{\rho \frac{\nu}{Sc} \vec{\nabla} \tilde{Y}_k} \right)$ quando comparado ao transporte turbulento $\left(\overline{\rho \tilde{V}_j \tilde{Y}_k} \right)$.
- O termo turbulento foi modelado considerando a hipótese do gradiente de transporte, conforme descrito pela equação (4.77).

$$-\overline{\rho (\tilde{V}_j \tilde{Y}_k)} = \overline{\rho} \frac{\nu_t}{Sc} \frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial x_j} \quad (4.77)$$

$$\overline{\rho} \frac{\partial \tilde{Y}_{H_2}}{\partial t} + \overline{\rho} \tilde{V}_j \frac{\partial \tilde{Y}_{H_2}}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\overline{\rho} \frac{\nu_t}{Sc} \frac{\partial \tilde{Y}_{H_2}}{\partial x_j} \right) + \dot{m}_{H_2} \quad (4.78)$$

$$\overline{\rho} \frac{\partial \tilde{Y}_{O_2}}{\partial t} + \overline{\rho} \tilde{V}_j \frac{\partial \tilde{Y}_{O_2}}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\overline{\rho} \frac{\nu_t}{Sc} \frac{\partial \tilde{Y}_{O_2}}{\partial x_j} \right) + \dot{m}_{O_2} \quad (4.79)$$

$$\overline{\rho} \frac{\partial \tilde{Y}_H}{\partial t} + \overline{\rho} \tilde{V}_j \frac{\partial \tilde{Y}_H}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\overline{\rho} \frac{\nu_t}{Sc} \frac{\partial \tilde{Y}_H}{\partial x_j} \right) + \dot{m}_H \quad (4.80)$$

$$\overline{\rho} \frac{\partial \tilde{Y}_{H_2O}}{\partial t} + \overline{\rho} \tilde{V}_j \frac{\partial \tilde{Y}_{H_2O}}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\overline{\rho} \frac{\nu_t}{Sc} \frac{\partial \tilde{Y}_{H_2O}}{\partial x_j} \right) + \dot{m}_{H_2O} \quad (4.81)$$

Substituindo as equações para \tilde{Z}_1 , \tilde{Z}_2 e \tilde{Z}_3 (Eq. (4.76)) nas equações de balanço de massa por componente (Eq. (4.78), (4.80) e (4.81)), chega-se nas equações (4.82), (4.83) e (4.84), expressas em coordenadas cilíndricas.

$$\overline{\rho} r \frac{\partial \tilde{Z}_1}{\partial t} + \overline{\rho} \tilde{u} r \frac{\partial \tilde{Z}_1}{\partial x} + \overline{\rho} \tilde{v} r \frac{\partial \tilde{Z}_1}{\partial r} = \frac{\partial}{\partial r} \left(\overline{\rho} \frac{\nu_t r}{Sc} \frac{\partial \tilde{Z}_1}{\partial r} \right) + \left(\frac{W_{H_2}}{Y_{H_2,1}} \right) r \bar{r}_{H_2} \quad (4.82)$$

$$\overline{\rho} r \frac{\partial \tilde{Z}_2}{\partial t} + \overline{\rho} \tilde{u} r \frac{\partial \tilde{Z}_2}{\partial x} + \overline{\rho} \tilde{v} r \frac{\partial \tilde{Z}_2}{\partial r} = \frac{\partial}{\partial r} \left(\overline{\rho} \frac{\nu_t r}{Sc} \frac{\partial \tilde{Z}_2}{\partial r} \right) + \left(\frac{W_{H_2}}{Y_{H_2,1}} \right) r \bar{r}_{H_2O} \quad (4.83)$$

$$\overline{\rho} r \frac{\partial \tilde{Z}_3}{\partial t} + \overline{\rho} \tilde{u} r \frac{\partial \tilde{Z}_3}{\partial x} + \overline{\rho} \tilde{v} r \frac{\partial \tilde{Z}_3}{\partial r} = \frac{\partial}{\partial r} \left(\overline{\rho} \frac{\nu_t r}{Sc} \frac{\partial \tilde{Z}_3}{\partial r} \right) + \left(\frac{W_{H_2}}{2 Y_{H_2,1}} \right) r \bar{r}_H \quad (4.84)$$

Desse modo, o sistema de equações passa a ser composto por \tilde{Z}_1 , \tilde{Z}_2 e \tilde{Z}_3 , ao invés de uma única fração de mistura.

Substituindo a relação dada por (4.76) nas equações (4.69), (4.71) e (4.70), torna-se possível expressar as taxas de reação em função das frações \tilde{Z}_1 , \tilde{Z}_2 e \tilde{Z}_3 (Eq. (4.85), (4.86) e (4.87)):

$$\bar{r}_{H_2} = -3K_1\bar{\rho}^4 \left(\frac{\tilde{Z}_1 Y_{H_2,1}}{W_{H_2}} \right)^3 \left(\frac{\tilde{Y}_{O_2}}{W_{O_2}} \right) + 4K_2\bar{\rho}^2 \left(\frac{\tilde{Z}_3 Y_{H_2,1}}{W_{H_2}} \right)^2, \quad (4.85)$$

$$\bar{r}_{H_2O} = 2K_1\bar{\rho}^4 \left(\frac{\tilde{Z}_1 Y_{H_2,1}}{W_{H_2}} \right)^3 \left(\frac{\tilde{Y}_{O_2}}{W_{O_2}} \right), \quad (4.86)$$

$$\bar{r}_H = 2K_1\bar{\rho}^4 \left(\frac{\tilde{Z}_1 Y_{H_2,1}}{W_{H_2}} \right)^3 \left(\frac{\tilde{Y}_{O_2}}{W_{O_2}} \right) - 8K_2\bar{\rho}^2 \left(\frac{\tilde{Z}_3 \tilde{Y}_{H_2,1}}{W_{H_2}} \right)^2. \quad (4.87)$$

Efetuando-se a soma das equações (4.82), (4.83) e (4.84), os termos que correspondem as taxas das reações químicas se cancelam, obtendo-se a equação para fração de mistura, dada pela equação (3.63).

De modo a diminuir o número de variáveis a se determinar, utilizou-se os resultados analíticos obtidos para a função corrente adimensional (F) e fração de mistura (Z) deduzidos na Seção 4.1.1. Para simplificar as equações, considerou-se o número de Schmidt constante ao longo da chama, resultando nas equações (4.90) e (4.91), para F e Z respectivamente. Os valores das variáveis γ e viscosidade turbulenta (ν_{tr}) que aparecem nessas expressões estão indicados em (4.88) e (4.89).

$$\gamma^2 = \frac{3}{64} \left(\frac{\rho_0}{\rho_\infty C^2} \right) \left(\frac{u_0 D}{\nu_{tr}} \right)^2 \quad (4.88)$$

$$\frac{\nu_{tr}}{D} = \sqrt{\frac{3}{128}} \left(\frac{\rho_0}{\rho_\infty C} \right)^{1/2} \left(\frac{x}{\zeta} \right)^{1/2} c u_0 \quad (4.89)$$

$$F = C (\gamma \eta)^2 \left(1 + \frac{(\gamma \eta)^2}{4} \right)^{-1} \quad (4.90)$$

$$\tilde{Z} = \frac{1}{32} \frac{\rho_0}{\rho_\infty C} \left(\frac{u_0 D}{\nu_{tr}} \right) \left(\frac{\zeta}{D} \right)^{-1} (2Sc + 1) \left(1 + \frac{(\gamma \eta)^2}{4} \right)^{-2Sc} \quad (4.91)$$

De posse da expressão para a função corrente adimensional, determina-se as equações para velocidade axial e radial de acordo com a relação (4.12), obtendo-se as expressões (4.92) e (4.93).

$$\tilde{u} = \frac{3}{32} \left(\frac{\rho_0}{\rho_\infty C} \right) \left(\frac{u_0 D}{\nu_{tr}} \right) \left(\frac{\zeta}{D} \right)^{-1} \left(1 + \frac{(\gamma \eta)^2}{4} \right)^{-2} \quad (4.92)$$

$$\tilde{v} = -\frac{1}{r} \frac{\rho_\infty}{\bar{\rho}} \nu_{tr} \left(F - \eta \frac{\partial F}{\partial \eta} \right) \quad (4.93)$$

Com relação a temperatura, foi considerada válida a solução de Burke-Schumann para chamas difusivas, expressa na equação (4.94):

$$\tilde{T} = \begin{cases} \tilde{T}_u + \frac{QY_{H_2,1}}{c_p\nu_{H_2}W_F}\tilde{Z} & \tilde{Z} \leq Z_{st} \\ \tilde{T}_u + \frac{QY_{O_2,2}}{c_p\nu_{O_2}W_{O_2}}(1 - \tilde{Z}) & \tilde{Z} > Z_{st} \end{cases} \quad (4.94)$$

$$\tilde{T}_u = T_\infty - \tilde{Z}(T_\infty - T_0)$$

onde Q corresponde ao calor da reação global, enquanto ν_{H_2} e ν_{O_2} correspondem, respectivamente, aos coeficientes estequiométricos de H_2 e O_2 na reação global.

Para a quantificação da massa específica, foi considerado que os gases envolvidos seguem o comportamento de um gás ideal:

$$\bar{\rho} = \frac{P W}{R \tilde{T}} \quad (4.95)$$

onde W corresponde à massa molar média da mistura gasosa. De modo análogo ao desenvolvimento analítico realizado na Seção 3.3, desprezaram-se os gradientes de pressão, de forma que P é constante com relação a ζ e η .

Desse modo, sobram três variáveis a serem determinadas (\tilde{Z}_1 , \tilde{Z}_2 e \tilde{Y}_{O_2}). Considerando as equações (4.82), (4.83), (4.84) em estado estacionário, tem-se o sistema de equações representado em (4.96), (4.97) e (4.98).

$$\bar{\rho}\tilde{u}r \frac{\partial \tilde{Z}_1}{\partial x} + \bar{\rho}\tilde{v}r \frac{\partial \tilde{Z}_1}{\partial r} = \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{\bar{\rho}\nu r}{Sc} \frac{\partial \tilde{Z}_1}{\partial r} \right) + \left(\frac{W_{H_2}}{Y_{H_2,1}} \right) r \bar{r}_{H_2} \quad (4.96)$$

$$\bar{\rho}\tilde{u}r \frac{\partial \tilde{Z}_2}{\partial x} + \bar{\rho}\tilde{v}r \frac{\partial \tilde{Z}_2}{\partial r} = \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{\bar{\rho}\nu r}{Sc} \frac{\partial \tilde{Z}_2}{\partial r} \right) + \left(\frac{W_{H_2}}{Y_{H_2,1}} \right) r \bar{r}_{H_2O} \quad (4.97)$$

$$\bar{\rho}\tilde{u}r \frac{\partial \tilde{Y}_{O_2}}{\partial x} + \bar{\rho}\tilde{v}r \frac{\partial \tilde{Y}_{O_2}}{\partial r} = \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{\bar{\rho}\nu r}{Sc} \frac{\partial \tilde{Y}_{O_2}}{\partial r} \right) + W_{O_2} r \bar{r}_{O_2} \quad (4.98)$$

com condições de contorno dadas por (4.99).

$$\begin{aligned} r = 0 : & \quad \frac{\partial \tilde{Z}_i}{\partial r} = 0 \quad (i=1,2), \quad \frac{\partial \tilde{Y}_{O_2}}{\partial r} = 0 \\ r \rightarrow \infty : & \quad \tilde{Z}_i = 0 \quad (i=1,2), \quad \tilde{Y}_{O_2} = \tilde{Y}_{O_2,2} \\ x = 0 : & \quad \begin{cases} \tilde{Z}_1(r \leq R) = 1 \\ \tilde{Z}_1(r > R) = 0 \end{cases}, \quad \tilde{Z}_2 = 0, \quad \begin{cases} \tilde{Y}_{O_2}(r \leq R) = 0 \\ \tilde{Y}_{O_2}(r > R) = Y_{O_2,2} \end{cases} \end{aligned} \quad (4.99)$$

Aplicando a transformação de coordenadas $(x, r) \rightarrow (\zeta, \eta)$, de modo análogo a metodologia adotada no Capítulo 4.1 para as equações (4.96), (4.97) e (4.98), resulta no conjunto de equações descrito por (4.100), (4.101) e (4.102).

$$\frac{1}{\eta} \left[\zeta \left(\frac{\partial F}{\partial \eta} \right) \left(\frac{\partial \tilde{Z}_1}{\partial \zeta} \right) - F \left(\frac{\partial \tilde{Z}_1}{\partial \eta} \right) \right] = \frac{1}{\eta} \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{C}{Sc} \eta \frac{\partial \tilde{Z}_1}{\partial \eta} \right) + \frac{W_{H_2} \bar{r}_{H_2}}{\bar{\rho} \nu_{tr} Y_{H_2,1}} \zeta^2 \quad (4.100)$$

$$\frac{1}{\eta} \left[\zeta \left(\frac{\partial F}{\partial \eta} \right) \left(\frac{\partial \tilde{Z}_2}{\partial \zeta} \right) - F \left(\frac{\partial \tilde{Z}_2}{\partial \eta} \right) \right] = \frac{1}{\eta} \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{C}{Sc} \eta \frac{\partial \tilde{Z}_2}{\partial \eta} \right) + \frac{W_{H_2} \bar{T}_{H_2 O}}{\bar{\rho} \nu_{tr} Y_{H_2,1}} \zeta^2 \quad (4.101)$$

$$\frac{1}{\eta} \left[\zeta \left(\frac{\partial F}{\partial \eta} \right) \left(\frac{\partial \tilde{Y}_{O_2}}{\partial \zeta} \right) - F \left(\frac{\partial \tilde{Y}_{O_2}}{\partial \eta} \right) \right] = \frac{1}{\eta} \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{C}{Sc} \eta \frac{\partial \tilde{Y}_{O_2}}{\partial \eta} \right) + \frac{W_{O_2} \bar{T}_{O_2}}{\bar{\rho} \nu_{tr}} \zeta^2 \quad (4.102)$$

Resolveu-se numericamente as equações (4.100), (4.101) e (4.102) para \tilde{Z}_1 , \tilde{Z}_2 , \tilde{Y}_{O_2} pelo método das diferenças finitas, utilizando as soluções analíticas obtidas para F (Eq. 4.90), \tilde{T} (Eq. 4.94) e $\tilde{\rho}$ (Eq. 4.95).

4.3.1 Discretização em Diferenças Finitas

O método das diferenças finitas consiste em um método numérico para resolução de equações diferenciais parciais, baseado na aproximação de derivadas por séries de Taylor. Esse método é de fácil implementação, e produz resultados satisfatórios.

Para resolução do sistema de equações diferenciais, utilizou-se diferenças finitas centrais para a derivada de primeira ordem ao longo de η , e diferenças para frente na derivada de primeira ordem com relação à ζ , conforme mostrado nas equações (4.103) e (4.104).

$$\left(\frac{\partial f}{\partial \zeta} \right) \approx \frac{(f_{(i+1,j)} - f_{(i,j)})}{\Delta \zeta} \quad (4.103)$$

$$\left(\frac{\partial f}{\partial \eta} \right) \approx \frac{(f_{(i,j+1)} - f_{(i,j-1)})}{2\Delta \eta} \quad (4.104)$$

As derivadas espaciais de segunda ordem ao longo de η foram aproximadas por diferenças finitas centrais, como visto na equações (4.105).

$$\left(\frac{\partial^2 f}{\partial \eta^2} \right) \approx \frac{(f_{(i,j+1)} - 2f_{(i,j)} + f_{(i,j-1)})}{\Delta \eta^2} \quad (4.105)$$

Desse modo, discretizando-se as equações (4.100), (4.101) e (4.102) de acordo com as expressões (4.103), (4.104) e (4.105), obtém-se o conjunto de expressões desde (4.106) até (4.120).

Para $r \neq 0$:

$$\begin{aligned} (\tilde{Z}_1)_{i+1,j} = & (\tilde{Z}_1)_{i-1,j} + 2 \frac{(\zeta_{i+1} - \zeta_i)}{\zeta_i} \left(\frac{\partial F}{\partial \eta} \right)^{-1} \left[F \left(\frac{\Delta \tilde{Z}_1}{\Delta \eta} \right) + \frac{C}{Sc} \left(\frac{\Delta \tilde{Z}_1}{\Delta \eta} + \right. \right. \\ & \left. \left. + \eta_j \frac{\Delta^2 \tilde{Z}_1}{\Delta \eta^2} \right) + \frac{W_{H_2} \bar{T}_{H_2}}{\bar{\rho}_{i,j} \nu_{tr} Y_{H_2,1}} \zeta_i^2 \eta_j \right] \end{aligned} \quad (4.106)$$

$$\frac{\Delta \tilde{Z}_1}{\Delta \eta} = \frac{(\tilde{Z}_1)_{i,j+1} - (\tilde{Z}_1)_{i,j-1}}{2(\eta_{j+1} - \eta_j)}; \quad (4.107)$$

$$\frac{\Delta^2 \tilde{Z}_1}{\Delta \eta^2} = \frac{(\tilde{Z}_1)_{i,j+1} - 2(\tilde{Z}_1)_{i,j} + (\tilde{Z}_1)_{i,j-1}}{(\eta_{j+1} - \eta_j)^2} \quad (4.108)$$

$$\begin{aligned} (\tilde{Z}_2)_{i+1,j} = & (\tilde{Z}_2)_{i-1,j} + 2 \frac{(\zeta_{i+1} - \zeta_i)}{\zeta_i} \left(\frac{\partial F}{\partial \eta} \right)^{-1} \left[F \left(\frac{\Delta \tilde{Z}_2}{\Delta \eta} \right) + \frac{C}{Sc} \left(\frac{\Delta \tilde{Z}_2}{\Delta \eta} + \right. \right. \\ & \left. \left. + \eta_j \frac{\Delta^2 \tilde{Z}_2}{\Delta \eta^2} \right) + \frac{W_{H_2} \bar{r}_{H_2O}}{\bar{\rho}_{i,j} \nu_{tr} Y_{H_2,1}} \zeta_i^2 \eta_j \right] \end{aligned} \quad (4.109)$$

$$\frac{\Delta \tilde{Z}_2}{\Delta \eta} = \frac{(\tilde{Z}_2)_{i,j+1} - (\tilde{Z}_2)_{i,j-1}}{2(\eta_{j+1} - \eta_j)}; \quad (4.110)$$

$$\frac{\Delta^2 \tilde{Z}_2}{\Delta \eta^2} = \frac{(\tilde{Z}_2)_{i,j+1} - 2(\tilde{Z}_2)_{i,j} + (\tilde{Z}_2)_{i,j-1}}{(\eta_{j+1} - \eta_j)^2} \quad (4.111)$$

$$\begin{aligned} (\tilde{Y}_{O_2})_{i+1,j} = & (\tilde{Y}_{O_2})_{i-1,j} + 2 \frac{(\zeta_{i+1} - \zeta_i)}{\zeta_i} \left(\frac{\partial F}{\partial \eta} \right)^{-1} \left[F \left(\frac{\Delta \tilde{Y}_{O_2}}{\Delta \eta} \right) + \frac{C}{Sc} \left(\frac{\Delta \tilde{Y}_{O_2}}{\Delta \eta} + \right. \right. \\ & \left. \left. + \eta_j \frac{\Delta^2 \tilde{Y}_{O_2}}{\Delta \eta^2} \right) + \frac{W_{O_2} \bar{r}_{O_2}}{\bar{\rho}_{i,j} \nu_{tr}} \zeta_i^2 \eta_j \right] \end{aligned} \quad (4.112)$$

$$\frac{\Delta \tilde{Y}_{O_2}}{\Delta \eta} = \frac{(\tilde{Y}_{O_2})_{i,j+1} - (\tilde{Y}_{O_2})_{i,j-1}}{2(\eta_{j+1} - \eta_j)}; \quad (4.113)$$

$$\frac{\Delta^2 \tilde{Y}_{O_2}}{\Delta \eta^2} = \frac{(\tilde{Y}_{O_2})_{i,j+1} - 2(\tilde{Y}_{O_2})_{i,j} + (\tilde{Y}_{O_2})_{i,j-1}}{(\eta_{j+1} - \eta_j)^2} \quad (4.114)$$

Para $r = 0$:

$$\begin{aligned} (\tilde{Z}_1)_{i+1,0} = & (\tilde{Z}_1)_{i-1,0} + 2 \frac{(\zeta_{i+1} - \zeta_i)}{\zeta_i} \left(\frac{\partial^2 F}{\partial \eta^2} \right) \Big|_{\eta=0}^{-1} \left[\frac{2C}{Sc} \left(\frac{\Delta^2 \tilde{Z}_1}{\Delta \eta^2} \right) \Big|_{\eta=0} + \right. \\ & \left. + \frac{W_{H_2} \bar{r}_{H_2}}{\bar{\rho}_{i,j} \nu_{tr} Y_{H_2,1}} \zeta_i^2 \right] \end{aligned} \quad (4.115)$$

$$\frac{\Delta^2 \tilde{Z}_1}{\Delta \eta^2} \Big|_{\eta=0} = 2 \frac{((\tilde{Z}_1)_{i,1} - (\tilde{Z}_1)_{i,0})}{(\eta_{j+1} - \eta_j)^2} \quad (4.116)$$

$$\begin{aligned} (\tilde{Z}_2)_{i+1,0} = & (\tilde{Z}_2)_{i-1,0} + 2 \frac{(\zeta_{i+1} - \zeta_i)}{\zeta_i} \left(\frac{\partial^2 F}{\partial \eta^2} \right) \Big|_{\eta=0}^{-1} \left[\frac{2C}{Sc} \left(\frac{\Delta^2 \tilde{Z}_2}{\Delta \eta^2} \right) \Big|_{\eta=0} + \right. \\ & \left. + \frac{W_{H_2} \bar{r}_{H_2O}}{\bar{\rho}_{i,j} \nu_{tr} Y_{H_2,1}} \zeta_i^2 \right] \end{aligned} \quad (4.117)$$

$$\frac{\Delta^2 \tilde{Z}_2}{\Delta \eta^2} = 2 \frac{\left((\tilde{Z}_2)_{i,1} - (\tilde{Z}_2)_{i,0} \right)}{(\eta_{j+1} - \eta_j)^2} \quad (4.118)$$

$$(\tilde{Y}_{O_2})_{i+1,0} = (\tilde{Y}_{O_2})_{i-1,0} + 2 \frac{(\zeta_{i+1} - \zeta_i)}{\zeta_i} \left(\frac{\partial^2 F}{\partial \eta^2} \right) \Big|_{\eta=0}^{-1} \left[\frac{2C}{Sc} \left(\frac{\Delta^2 \tilde{Y}_{O_2}}{\Delta \eta^2} \right) \Big|_{\eta=0} + \right. \\ \left. + \frac{W_{O_2} \bar{r}_{O_2}}{\bar{\rho}_{i,j} \nu_{tr}} \zeta_i^2 \right] \quad (4.119)$$

$$\frac{\Delta^2 \tilde{Y}_{O_2}}{\Delta \eta^2} \Big|_{\eta=0} = 2 \frac{\left((\tilde{Y}_{O_2})_{i,1} - (\tilde{Y}_{O_2})_{i,0} \right)}{(\eta_{j+1} - \eta_j)^2} \quad (4.120)$$

Esse conjunto de equações foi resolvido numericamente para uma chama de H_2/N_2 (50/50% molar), considerando-se as propriedades da mistura gasosa dadas pela tabela (4.1), obtidas a partir de uma temperatura média da chama de 1000K.

Tabela 4.1: Propriedades da mistura H_2/N_2

Parâmetros	Unid.	Valores
$Y_{H_2,1}$	adim.	0,067
$Y_{O_2,2}$	adim.	0,2329
c_p	$J/(KgK)$	1167
ν	m^2/s	$1,19 \cdot 10^{-4}$
λ	$W/(mK)$	$6,67 \cdot 10^{-2}$
Sc	adim.	0,89
C	adim.	0,488
c	adim.	0,06
Z_{st}	adim.	0,3025

No próximo capítulo serão apresentados os resultados obtidos no presente trabalho.

Capítulo 5

Resultados

Neste capítulo, serão mostrados os resultados obtidos seguindo as metodologias descritas no Capítulo 4, sendo dividido em duas seções: uma contendo o resultado analítico, e outra mostrando os resultados da metodologia analítico-numérica.

5.1 Resultado Analítico

Os resultados analíticos obtidos para a fração de mistura, considerando a viscosidade turbulenta de Agrawal e Prasad (2003) aproximada por uma série de Taylor truncada no 2º e 3º termos (Eqs. 4.31, 4.35, 4.53 e 4.54) foram comparados com dados experimentais (Barlow, 2010) para uma chama difusiva de hidrogênio/nitrogênio (50/50% em volume) na forma de jato. As figuras 5.1, 5.2, 5.3 e 5.4 mostram a comparação dos resultados obtidos para a fração de mistura com dados experimentais.

A figura 5.1 mostra a comparação entre as frações de mistura analíticas, obtidas nas seções 4.1.1 e 4.1.2, com dados experimentais ao longo da linha de centro do jato ($r = 0$). Os resultados obtidos possuem um comportamento decrescente ao longo da coordenada axial, o que corresponde ao comportamento usual de uma chama não confinada na forma de jato.

As figuras 5.2, 5.3 e 5.4 mostram a comparação entre as frações de mistura analíticas e dados experimentais para x/d igual a 20, 40 e 60, respectivamente.

Na solução analítica que utiliza a viscosidade turbulenta de Agrawal e Prasad (2003) aproximada por uma série de Taylor truncada no 2º termo, a expressão obtida ao longo da linha de centro da chama é válida para $x/d \gtrsim 10$, conforme mostra a figura 5.1. Isto se deve à existência do comportamento potencial na entrada do jato, não descrito pelo presente modelo. A expressão obtida para a fração de mistura varia ao longo da coordenada axial de modo similar a x^{-1} , fazendo com que a fração de mistura aumente muito para valores pequenos de x/d , o que faz com que ela não seja capaz de representar a entrada do jato. Além disso, o comportamento da solução analítica difere levemente dos dados experimentais com relação a concavidade da curva. A curva

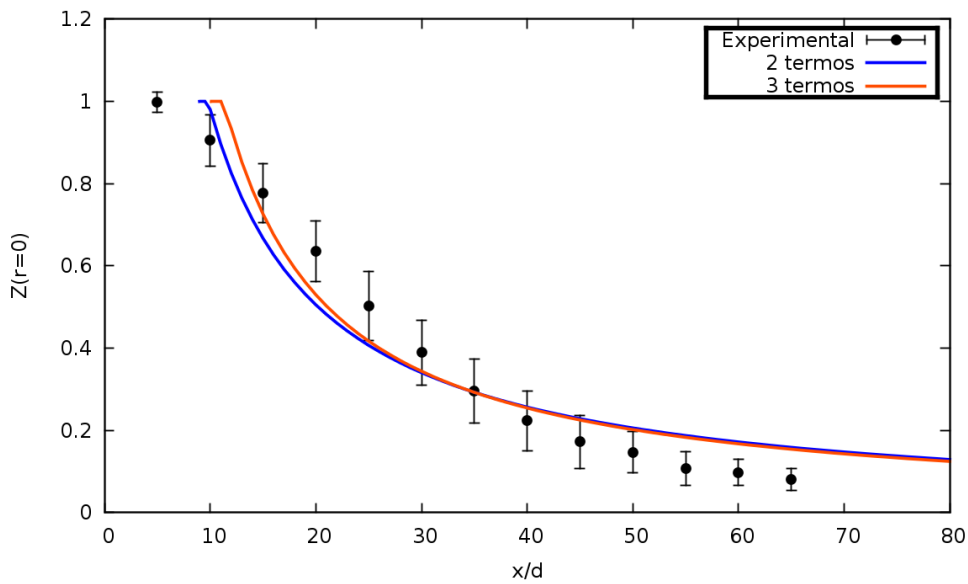


Figura 5.1: Comparação entre a fração de mistura analítica e a experimental ao longo da linha de centro do jato, utilizando a viscosidade turbulenta de Agrawal e Prasad (2003)

analítica possui concavidade positiva com relação a x , enquanto os pontos experimentais seguem um comportamento similar ao da função e^{-cx^2} . De acordo com De Bortoli (2009), o perfil da fração de mistura na coordenada axial possui um comportamento similar a uma função Gaussiana.

Para a solução analítica na qual a viscosidade turbulenta de Agrawal e Prasad (2003) foi aproximada por uma série de Taylor truncada no 3º termo, a curva obtida ao longo da linha de centro também apresenta um decrescimento proporcional a x^{-1} , sendo que a solução é válida para $x/d \gtrsim 11$. De modo similar ao comportamento apresentado na solução com os 2 termos, o comportamento da curva analítica difere dos dados experimentais, pois a curva possui um formato similar a x^{-1} .

Já ao longo da coordenada radial (Figuras 5.2, 5.3 e 5.4), para $x/d = 40$ e $x/d = 60$, as duas soluções analíticas possuem um comportamento bastante similar aos pontos experimentais. Para $x/d = 20$, os resultados apresentam maior discrepância no início da chama, com as diferenças tendendo a diminuir à medida que o valor do raio aumenta.

Os resultados obtidos com a série de Taylor truncada no 3º termo ficaram levemente mais próximos dos dados experimentais do que os resultados com a série truncada no 2º termo. Os comportamentos apresentados pelas curvas analíticas dos dois casos foram bem similares. A aproximação do termo exponencial da viscosidade turbulenta por uma série de Taylor truncada no 3º termo aumentou consideravelmente a complexidade do sistema de equações, quando comparada a metodologia que utiliza somente até o 2º termo na aproximação. Porém, comparando as equações obtidas e os resultados analíticos, a inclusão do terceiro termo na aproximação trouxe uma melhora pequena nos resultados, de modo que torna a metodologia utilizada na Seção

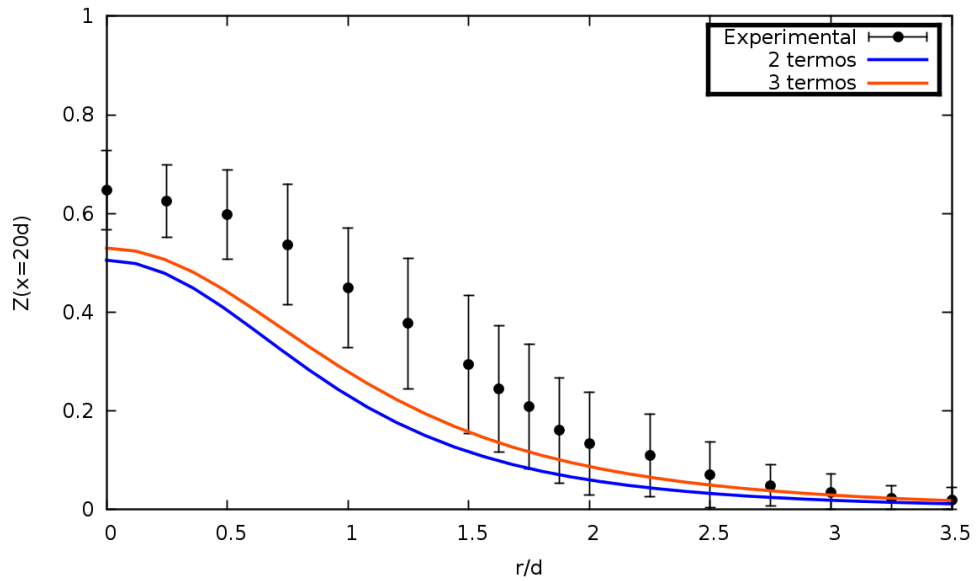


Figura 5.2: Comparação entre a fração de mistura analítica e a experimental para $x = 20d$, utilizando a viscosidade turbulenta de Agrawal e Prasad (2003)

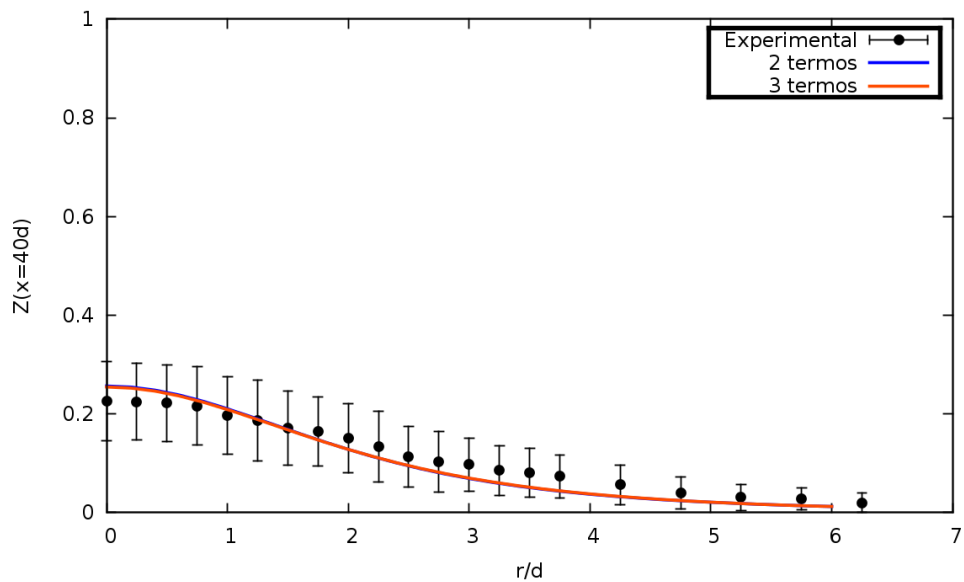


Figura 5.3: Comparação entre a fração de mistura analítica e a experimental para $x = 40d$, utilizando a viscosidade turbulenta de Agrawal e Prasad (2003)

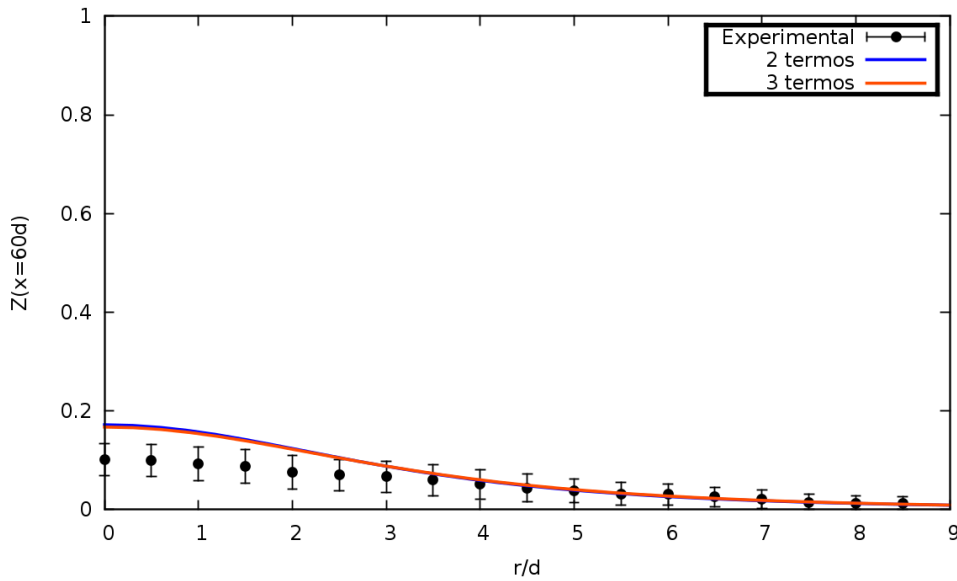


Figura 5.4: Comparação entre a fração de mistura analítica e a experimental para $x = 60d$, utilizando a viscosidade turbulenta de Agrawal e Prasad (2003)

4.1.2 pouco atraente, uma vez que o terceiro termo da aproximação pode ser desprezado sem acarretar em alterações significativas no resultado obtido.

5.2 Resultado Analítico-Numérico

Os resultados analítico-numéricos descritos na Seção 4.3 foram comparados com os dados obtidos por (Barlow, 2010) para uma chama difusiva de hidrogênio/nitrogênio (50/50%).

A figura 5.5 compara os dados simulados com o experimento para \tilde{Z}_1 e \tilde{Z}_2 ao longo da linha de centro do jato. Em decorrência da utilização do resultado analítico para \tilde{Z} , obtido na Seção 4.1.1, na formulação analítico-numérica, as curvas obtidas para \tilde{Z}_1 e \tilde{Z}_2 não são capazes de representar satisfatoriamente o jato próximo da saída do bocal, sendo válidas para $x/d \gtrsim 13$. A curva obtida para \tilde{Z}_1 apresenta maiores discrepâncias com relação aos dados experimentais para valores elevados de x/d , possuindo um decréscimo axial menor quando comparada aos pontos experimentais deste intervalo. A solução obtida para \tilde{Z}_2 apresenta um ponto de máximo deslocado quando comparado com os resultados experimentais. De modo geral, o resultado analítico-numérico acompanha satisfatoriamente a tendência dos dados experimentais, apresentando maiores discrepâncias para valores elevados de x/d .

As figuras 5.6 e 5.7 comparam os resultados modelados e experimentais ao longo da coordenada radial para $x/d = 20$ e $x/d = 40$, respectivamente. De modo geral, as soluções tendem a acompanhar a tendência dos pontos experimentais. Para valores de

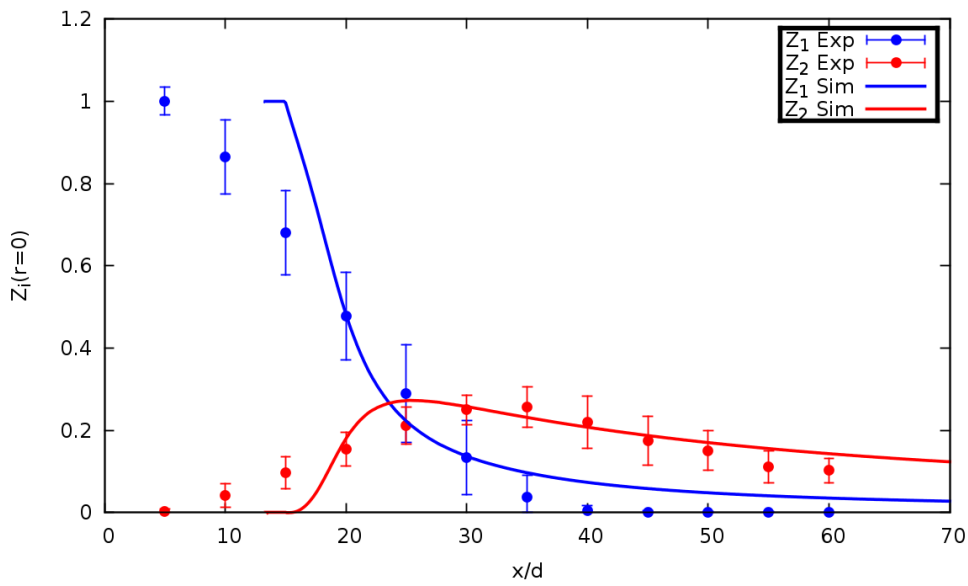


Figura 5.5: Comparação de \tilde{Z}_1 e \tilde{Z}_2 com dados experimentais ao longo da linha de centro do jato

x/d maiores, a discrepância entre a curva simulada e os pontos experimentais tendem a ser maiores, principalmente para \tilde{Z}_1 , que apresenta diferenças consideráveis próximo a linha de centro do jato. Nos dois gráficos apresentados, nota-se que \tilde{Z}_1 apresenta um decaimento inferior ao dos pontos experimentais, o que indica que a chama obtida na metodologia analítico-numérica possui um diâmetro de jato superior ao experimental.

A figura 5.8 mostra a comparação entre o resultado analítico obtido para a temperatura (solução de Burke-Schumann) e os dados experimentais para $x/d = 0$. O resultado analítico obtido para a temperatura acompanhou satisfatoriamente os dados experimentais, sendo válido para $x/d \gtrsim 13$. Analisando a figura 5.8 nota-se que a solução obtida para a temperatura não é suave, apresentando uma descontinuidade na derivada primeira em seu ponto de máximo. Isto acontece pois a solução de Burke-Schumann consiste em uma função dividida em duas partes.

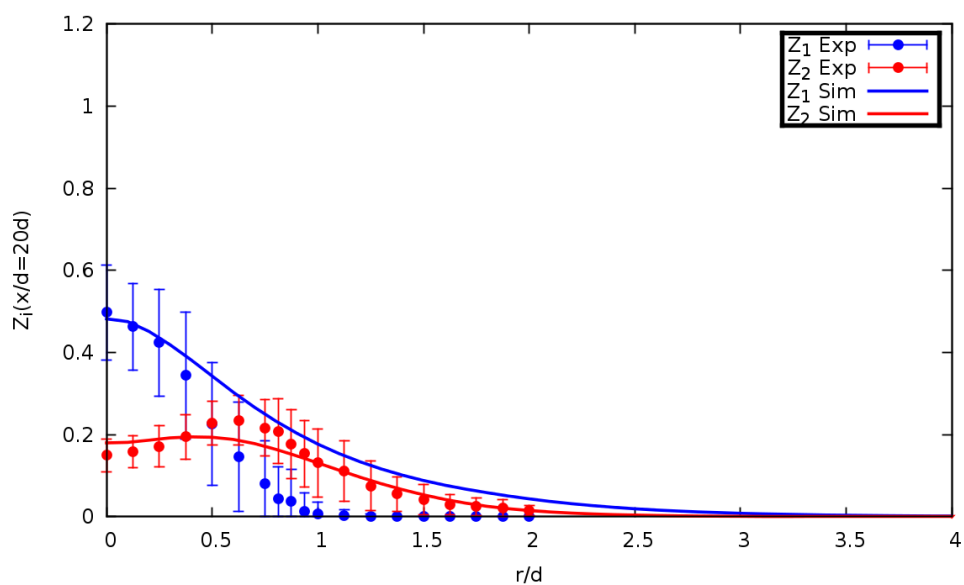


Figura 5.6: Comparação de \tilde{Z}_1 e \tilde{Z}_2 com dados experimentais para $x/d = 20$

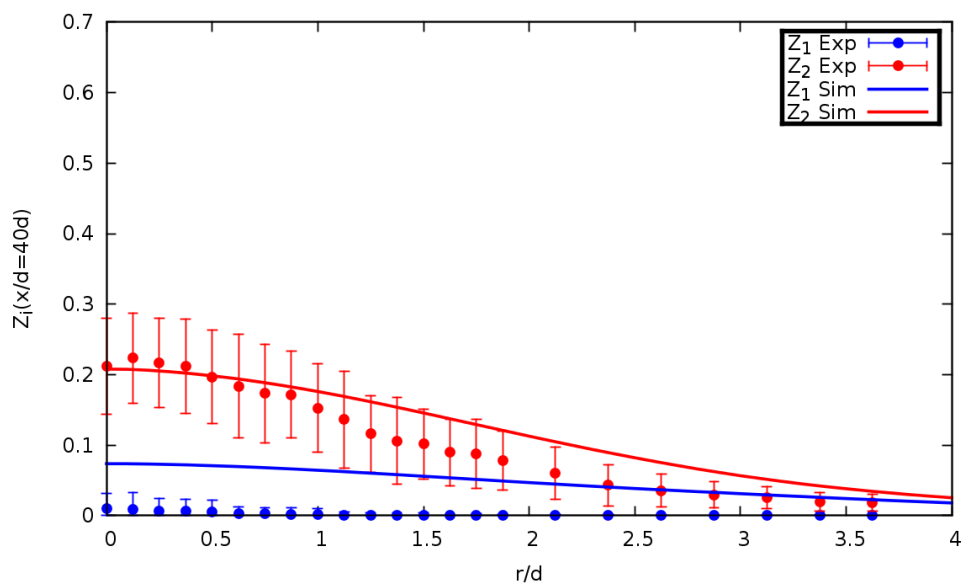


Figura 5.7: Comparação de \tilde{Z}_1 e \tilde{Z}_2 com dados experimentais para $x/d = 40$

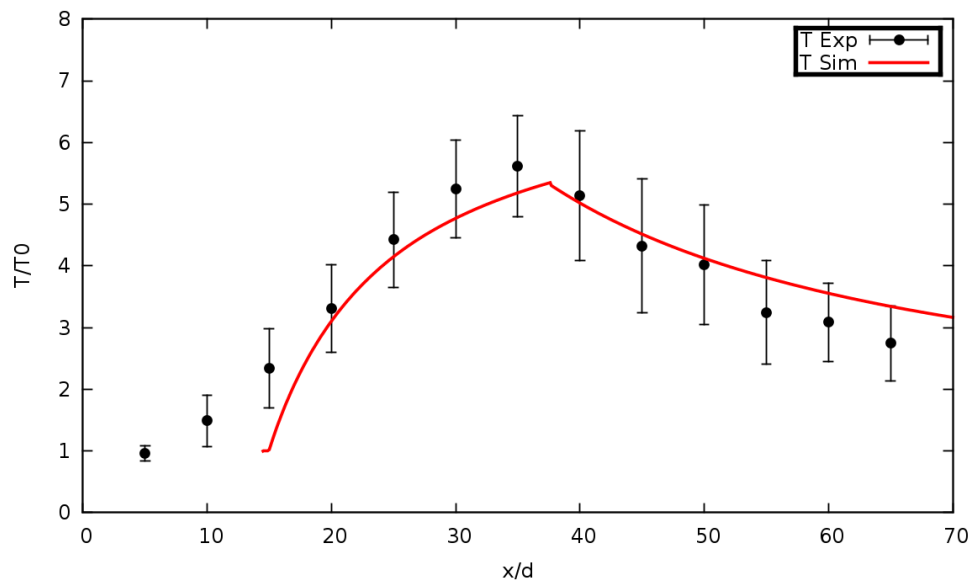


Figura 5.8: Comparação entre a temperatura com dados experimentais

Capítulo 6

Conclusões e Perspectivas

Neste trabalho, apresentou-se uma formulação analítica, baseada na fração de mistura, para uma chama difusiva na forma de um jato turbulento axissimétrico. Foi incluída, também, na formulação, uma metodologia analítico-numérica para a determinação dos componentes da reação considerando-se um mecanismo reacional de dois passos para uma chama de hidrogênio.

Os resultados analíticos obtidos para a fração de mistura foram satisfatórios, em comparação aos dados experimentais obtidos na literatura para uma chama difusiva de hidrogênio/nitrogênio (50/50% em volume) na forma de jato. A principal limitação da metodologia aplicada foi o fato de que o resultado não é válido para valores pequenos de x/d , ou seja, próximo ao bocal de saída do jato.

Os resultados obtidos para a fração de mistura ao longo da linha de centro da chama apresentaram uma pequena discrepância com os pontos experimentais em relação à inclinação da curva. Na solução obtida ao longo do raio, as diferenças entre os pontos analíticos e experimentais são maiores perto do centro do jato, diminuindo à medida que o valor do raio aumenta.

A solução obtida para fração de mistura, na qual foi simplificado o termo exponencial da viscosidade turbulenta por uma série de Taylor truncada no 3º termo, adequou-se aos pontos experimentais de maneira levemente superior quando comparado com a metodologia na qual utilizou-se somente até o 2º termo da série. Porém, o aumento de complexidade obtido no resultado final devido a consideração do 3º termo, faz com que a metodologia utilizada na Seção 4.1.2 seja pouco vantajosa frente a pouca influência no resultado obtido.

Os resultados analítico-numéricos para \tilde{Z}_1 e \tilde{Z}_2 mostraram maiores discrepâncias, principalmente em \tilde{Z}_1 , para valores elevados de x/d , porém representaram satisfatoriamente a tendência dos dados experimentais. A metodologia utilizada foi válida, uma vez que a utilização das soluções analíticas de \tilde{u} , \tilde{v} e \tilde{Z} e o tratamento analítico aplicado para \tilde{Z}_1 e \tilde{Z}_2 simplificaram consideravelmente o problema, e diminuíram a rigidez do sistema de equações a ser resolvido numericamente. A solução obtida para a temperatura adequou-se satisfatoriamente aos pontos experimentais.

Têm-se como perspectivas para continuação desse estudo, o aprimoramento da expressão de viscosidade turbulenta, de modo a obter soluções analíticas para fração de mistura mais próxima dos dados experimentais. Na parte analítico-numérica, têm-se como continuação, a resolução e decomposição da fração de mistura para mecanismos de reações com mais de dois passos, utilizando modelos mais complexos para a viscosidade turbulenta, como os de Smagorinsky e Germano. Deseja-se também, através dessa metodologia, determinar as frações de poluentes, como CO e NO_x, gerados por reações intermediárias em chamas difusivas turbulentas.

Referências Bibliográficas

- Agrawal, A., Prasad, A. K.,** *Integral solution for the mean flow profiles of turbulent jets, plumes, and wakes.* Journal of Fluids Engineering, vol 125, 813–822, 2003.
- Amielh, M., Djeridane, T., Anselmet, F., Fulachier, L.,** *Velocity near-field of variable density turbulent jets.* Int. J. Heat Mass Transfer, vol 39, issue 10, 2149–2164, 1996.
- Barlow, R.,** *H₂/N₂ jet flames,* Consulted on March 2010 at www.ca.sandia.gov/TNF.
- Bernard, P. S., Wallace, J. M.,** *Turbulent flow: analysis, measurement, and prediction.* John Wiley & Sons, Inc., 2002.
- Bray, K. N. C.,** *Turbulent reacting flows.* (P. A. Libby, and F. A. Williams, Eds.), Topics in Applied Physics, vol. 44, 115–183, 1980.
- Brown, G. L., Roshko, A.,** *On density effects and large structure in turbulent mixing layers.* J. Fluid Mech, vol. 64, 775–816, 1974.
- Cebeci, T.,** *Analysis of turbulent flows.* Elsevier, second revised and expanded edition, 2004.
- Chassaing, P.,** *The modeling of variable density turbulent flows.* Flow, Turbulence and Combustion, vol 66, 293–332, 2001.
- Chervinsky, A., Manheimer-Timnat, Y.,** *A study of axisymmetrical turbulent jet diffusion flames.* Combustion and Flame, vol 13, issue 2, 157–165, abril 1969.
- Chen, Y.-C., Peters, N., Schneemann, G. A., Wruck, N., Renz, U., Mansour, M. S.,** *The detailed flame structure of highly stretched turbulent premixed methane-air flames.* Combustion and Flame, vol 107, issue 3, 223–244, abril 1996.
- De Bortoli, A. L.,** *Analytical/numerical solutions for confined jet diffusion flame (Sandia Flame C).* Latin American Applied Research, (34):157–163, 2009.
- Eickhoff, H. E., Grethe, K.,** *A flame-zone model for turbulent hydrocarbon diffusion flames.* Combustion and Flame, vol 35, 267–275, 1979.
- Eickhoff, H. E.,** *Turbulent hydrocarbon jet flames.* Progress in Energy and Combustion Science, vol 8, issue 2, 159–169, 1982.
- Faber, T. E.,** *Fluid dynamics for physicists.* Cambridge University, Press, 1995.

- Fellouah, H., Ball, C. G., Pollard, A.**, *Reynolds number effects within the development region of a turbulent round free jet*. International Journal of Heat and Mass Transfer, vol 52, 3943–3954, 2009.
- Fiedler, H. E.**, *Control of free turbulent shear flows*. Flow Control: Fundamentals and Practices, Springer-Verlag, 335–429, 1998.
- Floyd, J. E., McGrattan, K. B.**, *Multiple parameter mixture fraction with two-step combustion chemistry for large eddy simulation*. Interflam 2007, Royal Holloway College, UK, 2007.
- Gokarn, A., Battaglia, F., Fox, R. O., Hill, J. C.**, *Simulations of mixing for a confined co-flowing planar jet*. Computers & Fluids, vol 35, 1228–1238, 2006.
- Göttgens, J., Mauss, F., Peters, N.**, *Analytic approximations of burning velocities and flame thicknesses of lean hydrogen, methane, ethylene, ethane, acetylene, and propane flames*. 24th Symp. (Int.) on Combustion, The Combustion Institute, 1992.
- Gregory, J. C.**, *Combustion from Heracleitos to Lavoisier*. E. Arnold & co., 1934.
- Hinze, J. O.**, *Turbulence, an introduction to its mechanism and theory*. McGraw-Hill, New York, 1959.
- Kennel, C., Göttgens, J., Peters, N.**, *The basic structure of lean propane flames*. 23th Symp. (Int.) on Combustion, The Combustion Institute, 1991.
- Klein, M., Sadiki, A., Janicka, J.**, *Investigation of the influence of the Reynolds number on a plane jet using direct numerical simulation*. Journal of Heat and Fluid Flow, vol 24, 785–794, 2003.
- Lesieur, M.**, *Turbulence in fluids*. Volume 84 de *Fluid mechanics and its applications*, Springer, 2008.
- Liñán, A.**, *The asymptotic structure of counterflow diffusion flames for large activation energies*. Acta Astronautica, vol 1, 1007–1039, 1974.
- Lubbers, C. L., Brethouwer, G., Boersma, B. J.**, *Simulation of the mixing of a passive scalar in a round turbulent jet*. Fluid Dynamics Research, vol 28, issue 3, 189–208, 2001.
- Peters, N.**, *Laminar flamelet concepts in turbulent combustion*. 21th Symp. (Int.) on Combustion, The Combustion Institute, 1231–1250 1986.
- Peters, N.**, *Turbulent combustion*. Cambridge University, Press, 2000.
- Peters, N.**, *Fifteen lectures on laminar and turbulent combustion*. Ercoftac Summer School, setembro de 1992.
- Peters, N., Donnerhack, S.**, *Structure and similarity of nitric oxide production in turbulent diffusion flames*. 18th Symp. (Int.) on Combustion, The Combustion Institute, 1981.
- Peters, N., Göttgens, J.**, *Scaling of buoyant turbulent jet diffusion flames*. Combustion and Flame, vol 85, issue 1–2, 26–214, 1991.

- Peters, N., Williams, F. A.,** *The asymptotic structure of stoichiometric methane-air flames.* Combustion and Flame, vol 68, issue 2, 185–207, 1987.
- Piquet, J.,** *Turbulent flows: models and physics.* Springer-Verlag, 1999.
- Pope, S. B.,** *Turbulent flows.* Cambridge University, Press, 2000.
- Rajaratnam, N.,** *Turbulent jets.* Developments in Water Science, vol 5, Elsevier, 1976.
- Remie, M. J., Cremers, M. F. G., Schreel, K. R. A. M., de Goey, L. P. H.,** *Flame jet properties of Bunsen-type flames.* Combustion and Flame, vol 147, 163–170, 2006.
- Schlichting, H.,** *Boundary-layer theory.* McGraw-Hill, 7^o ed., 1959.
- Seshadri, K., Peters, N.,** *The inner structure of methane-air flames.* Combustion and Flame, vol 81, issue 2, 96–118, 1979.
- Tennekes, H., Lumley, J. L.,** *A first course in turbulence.* MIT Press, Cambridge, MA, 1972.
- Veser, A., Kuznetsov, M., Fast, G., Friedrich, A., Kotchourko, N., Stern, G., Schwall, M., Breitung, W.,** *The structure and flame propagation regimes in turbulent hydrogen jets.* International Journal of Hydrogen Energy, vol 36, 2351–2359, 2011.
- Veynante, D., Vervisch, L.,** *Turbulent combustion modeling.* Progress in Energy and Combustion Science, vol 28, 193–266, 2002.
- Williams, F. A.,** *The mathematics of combustion.* (J. D. Buckmaster, Ed.), SIAM Philadelphia, 1985.