

FERNANDO LUIZ SACOMANO FILHO

SIMULAÇÕES DE CHAMAS TURBULENTAS DE ETANOL COM
MODELO DE TURBULÊNCIA k- ϵ

Dissertação apresentada à Escola
Politécnica da Universidade de São
Paulo para a obtenção do título de
Mestre em Engenharia

São Paulo
2011

FERNANDO LUIZ SACOMANO FILHO

SIMULAÇÕES DE CHAMAS TURBULENTAS DE ETANOL COM
MODELO DE TURBULÊNCIA k- ϵ

Dissertação apresentada à Escola
Politécnica da Universidade de São
Paulo para a obtenção do título de
Mestre em Engenharia

Área de concentração:
Engenharia Mecânica de Energia e
Fluidos

Orientador: Prof. Dr.
Guenther Carlos Krieger Filho

São Paulo
2011

Este exemplar foi revisado e alterado em relação à versão original, sob responsabilidade única do autor e com a anuência de seu orientador.

São Paulo, 18 de agosto de 2011.

Assinatura do autor _____

Assinatura do orientador _____

FICHA CATALOGRÁFICA

Sacomano Filho, Fernando Luiz
Simulações de chamas turbulentas de etanol com modelo de
turbulência k- ϵ / F.L. Sacomano Filho. – ed.rev.-- São Paulo,
2011.
154 p.

Dissertação (Mestrado) - Escola Politécnica da Universidade
de São Paulo. Departamento de Engenharia Mecânica.

1. Combustão 2. Combustíveis alternativos 3. Etanol 4. Simu-
lação I. Universidade de São Paulo. Escola Politécnica. Departa-
mento de Engenharia Mecânica II. t.

*A Fernando Luiz Sacomano e Sonia G. Moita Sacomano,
meus pais.*

Agradecimentos

Aos meus pais, Fernando Luiz Sacomano e Sonia Maria Moita Sacomano, pelo amor incondicional, pelo apoio constante em meus projetos e por sempre me incentivarem na busca de meus sonhos.

A Felipe Sacomano, meu irmão, pela motivação que me dá no desenvolvimento de meus projetos.

Gostaria de expressar minha gratidão a Juliane Beatrice Eckert, minha namorada, que sempre me apóia e incentiva na realização de meus sonhos. Seu amor e compreensão foram de fundamental importância para a realização deste trabalho.

A meu orientador Prof. Dr. Guenther Carlos Krieger Filho, não apenas pela orientação deste trabalho, mas também por ter contribuído para a minha formação profissional e pessoal. Seu apoio e atenção foram imprescindíveis para a conclusão deste estudo.

Ao prof. Dr. Fábio Saltara e ao prof. Dr. Luis Fernando Figueira da Silva por terem feito parte das bancas de qualificação e defesa deste projeto e pelos comentários que foram fundamentais para o desenvolvimento deste projeto.

Ao professor Dr. Assad Masri e ao pós-doutorando Dr. Mouldi Chrigui por terem disponibilizado o acesso aos dados experimentais utilizados nas comparações da chama de spray e pelos comentários valiosos que contribuíram muito para a melhoria dos resultados apresentados.

Aos amigos e colegas do Laboratório de Engenharia Térmica e Ambiental (LETE) que auxiliaram a tornar o ambiente de trabalho mais divertido e produtivo.

Ao Departamento de Engenharia Mecânica da Escola Politécnica da USP pela disponibilidade de sua infra-estrutura para a realização deste projeto.

A Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES) e a Rede Nacional de Combustão por terem possibilitado o financiamento deste estudo através do projeto “CAPES-PRÓ-ENGENHARIAS / ESTUDO COMPUTACIONAL E EXPERIMENTAL DE CHAMAS TURBULENTAS DE ETANOL”- PE004/2008

A todos que contribuíram diretamente e indiretamente para o desenvolvimento deste estudo.

RESUMO

Diversos equipamentos industriais utilizam processos de combustão com sprays. As principais vantagens deste processo estão relacionadas ao aumento do controle da chama e à maior segurança na logística do combustível líquido. Atualmente, o interesse na utilização de bio-combustíveis como alternativa para a redução na emissão de dióxido de carbono é crescente. Entre os tipos de bio-combustíveis o etanol se destaca por ser utilizado em vários países misturado à gasolina no setor de transportes. Partindo deste panorama, o presente trabalho apresenta a modelagem e simulação de uma chama turbulenta de spray de etanol. Os resultados das simulações realizadas são comparados com dados experimentais da literatura. O modelo resultante baseia-se no método dos volumes finitos para escoamentos com baixo número de Mach e em regime permanente. O spray foi calculado com a aproximação de escoamentos separados com uma formulação Euler-Lagrange, em que a fase dispersante é modelada com a abordagem Euleriana, enquanto que a fase dispersa é modelada com a abordagem Lagrangeana. As duas fases foram completamente acopladas nos dois sentidos. O modelo de turbulência $k-\epsilon$ Padrão foi utilizado na fase dispersante. A evaporação de gotículas foi considerada, em que o modelo de condutividade infinita foi utilizado para a fase líquida. Dessa forma, a distribuição de temperaturas no interior da gotícula é uniforme, porém varia conforme ela se move no spray. Para reproduzir os efeitos do resfriamento evaporativo, a combustão foi modelada com um modelo de folha de chama modificado que considerou uma função *joint* β -PDF de fração de mistura e entalpia. Transferências de calor por radiação foram negligenciadas neste trabalho. Aproximações razoáveis foram obtidas entre os perfis medidos e calculados de temperatura média da fase gasosa e de distribuições de tamanhos de gotículas. Algumas discrepâncias foram observadas nas comparações entre os perfis do componente axial de velocidade média da fase gasosa, que foram atribuídas à difusão superestimada das quantidades médias transportadas pela fase gasosa nas simulações.

Palavras-chave: Etanol. Combustíveis renováveis. Combustão. Simulação.

ABSTRACT

Several industrial equipments use combustion processes with sprays. The main advantages of this process are related to the increase in the flame control and in the safety of liquid fuel logistics. Currently, the interest on the utilization of biofuels as an alternative to the reduction of carbon dioxide emissions is increasing. Among the types of biofuels the ethanol stands out by being used blended with gasoline in the transport sector of several countries. From this overview, this work presents the modeling and simulation of an ethanol turbulent spray flame. The results of the simulations were compared with experimental data from the literature. The resulting model was based on the finite volume method for low Mach number and steady state flows. The spray was calculated using the Separated Flow method (SF) with an Euler-Lagrange model, where the gaseous phase was described by an Eulerian model and the liquid phase by a Lagrangian particle method. Both phases were fully coupled in order to account for shared effects. The turbulence model k- ϵ Standard was used to determine the dispersant phase. Evaporation of droplets was calculated with the assumption of the infinite-liquid-conductivity model, where the droplet inner temperature is uniform, but varies with the mass and heat transfer within the dispersant phase. To reproduce the effects of the evaporative cooling the combustion was modeled with a modified flamesheet model which regarded a jointed mixture fraction-enthalpy β -PDF. Radiative heat transfer was not accounted for in this work. Reasonable agreement between measured and computed mean profiles of temperature of the gas phase and droplet size distributions was achieved. Some deviations were observed in the mean velocity profiles comparisons between experimental data and simulations, which were assigned to the over predicted diffusion of the mean quantities transported by the gas phase.

Keywords: Ethanol. Alternative Fuels. Combustion. Simulation.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1: Combustor utilizado por Rochaya (2007)	8
Figura 2: Esquema do combustor e fotografia da chama analisada por Düwel <i>et al.</i> (2007)	12
Figura 3: Fotografia (A) e comparação entre resultados de medições experimentais (B-esquerda) e de simulações (B-direita) da chama estudada por Düwel <i>et al.</i> (2007)	14
Figura 4: Comparação entre resultados de medições experimentais (esquerda) e de simulações (direita) da chama estudada por Ge e Gutheil (2008).	16
Figura 5: Esquema do combustor usado por Masri e Gounder (2010).....	32
Figura 6: Distribuições de velocidade média axial (esquerda) e flutuações turbulentas de velocidade axial (direita) na direção radial do spray, extraído de Masri e Gounder (2010).....	33
Figura 7: Distribuição de tamanho de gotículas no plano axial x/D 0,3, extraído de Masri e Gounder (2010).	34
Figura 8: Distribuição de tamanho de gotículas no plano axial x/D 10, extraído de Masri e Gounder (2010).	34
Figura 9: Distribuição de tamanho de gotículas no plano axial x/D 20, extraído de Masri e Gounder (2010).	34
Figura 10: Distribuição de tamanho de gotículas no plano axial x/D 30, extraído de Masri e Gounder (2010).	34
Figura 11: Distribuição de temperaturas no plano axial x/D 10. (Chama estudada = Quadrados). Extraído de Masri e Gounder (2010).	35

Figura 12: Distribuição de temperaturas no plano axial x/D 20. (Chama estudada = Quadrados). Extraído de Masri e Gounder (2010).	35
Figura 13: Distribuição de temperaturas no plano axial x/D 30. (Chama estudada = Quadrados). Extraído de Masri e Gounder (2010).	35
Figura 14: Fração mássica das espécies em função da fração de mistura.....	50
Figura 15: Temperatura da mistura em função da fração de mistura.....	51
Figura 16: Massa específica da mistura em função da fração de mistura.....	52
Figura 17: Temperatura da mistura em função da fração de mistura para a reação adiabática e a não adiabática.....	54
Figura 18: β -PDF para a condição adiabática.	59
Figura 19: β -PDF para a condição não adiabática	59
Figura 20: Classificação dos tipos de suspensão. Adaptado de Chrighui (2005).....	62
Figura 21: Volume de controle elementar.	83
Figura 22: Representação do critério de verificação de presença de gotícula. Os vetores verdes são os obtidos da projeção da partícula, com origem no centro da face, os pretos são os normais às faces.	98
Figura 23: Esquematização do algoritmo de busca de partículas.	98
Figura 24: Vista de topo e lateral da malha utilizada para as simulações da chama Sandia/TUD D	102
Figura 25: Malha refinada utilizada nas simulações com o programa ANSYS FLUENT	103
Figura 26: Malha com especificações semelhantes à tridimensional utilizada nas simulações com o código desenvolvido neste trabalho.....	104
Figura 27: Perfil de velocidade média axial e de flutuação turbulenta axial de velocidade da chama Sandia/TUD D. Adaptado de Flame D (2010).	104

Figura 28: Comparação entre os resultados da simulação e os dados experimentais da componente axial da velocidade	108
Figura 29: Comparação entre os resultados da simulação e os dados experimentais da fração de mistura.....	109
Figura 30: Perfis radiais de fração de mistura média	110
Figura 31: Perfis radiais de temperatura média.....	110
Figura 32: Campos de temperatura, fração de mistura e componente axial de velocidade da "Simulação II"	116
Figura 33: Comparação entre os resultados das simulações corrigidas e os dados experimentais da componente axial da velocidade	117
Figura 34 Comparação entre os resultados das simulações corrigidas e os dados experimentais da fração de mistura	118
Figura 35: Perfis radiais de fração de mistura média das simulações corrigidas	119
Figura 36: Comparação entre as diferenças de velocidades entre os casos do programa ANSYS FLUENT	120
Figura 37: Comparação entre as diferenças de fração de mistura entre os casos do programa ANSYS FLUENT	121
Figura 38: Perfis radiais de temperatura média das simulações corrigidas	123
Figura 39: Perfis de temperatura média ao longo da linha de centro da chama	124
Figura 40: Análise do erro ao longo da linha de centro da chama para a componente axial de velocidade média	125
Figura 41: Análise do erro ao longo da linha de centro da chama para a fração de mistura média.....	125
Figura 42: Malha utilizada para a simulação de sprays.....	127

Figura 43: Perfil de velocidade média axial e de flutuação turbulenta axial de velocidade da chama turbulenta de spray de etanol. Adaptado de Masri (2009)....	128
Figura 44: Distribuição de número de gotículas de cada uma das curvas de injeção apresentadas em Masri e Gounder (2010).....	129
Figura 45: Relação entre os valores de diâmetros de gotículas e as suas frações mássicas.	131
Figura 46: Distribuições de tamanho de gotículas injetadas no domínio de cálculo	132
Figura 47: Comparação dos resultados do componente axial da velocidade média das gotículas obtidos na simulação com dados experimentais.....	134
Figura 48: Campos das quantidades médias: componente axial de velocidade, fração de mistura e temperatura, no plano central do domínio de cálculo	137
Figura 49: Perfis radiais do excesso de temperatura média da fase gasosa	138
Figura 50: Pontos que indicam distâncias de coleta de resultados sobre o campo do termo fonte de massa.....	139
Figura 51: Comparação entre as distribuições de tamanho de gotículas. Legenda: “ α z/D, r/D β ” corresponde ao ponto localizado longitudinalmente a “ α ” diâmetros do bocal e a uma distância radial de “ β ” diâmetros da linha de centro da chama.....	141

LISTA DE TABELAS

Tabela 1: Termos das equações Eulerianas admitidos como termo fonte na integração.....	85
Tabela 2: Formulações da função limitante.....	90
Tabela 3: Quadro resumo das legendas das primeiras análises.....	112
Tabela 4: Quadro resumo das legendas da segunda etapa de análises.....	117

LISTA DE SÍMBOLOS

Caracteres gregos maiúsculos

$\Gamma(\psi)$ – função gama para ψ

Γ_ψ – difusividade de ψ

ΔV – volume do volume de controle

Caracteres gregos minúsculos

α – coeficiente da função β -PDF / número total de gotículas em um volume de controle

α_γ – coeficiente para a definição da discretização do termo advectivo para a face γ da célula

α'_γ – coeficiente dos métodos TVD para a face γ de uma célula

β – coeficiente da função β -PDF

β_γ – coeficiente para a definição da discretização do termo difusivo para a face γ da célula

γ – coeficiente de sub-relaxação

$\delta(x)$ – função delta de Dirac

δ_{ij} – operador delta de Kronecker

ε – dissipação da energia cinética turbulenta

ζ_{ui} – variável aleatória que segue uma distribuição Gaussiana, $i = 1, 2$ e 3

ϑ – variável genérica

λ – condutividade térmica

μ – viscosidade molecular ou dinâmica

μ_t – viscosidade turbulenta

ρ – massa específica

σ_ε – número de Prandtl para a dissipação da energia cinética turbulenta

σ_h – número de Prandtl para a entalpia

σ_k – número de Prandtl para a energia cinética turbulenta

σ_{st} – tensão superficial do líquido

σ_t – número de Prandtl turbulento

τ_{ij} – tensor das tensões em coordenadas cartesianas

τ_p – escala de tempo de relaxação das partículas

φ – relação entre as frações mássicas de combustível e de oxidante

ψ – variável genérica

ψ_I – variável genérica calculada no nó da célula I

$\psi(r)$ – função limitante para a variável r

$\dot{\omega}_k$ – taxa de produção/consumo da espécie química k , $k = 1, \dots, K$

Caracteres latinos maiúsculos

A_γ – coeficiente do sistema linear correspondente à face γ da célula

A_p – área superficial da gotícula

A_p – coeficiente do sistema linear correspondente ao nó da célula (diagonal principal)

A_{pp} – coeficiente do sistema linear da equação do acoplamento pressão-velocidade correspondente ao nó da célula (diagonal principal)

$A_{p\gamma}$ – coeficiente do sistema linear da equação do acoplamento pressão-velocidade correspondente à face γ da célula

B – número de Spalding

B_γ – área da face de uma célula

$C_{1\varepsilon}$ – parâmetro de ajuste do modelo k - ε Padrão

$C_{2\varepsilon}$ – parâmetro de ajuste do modelo k - ε Padrão

$C_{3\varepsilon}$ – constante de ajuste do termo fonte de dissipação de energia cinética turbulenta

C_μ – parâmetro de ajuste do modelo $k-\varepsilon$ Padrão

C_D – coeficiente de arrasto

Cd – parâmetro de ajuste da equação de transporte da variância da fração de mistura

CFL – número de Courant-Friedrichs-Lewy

C_g – parâmetro de ajuste da equação de transporte da variância da fração de mistura

$C_{l,\infty}$ – concentração de vapor do líquido na fase gasosa

$C_{l,S}$ – concentração do vapor do líquido na superfície da gotícula

proveniente do acoplamento interfásico

D – coeficiente de difusão mássica / diâmetro do bocal de injeção de combustível

D_γ – coeficiente difusivo da face γ de uma célula

D_k – coeficiente de difusão mássica para a espécie química k , $k = 1, \dots, K$

$D_{l,m}$ – coeficiente de difusão binária

F – fator utilizado na linearização de termos fontes

L_e – tamanho característico de um turbilhão

Le – número de Lewis

Le_k – número de Lewis para a espécie química k , $k = 1, \dots, K$

\dot{M}_γ – fluxo mássico na face γ

Ma – número de Mach

Mw_k – massa molar da espécie química k , $k = 1, \dots, K$

N_l – fluxo molar de combustível

Nu – número de Nusselt

$P(\psi)$ – função densidade de probabilidade de ψ

P_F – pressão calculada no nó da célula F

Pr – número de Prandtl

Re – número de Reynolds

Re_e – número de Reynolds de escorregamento

R_u – constante universal dos gases perfeitos

S_ψ – termo fonte da variável ψ

S_{ψ_a} – parte implícita do termo fonte linearizado de ψ

S_b – parte explícita do termo fonte linearizado de ψ

S_c – parte explícita do termo fonte de ψ

S_u^{DC} – correção deferida dos métodos TVD

S_{ψ_p} – parte implícita do termo fonte de ψ

S_{ij} – tensor deformação em coordenadas cartesianas

Sc – número de Schmidt

Sc_k – número de Schmidt para a espécie química k , $k = 1, \dots, K$

Sh – número de Sherwood

St – número de Stokes

\bar{S}_1 – termo fonte de massa proveniente do acoplamento interfásico

\bar{S}_ε – termo fonte de dissipação de energia cinética turbulenta proveniente do acoplamento interfásico

\bar{S}_f – termo fonte de fração de mistura proveniente do acoplamento interfásico

\bar{S}_{f^2} – termo fonte de variância de fração de mistura proveniente do acoplamento interfásico

\bar{S}_h – termo fonte de entalpia proveniente do acoplamento interfásico

\bar{S}_k – termo fonte de energia cinética turbulenta proveniente do acoplamento interfásico

\bar{S}_{u_i} – termo fonte da componente i da quantidade de movimento linear proveniente do acoplamento interfásico, $i = 1, 2, 3$

T – temperatura da mistura

T_0 – temperatura de referência empírica

T_{bp} – temperatura de ebulição

T_{ref} – temperatura de referência de cálculo

T_t – escala de tempo integral da turbulência

U_0 – componente axial da velocidade média na saída do bocal

Vel_{mg} – velocidade obtida com malha grosseira

Vel_{mr} – velocidade obtida com malha refinada

X_l – fração molar de vapor na fase gasosa

Y_k – fração mássica da espécie química k , $k = 1, \dots, K$

We – número de Weber

Caracteres latinos minúsculos

c_p – calor específico sensível para a mistura

$c_{p,k}$ – calor específico sensível para a espécie química k , $k = 1, \dots, K$

d_p – diâmetro de uma partícula

f – fração de mistura

f_{mg} – fração de mistura obtida em malha grosseira

f_{mr} – fração de mistura obtida em malha refinada

f_{st} – fração de mistura estequiométrica

\vec{g} / g_i – vetor aceleração da gravidade / componente cartesiana na direção i , $i = 1, 2$ e 3

h – entalpia específica da mistura / coeficiente de transferência de calor por convecção

h_{fg} – calor específico latente do líquido

h_{fl} – entalpia de formação do líquido

h_k – entalpia específica para a espécie química k , $k = 1, \dots, K$

h_k^0 – entalpia de formação para a espécie química k , $k = 1, \dots, K$

k – energia cinética turbulenta

k_C – coeficiente de transferência de massa

k_∞ – condutividade térmica da fase gasosa

n_k – número de moles da espécie química k , $k = 1, \dots, K$

m_p – massa da gotícula

p – pressão

$p_{sat}(T)$ – pressão de saturação em função da temperatura

$q(\psi)$ – média de ψ

r – variável aleatória de distribuição uniforme

r_γ^+ - argumento da função limitante para a face γ de uma célula e para fluxo no sentido positivo do sistema de coordenadas

r_γ^- - argumento da função limitante para a face γ de uma célula e para fluxo no sentido negativo do sistema de coordenadas

s – razão mássica, estequiométrica, de oxidante/combustível

t – tempo

t_{cross} – intervalo de tempo de travessia por um turbilhão

t_e – intervalo de tempo de vida de um turbilhão

\vec{u} / u_i – vetor velocidade / componente cartesiana na direção i , $i = 1, 2$ e 3

u_γ – componente da velocidade perpendicular a face γ de uma célula

\vec{x} – vetor deslocamento

x_i – comprimento em coordenadas cartesianas

Caracteres de outra origem

∞ – infinito

Operadores

Δ – diferença

$\frac{d}{dt}$ – derivada total em relação a t

$\frac{\partial}{\partial t}$ – derivada parcial em relação a t

Σ – somatória

\int – integral

$L[\psi]^\theta$ – integração da variável ψ

$\min[a, b, c]$ – mínimo entre a , b e c .

$|\cdot|$ – módulo

$\overline{(\cdot)}$ – média de Favre

$\overline{(\cdot)}$ – média de Reynolds / média de conjunto

$\widehat{(\cdot)}$ – valor aproximado

$\vec{(\cdot)}$ – vetor

$(\cdot)''$ – flutuação turbulenta proveniente da média de Favre

$(\cdot)'$ – flutuação turbulenta proveniente da média de Reynolds

$(\cdot)''^2$ – variância

$(\cdot)^*$ – variável calculada no instante de tempo anterior

Índices subscritos

$(\cdot)_0$ – região de concentração máxima de combustível

$(\cdot)_1$ – região de concentração máxima de combustível

$(\cdot)_\gamma$ – faces de uma célula cartesiana, $\gamma = b, t, w, e, s, n$

$(\cdot)_f$ – combustível

$(\cdot)_l$ – fase líquida

$(\cdot)_{ox}$ – oxidante

$(\cdot)_p$ – gotícula

$(\cdot)_m$ – valor proveniente de medição

$(\cdot)_n$ – quantidade normalizada

$(\cdot)_e$ – quantidade definida no instante anterior ao cálculo da transferência de calor

$(\cdot)_s$ – quantidade definida no instante posterior ao cálculo da transferência de calor/valor proveniente de simulação

$(\cdot)_{st}$ – quantidade definida na proporção estequiométrica da mistura

Índices sobrescritos

$(\cdot)^*$ – quantidade adimensional / valor de uma variável no instante de tempo anterior

$(\cdot)^0$ – tipo de discretização temporal

$(\cdot)^n$ – variável calculada no instante de tempo n

Siglas

CDM – *Continuous Droplet Model*

CDS – *Central Differencing Scheme*

CFD – *Computational Fluid Dynamics*

CFM – *Continuous-Formulation Model*

DDM – *Discrete-Droplet Model*

DSF – *Deterministic Separated Flow model*

LES – *Large Eddy Simulation*

LETE – Laboratório de Engenharia Térmica e Ambiental

LHF – *Locally Homogeneous Flow*

MEE – Método de Euler Explícito

MEI – Método de Euler Implícito

MVF – Método dos Volumes Finitos

NO-LIF – *Nitric Oxide- Laser Induced Fluorescence*

PDA – *Phase Doppler Anemometer*

PDF – *Probability Density Function*

PDPA – *Phase Doppler Particle Analyser*

PIV – *Particle Image Velocimetry*

PRIME – *PRessure Implicit Momentum Explicit*

RANS – *Reynolds Averaged Navier-Stokes*

RSM – *Reynolds Stress Model*

SF – *Separated Flow*

SMD – *Sauter mean diameter*

SSF – *Stochastic Separated Flow model*

TVD – *Total Variation Diminishing*

Espécies químicas

CO_2 – dióxido de carbono

C_2H_5OH – etanol

H_2O – água

N_2 – nitrogênio

O_2 – oxigênio

SUMÁRIO

1	Introdução.....	1
1.1	Objetivos	4
1.2	Estrutura do texto	5
2	Revisão da Literatura.....	7
2.1	Chamas turbulentas de spray de etanol.....	7
2.2	Modelos de turbulência	16
2.3	Modelos de combustão	19
2.4	Modelos de sprays	23
2.4.1	Aproximação de homogeneidade local de escoamento	24
2.4.2	Aproximação por escoamentos separados.....	25
3	Dados experimentais	30
4	Modelagem da chama de spray.....	36
4.1	Equações de conservação da fase gasosa.....	36
4.2	Modelo de turbulência	41
4.3	Modelo de combustão	45
4.3.1	Modelo Folha de Chama	47
4.3.2	Tratamento estatístico de reações químicas turbulentas.....	55
4.4	Modelagem do spray.....	60
4.4.1	Modelagem do deslocamento de gotículas	62
4.4.2	Modelagem da evaporação de gotículas	64
4.4.3	Interações e quebra de gotículas.....	71
4.4.4	Acoplamento interfásico	73
4.4.5	Dispersão turbulenta e modulação de turbulência.....	77

5	Método numérico	81
5.1	Método dos volumes finitos	82
5.2	Discretização das equações da fase dispersante	82
Tabela 1: Termos das equações Eulerianas admitidos como termo fonte na		
integração.....		
		85
5.3	Acoplamento pressão-velocidade	91
5.4	Formulação pseudo-transiente.....	93
5.5	Discretização das equações da fase dispersa	94
5.6	Algoritmo de rastreamento de partículas.....	97
6	Resultados e Discussões.....	100
6.1	Validação	100
6.1.1	Malha.....	102
6.1.2	Condições de contorno	104
6.1.3	Simulações	106
6.2	Chama de spray	126
6.2.1	Malha.....	127
6.2.2	Condições de contorno	128
6.2.3	Simulações	133
7	Conclusões	143
7.1	Sugestões para aperfeiçoamento e continuação do presente trabalho	145
8	Referências.....	148

1 INTRODUÇÃO

Processos de combustão acompanham o desenvolvimento da sociedade humana desde os seus primórdios. Apesar de ter a data de sua origem desconhecida, o domínio do fogo é considerado uma das maiores conquistas da humanidade (Vicentino, 2007). O fogo, neste caso representando uma das formas pioneiras de se utilizar os processos de combustão, ganhou inúmeras aplicações ao longo do desenvolvimento sócio-econômico e tecnológico da humanidade. Ao longo da história nota-se a evolução das aplicações destes processos com a própria evolução da sociedade humana. Isso pode ser ilustrado com o exemplo do aproveitamento da combustão como força motriz das máquinas a vapor, colaboradoras para o início da Revolução Industrial. Atualmente, as aplicações dos processos de combustão influenciam direta ou indiretamente todos os setores da economia. Influências diretas são encontradas nos setores: industrial, de transporte e de geração de energia elétrica. A agricultura é um setor em que os processos de combustão exercem influência indireta, algumas de suas aplicações podem ser encontradas nos processos de preparo da terra, fertilização e colheita de uma zona de cultivo.

Em meados do século vinte, houve o surgimento da preocupação com a emissão de poluentes para a atmosfera. Essa preocupação se intensificou com o diagnóstico de problemas climáticos globais, como a intensificação do efeito estufa pelo aumento da emissão de dióxido de carbono. Muitos destes poluentes emitidos à atmosfera são provenientes de processos de queima de combustíveis fósseis. Uma das alternativas encontradas para a redução à emissão de poluentes, especificamente a emissão de dióxido de carbono, foi a substituição do uso de combustíveis fósseis pelo uso de combustíveis renováveis oriundos da biomassa, como o etanol. Estes combustíveis renováveis mostram-se como uma alternativa promissora para a substituição dos combustíveis fósseis por serem quase neutros, quanto à emissão de dióxido

de carbono, e por reduzirem a emissão de poluentes, como: material particulado, hidrocarbonetos não queimados e monóxido de carbono (Haas *et al.*, 2001).

Marinov (1999) menciona que o interesse no etanol como combustível puro vem crescendo devido aos problemas associados com os combustíveis convencionais utilizados no setor de transporte. Nos Estados Unidos da América, como também no Brasil, o etanol passou a ser usado na mistura da gasolina para melhorar sua octanagem e reduzir a emissão de monóxido de carbono. Em função da grande penetração de veículos *flexfuel*, que permitem ao usuário escolher qual o combustível mais econômico entre gasolina e álcool hidratado, no mercado brasileiro foi atribuído o aumento relevante de 22,8% na produção de etanol do ano de 2009 (Balanço Energético Anual: Ano base 2008, 2009). O balanço energético norte americano, economia com maior produção de etanol, registrou um aumento de 15,6% na produção deste combustível (Annual Energy Review 2009, 2010). Observando os demais países produtores de etanol, houve o aumento de 32,3% no ano de 2008 (RFA: Renewable Fuels Association, 2010). Nota-se assim, a importância crescente deste combustível na economia nacional e internacional.

Entretanto, apesar de todo o aumento na produção de etanol, Marinov (1999) ressalta a necessidade de se obter conhecimento completo da combustão de etanol e dos poluentes que este processo pode emitir. O conhecimento das características químicas e físicas de chamas de etanol permitirá à indústria e às agências regulamentadoras uma melhor avaliação do processo de combustão deste combustível, como também, da emissão de poluentes deste processo.

Uma das formas de se estudar processos de combustão é através de modelagens matemáticas. Como mencionado por Kuo (1986) a modelagem da combustão é imprescindível para a sua compreensão. A modelagem permite a realização de simulações dos processos de combustão que têm por objetivo prever o comportamento desses processos sob diversas condições de trabalho. Modelagens e Simulações de escoamentos reativos também são alternativas para a

redução das dificuldades, ou mesmo, dos elevados custos de experimentos (Kuo, 1986, Versteeg e Malalasekera, 2007).

Dos vários tipos de processos de combustão encontram-se as chamas turbulentas de spray. Chamas turbulentas de spray são relevantes em muitos dispositivos de práticos de combustão como: motores de combustão interna, câmaras de combustão de turbinas a gás, queimadores para mísseis e foguetes, como também, queimadores para caldeiras, fornalhas e aquecedores de processo (Turns, 2000). Kuo (1986) justifica a opção feita por chamas de spray pela conveniência no transporte e flexibilidade no armazenamento dos combustíveis, como também pelo fato de estes encontrarem-se no estado líquido nas condições ambiente. Faeth (1983) menciona que a modelagem de sprays para o desenvolvimento de fornalhas, queimadores para turbinas a gás, motores de combustão interna, dentre outros dispositivos de combustão, foram pouco atraentes num primeiro momento. Essa observação justifica-se pelo fato de que, naquele momento, os modelos eram (e continuam sendo) complexos, porém necessários para simulações realistas, enquanto que ensaios podiam ser realizados com facilidade relativa. No entanto, problemas nos projetos destes equipamentos se tornaram ainda mais complexos e as restrições ambientais de desempenho impostas ao seu funcionamento, mais severas. Estes novos requerimentos instigaram o interesse no desenvolvimento de modelos que provessem informações de desempenho destes sistemas, sendo que ensaios começaram a ser menos exatos e mais caros com a multiplicidade de resultados solicitados.

Diante deste quadro de aplicações das chamas de spray e do cenário mundial sobre a utilização de combustíveis renováveis, muitas empresas procuram tornar seus equipamentos instalados flexíveis à combustão deste tipo de combustível. Isso pode ser verificado no Brasil com conversão de turbinas a gás para o uso de combustíveis oriundos da biomassa, em especial o etanol (Direto da Usina, 2011), como também em projetos estrangeiros, como o que financiou o projeto desenvolvido por Rochaya (2007).

Poucos estudos são encontrados sobre chamas turbulentas de spray de etanol na literatura. Nesse sentido, este trabalho propõe a realização de um estudo computacional do comportamento de chamas de spray de etanol. Esta proposta é contida nas diretrizes do projeto CAPES-ProEng “ESTUDO COMPUTACIONAL E EXPERIMENTAL DE CHAMAS TURBULENTAS DE ETANOL” – PE004/2008. Este projeto tem por objetivo a realização de ações para o desenvolvimento do conhecimento nacional no processo de combustão de etanol.

Simulações recentes de chamas turbulentas de etanol são encontradas nos trabalhos de Düwel *et al.* (2007), e Rochaya (2007). Düwel *et al.* (2007) apresentam resultados de medições experimentais e simulações de sprays de etanol reativos e não reativos em câmara de combustão aberta. Estes autores tiveram como objetivo a avaliação e o aperfeiçoamento dos processos de combustão de sprays. Este trabalho foi continuado por Ge e Gutheil (2008) que aprimoraram o modelo de combustão, em que obtiveram assim melhores resultados. Rochaya (2007) também apresenta resultados de medições experimentais e de simulações de sprays de etanol reativos e não reativos em câmara de combustão aberta e de pressão variável. Todavia, este autor também apresenta resultados de medições e simulações de sprays reativos de biodiesel. Este trabalho teve o objetivo de estudar a estrutura de chamas de spray em condições próximas às condições de operação de turbinas a gás.

1.1 OBJETIVOS

O objetivo principal deste trabalho é propor um modelo matemático para a simulação de chamas turbulentas de spray de etanol, com a modelagem da turbulência baseada em RANS (*Reynolds Averaged Navier Stokes*). Os resultados dos modelos estudados foram avaliados com dados experimentais da literatura.

1.2 ESTRUTURA DO TEXTO

O presente trabalho foi organizado para apresentar de forma clara todo o conteúdo resultante dos estudos realizados em seu desenvolvimento. Portanto, para uma melhor compreensão e estruturação do texto foi feita a sua divisão em oito capítulos de forma sistemática. A descrição das etapas é apresentada a seguir.

No primeiro capítulo foi feita a apresentação do tema da dissertação, como também, de seus objetivos e estrutura. Esse capítulo teve como objetivo introduzir e contextualizar o leitor no tema da dissertação. Em seguida, no capítulo 2, é apresentada a revisão bibliográfica que serviu de base à investigação do trabalho proposto. Na primeira parte da revisão são apresentados e discutidos trabalhos recentes sobre chamas turbulentas de spray de etanol, já na segunda parte são apresentados e discutidos os principais modelos utilizados na modelagem da combustão de sprays. Os capítulos seguintes abordaram as informações experimentais e a metodologia utilizada no desenvolvimento deste trabalho.

Nos capítulos 3, 4 e 5, são apresentados os materiais e métodos deste trabalho. Assim, o terceiro capítulo é dedicado a apresentação dos dados experimentais que foram utilizados como base de comparação para os resultados das simulações de chama de spray realizadas neste estudo. A forma em que esse tipo de chama foi modelada é apresentada em detalhes no capítulo 4, o qual divide-se em duas etapas principais: modelos empregados na representação da fase dispersante, modelos empregados para a representação da fase dispersa. O capítulo 5 apresenta os métodos numéricos necessários para a solução das equações apresentadas no capítulo 4.

O capítulo 6 descreve os resultados das simulações provenientes da modelagem proposta. Este capítulo foi dividido em duas partes: validações e chama de spray. Em “Validação” são mostrados os resultados das simulações que foram feitas para validar o código computacional, e em “chama de spray” são apresentados os resultados das simulações da chama turbulenta de

spray de etanol. As discussões desses resultados também são feitas no capítulo 6. As conclusões deste trabalho são apresentadas no capítulo 7, em que é feito um resumo das partes deste texto e dos resultados obtidos. Também neste capítulo, há uma discussão sobre a continuidade deste trabalho. No capítulo 8 são apresentadas as referências bibliográficas que foram utilizadas.

2 REVISÃO DA LITERATURA

A modelagem de combustão turbulenta monofásica é vista como uma atividade de complexidade elevada, pelo forte acoplamento da turbulência com os mecanismos de reação química, fenômenos que apresentam discrepâncias de ordens de grandeza entre suas respectivas escalas. Tanto o estudo da turbulência como da combustão são desafiantes por si só para físicos, engenheiros e matemáticos. Na modelagem de chamas turbulentas de spray a complexidade observada na modelagem de chamas monofásicas é intensificada, pois, além dos fenômenos já observados nas chamas monofásicas, as chamas de spray apresentam as particularidades associadas a escoamentos bifásicos.

Com o objetivo de revisar as principais formulações e métodos utilizados para modelagem de chamas turbulentas de spray este capítulo é dividido em duas partes.

A primeira apresenta uma revisão de trabalhos recentes de simulações de chamas turbulentas de spray de etanol. Esta parte busca descrever em linhas gerais a problemática envolvida em simulações deste tipo, em relação a outros trabalhos da literatura, como também busca situar o estudo desenvolvido neste presente trabalho.

A segunda parte foi feita com o intuito de se revisar os principais modelos utilizados para a simulação dos fenômenos envolvidos em simulações de sprays turbulentos. Estes principais modelos corresponderam aos de: turbulência, combustão e sprays.

2.1 CHAMAS TURBULENTAS DE SPRAY DE ETANOL

Com a finalidade de criar um modelo robusto de escoamentos reativos de spray líquido utilizando combustíveis renováveis, Rochaya (2007) apresentou análises experimentais e numéricas de chamas de sprays. Este autor buscou desenvolver modelos de chamas de sprays de bio-combustíveis em condições semelhantes às encontradas em turbinas a gás.

As análises realizadas por Rochaya (2007) utilizaram dois tipos de combustíveis, etanol e biodiesel, as quais foram desenvolvidas em um combustor aberto e em uma câmara de combustão de pressão controlável. O injetor de combustível utilizado foi do tipo *pressure swirl*, por onde foi injetada uma vazão mássica de 0,32 g/s de etanol nos estudos desenvolvidos com o combustor aberto.

A entrada de ar no combustor estudado foi feita por duas vias: um turbilhonador (*swiller*) e uma entrada de ar auxiliar com fluxo paralelo à linha de centro do spray (*coflow*). As vazões mássicas de ar foram 1,6 g/s e 12,0 g/s, respectivamente. O turbilhonador é responsável pela criação de um redemoinho no escoamento gasoso que cria recirculações de produtos de combustão que auxiliam a estabilidade da chama. A massa de ar injetada pela entrada auxiliar de ar foi ajustada de acordo com a chama em análise possibilitando maior estabilidade do processo. A Figura 1 apresenta uma fotografia do combustor.

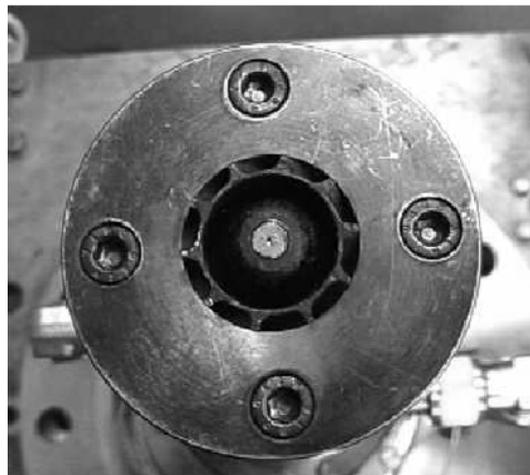


Figura 1: Combustor utilizado por Rochaya (2007)

Este autor também apresentou resultados de experimentos e de simulações do escoamento monofásico, gasoso isotérmico e do escoamento bifásico não reativo. Estas análises preliminares foram feitas para a seleção dos modelos de turbulência e para verificar a capacidade de predição dos modelos de transporte de gotículas do programa FLUENT[®] versão 6.2, que foi utilizado nas simulações. Porém, de acordo com o interesse do presente

trabalho, serão discutidos somente os resultados das medições realizadas com o combustível etanol, do caso reativo, com o combustor aberto.

Os dados experimentais utilizados por Rochaya foram obtidos com o uso de um PIV (*Particle Image Velocimetry*) para a medição do campo de velocidades médias, de um PDPA (*Phase Doppler Particle Analyser*) para a medição de velocidade e distribuição do tamanho de gotas e, de um termopar do tipo K para a medição do campo de temperaturas. O autor atribuiu a incerteza de 50 K nos resultados das medições de temperatura devido ao fato de o termopar se resfriar pelas gotas que o atingiam durante as medições. Através de um levantamento bibliográfico este autor atribuiu incertezas superiores a 15% para as medições com o PDPA. As incertezas das medições com PIV não foram quantificadas.

Nas simulações foi utilizada uma malha não estruturada, tridimensional, de uma seção periódica de 36° da região da chama, com 814.380 células. O domínio computacional foi multi-processado com a técnica MPI em oito processadores de um servidor SunFire v880, equipado com 16 Gb de memória RAM compartilhada. As simulações foram realizadas em duas etapas, em que inicialmente 30.000 iterações foram executadas apenas para a simulação do jato isotérmico e posteriormente mais 10.000 iterações foram executadas para a simulação do jato bifásico reativo.

A modelagem do spray foi feita com a formulação DDM/DSF (*discrete-droplet model / deterministic separated flow model*, que será explicada na seção 2.4.2), sendo a dispersão turbulenta das gotículas contabilizada com um algoritmo de caminhada aleatório. Nesta formulação, a fase contínua é modelada por equações Eulerianas e a fase discreta por equações Lagrangeanas. A turbulência foi modelada com o modelo dos tensores de Reynolds (*Reynolds Stress Model – RSM*). O modelo de combustão β -PDF (*PDF - Probability Density Function*) de elementos de chama laminares foi utilizado, sendo que as bibliotecas de elementos de chama foram geradas com um mecanismo cinético químico de 56 espécies e 351

reações elementares. As bibliotecas de elementos de chama que foram utilizadas nesse trabalho assumiram que as chamas eram adiabáticas, assim não houve perda ou ganho de calor, tanto por radiação quanto por evaporação de gotas. Dessa forma, o efeito do resfriamento evaporativo sobre a chama não foi considerado.

O autor comparou os resultados dos perfis radiais do componente axial de velocidade média da fase gasosa obtidos nas simulações com os dados das medições experimentais. Houve boa concordância entre os resultados, entretanto, as simulações falharam na caracterização dessa componente de velocidade nas proximidades do injetor, onde as recirculações calculadas apresentaram intensidades mais elevadas que as observadas experimentalmente.

Rochaya (2007) também fez comparações entre os resultados dos perfis radiais de temperatura em diferentes posições do spray. Nas proximidades do injetor, e da linha de centro as simulações subestimaram a temperatura medida em aproximadamente 250 K. A justificativa dada a este comportamento foi a de que a mistura simulada era muito rica nesta região. O autor atribuiu a maior concentração de combustível nessa região ao fato de as taxas de transferência interfásica de calor e de massa por convecção serem superestimadas. Nesse sentido, as gotículas apresentaram taxa de evaporação superior à observada experimentalmente.

De forma geral as temperaturas foram superestimadas nas simulações. Este comportamento foi atribuído ao fato de o modelo de combustão usado não considerar o resfriamento evaporativo e a extinção da chama. Observando o comportamento de sprays em experimentos nota-se que a região de maior concentração de gotículas atua como um sorvedouro de calor. Desse modo, caso o resfriamento evaporativo fosse considerado haveria a redução de temperaturas da chama.

Rochaya (2007) concluiu em seu trabalho que a taxa de evaporação excessiva das gotículas foi a principal fonte de erros observados nos perfis de temperatura. Outro problema que

também pode ter influenciado o perfil de velocidades foi o fato de o programa FLUENT[®] não prever corretamente a extinção de chama com o modelo *flamelet* utilizado. Assim, a desconsideração da extinção pelo programa pode ter auxiliado os cálculos das altas temperaturas do escoamento.

Como sugestões para melhorar os resultados de suas simulações o autor sugeriu a substituição do modelo de evaporação de gota, como também a melhoria da definição da distribuição de tamanho de gotas nas condições de contorno do problema. O tipo de atomizador utilizado nas medições experimentais (*pressure swirl*) dificultou a determinação das condições de contorno para a simulação da fase líquida. Essas dificuldades foram provenientes do fato de este atomizador criar um spray muito denso nas proximidades do plano de injeção, o que tornou difícil a caracterização do spray nessa região.

Semelhantemente a Rochaya (2007), mas com o objetivo de avaliar e aperfeiçoar os processos de combustão de sprays, Düwel *et al.* (2007) apresentaram análises experimentais e numéricas de chamas de spray de etanol.

Os estudos desenvolvidos em Düwel *et al.* (2007) utilizaram um combustor aberto que foi inicialmente projetado para estudar chamas gasosas envolvidas por uma entrada de ar auxiliar viciado com fluxo paralelo à linha de centro da chama, ele é descrito em detalhes no trabalho de Cabra *et al.* (2002). Neste combustor, a chama é estabilizada sem a utilização de chama piloto ou corpo rombudo, com o intuito de facilitar a definição de condições de contorno para simulações numéricas. O injetor de combustível utilizado neste combustor foi um atomizador de pressão que gerou um spray de cone oco. Este injetor apresentou as mesmas dificuldades encontradas no trabalho de Rochaya (2007) relacionadas à caracterização das condições de contorno do spray na região da chama. A estabilidade da chama foi obtida quando o etanol foi pré-aquecido a 45 °C, com vazão mássica definida entre 0,39 g/s e 0,54 g/s para a velocidade

de ar paralelo de 0,32 m/s. A Figura 2 apresenta um esquema do combustor, como também uma fotografia da chama analisada por Düwel *et al.* (2007).

Da mesma forma que foi feito por Rochaya (2007), este autor também apresenta resultados de simulações e experimentos do escoamento bifásico não reativo.

Para a caracterização da chama foram utilizadas técnicas experimentais quantitativas de métodos ópticos baseados em laser, entre elas: multi-line NO-LIF (NO-LIF – *Nitric Oxide-Laser Induced Fluorescence*) para a medição de temperaturas na fase gasosa; Mie/LIF e PDA (*Phase Doppler Anemometer*) para a medição de tamanho e velocidade de gotas, e; LIF bicolor para a medição de temperaturas na fase líquida.

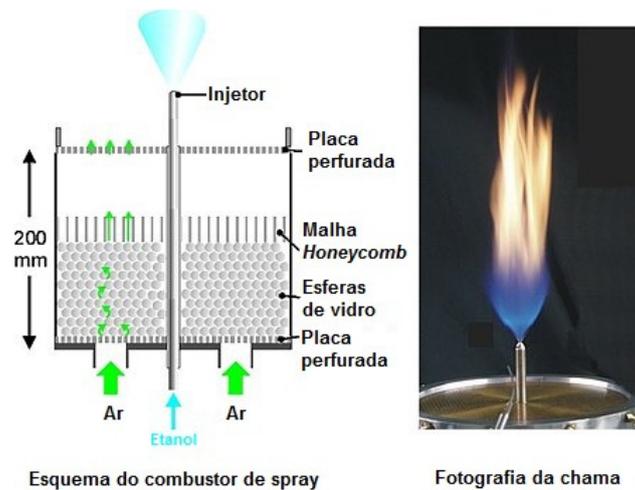


Figura 2: Esquema do combustor e fotografia da chama analisada por Düwel *et al.* (2007)

Para a utilização do *multi-line* NO-LIF foi necessária a sementeira de NO a uma concentração de 1000 ppm na entrada de ar auxiliar, e o intervalo de tempo de 60 s foi despendido para a varredura de toda a área de medição. O combustível foi dopado com rodamina B à concentração de 1 mg/mL para a realização do LIF bicolor. Diferentemente do *multi-line* NO-LIF, as imagens obtidas com o LIF bicolor precisaram ser calibradas, assim foi utilizado um termopar para medir a temperatura num ponto da região de medição. Com a medição simultânea do espalhamento de Mie e do LIF foi possível medir o diâmetro médio de Sauter.

Esta propriedade do spray se relaciona com a razão entre os sinais de LIF e Mie, os quais medem respectivamente o volume e a área total de gota para um dado volume de controle. O PDA foi utilizado para a medição das distribuições de tamanho e de velocidade das gotas para o spray não reativo.

O modelo numérico adotado, para as simulações com e sem reação, utilizou a formulação DDM/SSF (*Discrete Droplet Model/Stochastic Separated Flow*, apresentada na seção 2.4.2), sendo que a fase dispersa foi composta por um número finito de parcelas de gota. Nesta formulação, a fase dispersante foi modelada por equações Eulerianas e a fase dispersa por equações Lagrangeanas. Para o cálculo da velocidade instantânea da fase gasosa, necessária no DDM/SSF, foi utilizado um método de Monte-Carlo que assume uma distribuição Gaussiana para o cálculo das flutuações turbulentas de velocidade. As grandezas calculadas na fase gasosa foram tratadas com a média de Favre. Foi utilizado o modelo de turbulência $k-\epsilon$ Padrão. O domínio modelado foi um plano bidimensional axi-simétrico que teve como origem uma linha a 2 mm acima do bocal. As condições de contorno utilizadas foram, quando possível, retiradas dos experimentos. As distribuições de velocidade e tamanho de gotas foram retiradas das medições feitas com PDA do spray não reativo e a temperatura da fase gasosa foi retirada do NO-LIF. Os autores justificaram o uso da distribuição de gotículas provenientes do experimento não reativo na simulação do spray reativo por assumirem a hipótese de que o tamanho das gotículas não varia consideravelmente enquanto as gotículas não atingem a zona de reação da chama. As demais grandezas foram apenas estimadas através dos dados medidos experimentalmente, o que originou incertezas nos resultados dos cálculos realizados. A combustão foi modelada com um modelo de *flamelets* laminares de spray (Hollmann e Gutheil, 1998), em que suas bibliotecas foram geradas com um mecanismo cinético químico detalhado com 38 espécies e 337 reações elementares. As bibliotecas *flamelets* que foram utilizadas nesse trabalho assumiram que as chamas não eram adiabáticas,

diferentemente de Rochaya (2007). Assim, o fenômeno de resfriamento evaporativo da chama foi considerado.

Os resultados das simulações do spray isotérmico mostraram que as velocidades das gotículas foram superestimadas por até 30% em relação aos dados experimentais. Os autores atribuíram esta diferença à aproximação imprecisa da velocidade radial das partículas, ao desconhecimento dos valores iniciais das propriedades da fase gasosa, e às incertezas das medições da distribuição inicial de tamanho de gotículas. Eles ressaltaram que as simulações de sprays são muito sensíveis às condições iniciais de ambas as fases. Entretanto, nessas simulações, boas aproximações da distribuição de tamanhos de gotas foram alcançadas nas proximidades do injetor.

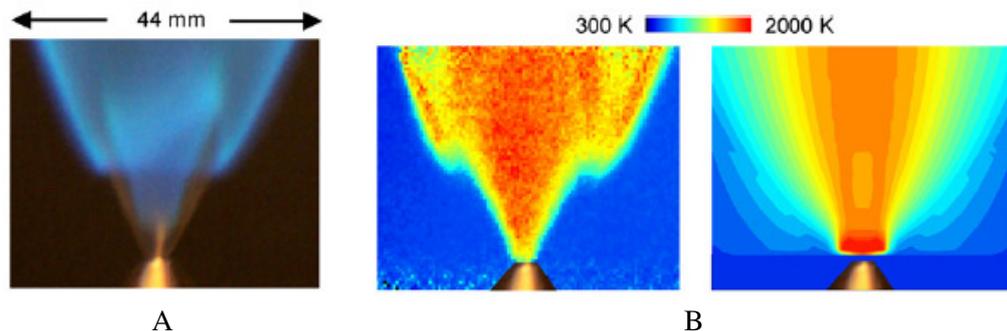


Figura 3: Fotografia (A) e comparação entre resultados de medições experimentais (B-esquerda) e de simulações (B-direita) da chama estudada por Düwel *et al.* (2007)

Analisando o campo de temperaturas, para as simulações reativas, Düwel *et al.* (2007) observaram que as simulações apresentaram resultados próximos dos dados experimentais na região da linha de centro da chama, porém algumas discrepâncias apareceram nos contornos da chama. As justificativas dadas pelos autores para estas diferenças foram as mesmas dadas para as diferenças encontradas nas velocidades de gotículas. As simulações não conseguiram prever a chama dupla que foi observada experimentalmente. A Figura 3-A apresenta uma fotografia da chama estudada, e a Figura 3-B apresenta uma comparação entre as medições

(esquerda) e a simulação (direita) do campo de temperaturas da fase gasosa. Tanto na Figura 3-A quanto na imagem referente às medições na Figura 3-B pode-se observar a chama dupla.

Ge e Gutheil (2008) explicaram que, diferentemente de outros combustores de spray, a chama dupla verificada nesse trabalho foi resultante dos diferentes estágios de evaporação de gotículas. Normalmente, os fenômenos de chama dupla, com duas regiões de reação, devem-se à presença de recirculações no escoamento. No caso em questão, parte do etanol líquido vaporizou-se imediatamente após a atomização. Este vapor formado misturou-se com o ar da entrada auxiliar (*coflow*), e a chama interna se desenvolveu. A chama externa formou-se pela evaporação das demais gotas, o que deu origem à chama dupla.

Dando continuidade ao trabalho de Düwel *et al.* (2007), Ge e Gutheil (2008) aprimoraram o modelo numérico utilizado nas simulações anteriores. Neste trabalho, o cálculo das médias das propriedades provenientes da fração de mistura foi feito com o modelo das funções de densidade de probabilidade transportadas (Pope, 2000).

Os dados experimentais, assim como o modelo numérico foram os mesmos utilizados por Düwel *et al.* (2007), a diferença entre os trabalhos, em se tratando das simulações de etanol, restringiu-se à implementação do modelo das PDFs transportadas no modelo numérico. O trabalho em questão analisou também sprays não reativos e reativos de metanol.

Para a chama de etanol, Ge e Gutheil (2008) utilizaram uma função *joint*-PDF de fração de mistura e entalpia. Esta função *joint*-PDF foi necessária para se representar o fenômeno de resfriamento evaporativo do spray. Esses autores deduziram e modelaram as equações de transporte do tipo PDF, as quais foram resolvidas utilizando-se um método híbrido de Volumes Finitos e Monte-Carlo Lagrangeano.

A Figura 4 mostra que nessas simulações a chama dupla foi modelada. No entanto, discrepâncias apareceram na região do núcleo da zona principal de reação. Os experimentos mostraram que o núcleo da chama desenvolve-se com um ângulo aberto, enquanto que nas

simulações o núcleo desenvolve-se verticalmente. Essas diferenças foram atribuídas às distribuições de tamanhos e velocidades de gotículas que foram definidas como condição de contorno.

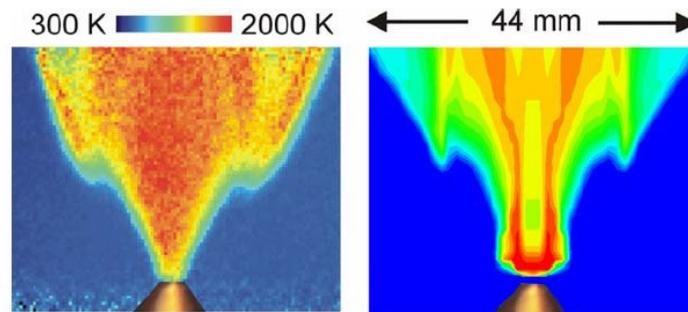


Figura 4: Comparação entre resultados de medições experimentais (esquerda) e de simulações (direita) da chama estudada por Ge e Gutheil (2008).

Os autores fizeram comparações entre os perfis de temperatura simulados e os simulados por Düwel *et al.* (2007), como também entre os medidos experimentalmente. O método PDF apresentou resultados melhores que o modelo baseado em RANS (*Reynolds Averaged Navier Stokes*) proposto por Düwel *et al.* (2007), porém apresentou algumas discrepâncias em relação aos dados experimentais. As diferenças observadas foram atribuídas, pelos autores, ao desconhecimento da vazão de combustível líquido, como também, ao desconhecimento das quantidades relacionadas à turbulência na saída do injetor.

2.2 MODELOS DE TURBULÊNCIA

Escoamentos turbulentos desafiam pesquisadores na proposição de uma descrição precisa de escoamentos reativos. Turns (2000) menciona que em dispositivos práticos os escoamentos turbulentos são encontrados com maior frequência que os laminares. Essa observação é válida

não só para equipamentos não reativos, mas também para dispositivos que envolvem combustão.

A importância da turbulência é justificada pelo fato dela influenciar fortemente a taxa de mistura dos reagentes em processos de combustão. Kuo (1986) ao descrever as características de chamas turbulentas reitera esta observação. Ele menciona que a altura de chamas turbulentas é menor que a de chamas laminares, para um mesma vazão de mistura, mesma razão de ar-combustível, porém com dimensões da abertura de injeção diferentes. Em relação às chamas laminares, as turbulentas apresentam uma zona de reação, em média, mais espessa (Faeth, 1977). Logo, escoamentos turbulentos permitem alcançar uma potência específica mais alta que os escoamentos laminares, permitindo o projeto de equipamentos mais compactos para uma dada demanda de potência.

Na literatura encontram-se vários exemplos de modelagens de escoamentos reativos turbulentos monofásicos. Os modelos dividem-se em sua maioria nas abordagens baseadas na média de Reynolds (RANS), devido à sua vasta aplicação no campo das engenharias, e em menor quantidade nas abordagens baseadas nas simulações das grandes escalas (*Large Eddy Simulation* - LES).

Dentre os vários modelos baseados na abordagem RANS destacam-se o modelo $k-\varepsilon$ Padrão e o modelo RSM. Versteeg e Malalasekera (2007) consideraram o modelo $k-\varepsilon$ Padrão como o modelo mais usado até o momento. Pope (2000) ressalta a sua versatilidade devido à possibilidade de ser usado em uma vasta gama de aplicações. Porém, apesar de seus inúmeros sucessos, o modelo $k-\varepsilon$ Padrão não apresenta resultados muito apropriados para a modelagem de escoamentos livres. Uma das formas encontradas para melhorar os resultados nesses casos é de ajustar as constantes do modelo, como feito por Fiorina *et al.* (2009), Obieglo e Gass (1999), Chen *et al.* (1999), Hinz *et al.* (1999a) que utilizaram o modelo em questão. Aplicações deste modelo e suas variações para a simulação de sprays podem ser encontrados

em Düwel *et al.* (2007), Chirigui *et al.* (2009), Zhou e Yao (1992), Ge e Gutheil (2008) e Hollmann e Gutheil (1998).

O modelo do tensor de Reynolds (*Reynolds Stress Model* - RSM) também chamado de modelo *second-order* ou *second-moment closure* é considerado o modelo de turbulência mais simples capaz de descrever os tensores de Reynolds sem necessitar de ajustes para cada caso simulado (Versteeg e Malalasekera, 2007). No entanto, apesar do consumo adicional no tempo de processamento, o modelo do tensor de Reynolds nem sempre apresenta resultados claramente superiores aos modelos de turbulência mais simples para algumas classes de escoamento. O seu uso justifica-se para a modelagem de escoamentos com características provenientes da anisotropia do tensor de Reynolds, como escoamentos com fortes movimentos helicoidais (Rochaya, 2007). Semelhantemente ao modelo $k-\varepsilon$ Padrão, o RSM não é muito adequado para a realização de simulações de escoamentos livres. Os trabalhos de Chen (1999), Coelho e Peters (1999) e Hinz *et al.* (1999b) mostram exemplos de aplicações do RSM para a simulação de chamas monofásicas e os trabalhos de Rochaya (2007) e Chen e Pereira (1996) exemplificam o seu uso para chamas de spray.

Outra forma de modelar a turbulência é através da proposta pela simulação das grandes escalas turbulentas, a abordagem LES. Diferentemente da abordagem em RANS, a em LES não faz a média temporal das equações de Navier-Stokes, mas sim, uma filtragem espacial. Com esta filtragem espacial, as grandes escalas do movimento turbulento são efetivamente calculadas, enquanto que as demais escalas são modeladas através de relações matemáticas. O modelo LES alcança resultados com grande exatidão quando comparados a dados experimentais e resultados de modelagens baseadas na média de Reynolds. Entretanto, os custos computacionais envolvidos na modelagem da turbulência com LES ainda são mais altos que os custos envolvidos nas modelagens baseadas na média de Reynolds (Chirigui *et al.*, 2009). Exemplos de chamas turbulentas modelados com LES podem ser encontrados nos

trabalhos de Fukumasu (2010), Andrade (2009) e Mustata et al. (2006). Apte *et al.* (2009) e Jones *et al.* (2010) mostram exemplos de aplicação do modelo LES para a simulação de sprays não reativos.

2.3 MODELOS DE COMBUSTÃO

Modelos de combustão são empregados para representar reações químicas e seus efeitos em cálculos de escoamentos reativos. A função de um modelo de combustão é representar as reações químicas partindo-se da concentração das espécies químicas, a uma dada pressão e temperatura de certo volume de controle, considerando um mecanismo cinético químico. Devido à característica exotérmica das reações de combustão, este processo atua como fonte de calor e de produtos de reação para o escoamento, como também atua como sorvedouro de reagentes. Indiretamente, por ser uma fonte de calor para o escoamento, o processo altera as propriedades físicas e de transporte da mistura.

O mecanismo cinético químico de um processo de combustão é o conjunto de equações de reações químicas que descrevem a oxidação do combustível. Esse mecanismo pode ser modelado com vários níveis de simplificação de acordo com o interesse do estudo. Para representar este conjunto de reações químicas com grande detalhamento seria necessária a sua modelagem considerando-se mecanismos de reação compostos por grande número de espécies químicas e sub-reações. Isso implicaria na solução de equações de transporte para cada espécie e na simulação de cada sub-reação. Geralmente, em estudos de escoamentos reativos turbulentos este tipo de abordagem é evitado devido ao seu elevado custo de processamento de cálculo. Desse modo, estudos de combustão turbulenta normalmente utilizam modelos de reação simplificados para a representação do mecanismo cinético químico.

Para escoamentos turbulentos que usam modelos de turbulência baseados tanto na abordagem RANS quanto LES, as quantidades físicas transportadas são suas médias temporais e filtragens espaciais, respectivamente. Essa característica origina dificuldades adicionais ao cálculo das reações químicas. Com o transporte das concentrações das espécies tratadas estatisticamente surge um problema na determinação de suas taxas de formação e consumo, pois as reações são calculadas com as suas quantidades instantâneas. Jones e Whitelaw (1982) ressaltam que a consideração das flutuações turbulentas é imprescindível para a determinação dessas taxas de formação e de consumo. Dessa forma, os modelos de combustão turbulenta, em comparação com modelos de combustão laminar, têm dificuldade adicional na representação do processo de combustão, pois devem atender a necessidade de se modelar os efeitos das flutuações turbulentas na determinação das concentrações das espécies.

Jones e Whitelaw (1982) classificaram vários modelos de combustão em diferentes categorias, discutindo suas aplicações e limitações, indicando as dificuldades na compreensão de chamas turbulentas e sugerindo instruções para análises posteriores. Versteeg e Malalasekera (2007) e Kuo (1986) descrevem também formas de modelar a combustão turbulenta apresentando suas respectivas vantagens e desvantagens. Devido à vasta gama de modelos e sua alta complexidade, neste trabalho serão discutidos apenas os que vêm sendo utilizados na combustão de sprays.

Masri e Gounder (2010) ao analisarem imagens simultâneas de LIF-OH e LIF-Acetone observaram os vários modos de combustão de chamas de etanol e acetona que podem ser caracterizados ora como chama de difusão, ora como chama pré-misturada. Gounder *et al.* (2005) ao analisar imagens obtidas simultaneamente de LIF-OH e de espalhamento de Mie observaram a existência de uma região de pré-mistura nas proximidades do bocal de injeção, como também a de difusão, mais ao longe. Estes autores justificam a chama de pré-mistura pelo fato de ocorrer pré-vaporização do combustível já no bocal de injeção que se mistura

com o ar utilizado como fluido de arrasto para as gotículas. Kuo (1986) ressalta que embora a combustão de gotículas em sprays seja inerentemente governada pela difusão de vapor de combustível e oxidante, ambas as abordagens de chama de difusão e pré-misturada têm sido aplicadas a modelagem de chamas de spray.

Faeth (1977) em seu trabalho mostrou que as definições de estrutura de chamas monofásicas aplicam-se de forma análoga para chamas de spray. Desse modo, chamas em que combustível e oxidante entram separadamente no combustor apresentam a estrutura de uma chama de difusão (por exemplo: atomização do combustível diretamente na região da chama, sendo que a atomização é feita apenas com o uso de combustível) e, as que têm a entrada de combustível e de oxidante, misturados, antes de entrar no combustor apresentam estrutura de chama de pré-mistura (por exemplo: atomização com posterior carregamento das gotículas com oxidante para a região de chama). Quando a concentração de oxidante na pré-mistura é muito baixa em relação à concentração estequiométrica algumas características de chamas pré-misturadas são presenciadas, mas as características de chama de difusão são predominantes (Faeth, 1977). Nessa situação é verificada a presença de uma zona de reação, proveniente dessa pré-mistura, nas proximidades do injetor, o que auxilia na estabilização da chama. Esse comportamento difere do encontrado em chamas monofásicas que em concentrações semelhantes de oxidante na pré-mistura ainda apresentam comportamento de chama de difusão, como visto no caso da chama Sandia D (Flame D, 2011).

A combustão de sprays geralmente é modelada assumindo que as gotículas simplesmente evaporam sem a presença de chamas-envelope (Faeth, 1983). Assim, assume-se que o vapor de combustível é injetado pela evaporação das gotículas na fase gasosa, para reagir subsequentemente em taxas determinadas de forma semelhante às de chamas puramente gasosas. Nesse sentido, as gotículas dentro do spray são assumidas como fontes distribuídas de vapor de combustível. Nota-se, portanto, que a utilização de modelos de chama de difusão

é uma aproximação razoável para a modelagem de chamas de spray do tipo jato, onde o combustível é injetado separadamente do oxidante.

Faeth (1983) apresenta uma revisão dos principais trabalhos relacionados com a combustão de sprays até a época de publicação de seu trabalho. Os principais modelos de combustão utilizados nesses trabalhos revisados são de uma única reação global, os quais são: equilíbrio químico com e sem PDF estocástica, *eddy-breakup*, *eddy-dissipation concept*. Os resultados discutidos em Faeth (1983) apresentaram boa aproximação com dados experimentais, quando disponíveis. O autor evidenciou que as limitações das técnicas experimentais disponíveis na época não permitiram uma avaliação mais completa de sprays. Nesse sentido, as avaliações realizadas não tiveram muitos detalhes, como são encontrados em trabalhos recentes.

Rochaya (2007) apresenta a modelagem de combustão de sprays com o uso do modelo β -PDF de *flamelets* laminares. Neste modelo a chama turbulenta é vista como uma combinação de chamas laminares distorcidas. Rochaya (2007) e Versteeg e Malalasekera (2007) mencionam que a principal vantagem deste método é que os efeitos realistas da cinética química podem ser incorporados de forma simples. Na geração das bibliotecas *flamelet*, Rochaya considera reatores adiabáticos. Essa opção não leva em consideração o resfriamento evaporativo causado pela evaporação das gotículas do spray. Düwel *et al.* (2007) e Hollmann e Gutheil (1998) utilizaram uma variação do *flamelet* laminar que eles denominaram de *flamelets* de spray laminar por levarem em consideração o resfriamento evaporativo do spray. Nesse caso, os reatores que geraram a biblioteca *flamelet* foram considerados não adiabáticos.

Ge e Gutheil (2008) utilizaram o mesmo modelo de combustão utilizado por Düwel *et al.* (2007) e Hollmann e Gutheil (1998), porém as médias das propriedades obtidas do modelo de combustão foram calculadas através do modelo das PDF's transportadas. As equações do modelo PDF são resolvidas utilizando-se um método híbrido de volumes finitos e Monte-Carlo Lagrangeano. Ge e Gutheil (2008) também fazem a comparação da distribuição de

fração de mistura deste último modelo citado com o β -PDF convencional e com um modelo modificado de β -PDF. Embora o método das PDF's transportadas tenha uma maior exatidão na simulação de escoamentos turbulentos reativos ele é muito custoso para ser usado em cálculos de engenharia (Versteeg e Malalasekera, 2007).

2.4 MODELOS DE SPRAYS

A modelagem de sprays pode ser realizada partindo-se de diferentes pressupostos básicos conforme a necessidade da análise. Modelos de spray variam desde simples correlações empíricas até modelos bifásicos sofisticados que consideram os efeitos da turbulência como também os efeitos das reações químicas.

A forma mais simples de se modelar características de um spray é através de correlações empíricas. Kuo (1986) mencionou que correlações empíricas foram extraídas de vários estudos de sprays. Estas correlações possibilitam o projetista ter conhecimento mínimo de algumas características do spray para a tomada de decisões. Como exemplos de algumas estimativas extraídas destas correlações encontram-se a porcentagem de combustível vaporizado, o espalhamento do spray e mesmo a emissão de poluentes em função da temperatura, da velocidade do ar e do tipo de injetor. Modelos como os de balística, unidimensionais e reatores perfeitamente misturados são descritos em Faeth (1977), Kuo (1986) e Turns (2000). Apesar destes modelos apresentarem bons resultados para análises preliminares, para a simulação de sprays estes modelos não apresentam detalhes suficientes como os modelos de homogeneidade local e de escoamentos separados. Faeth (1983) reitera que estes modelos são necessários para predições de sprays práticos.

O modelo de homogeneidade local [*Locally Homogeneous Flow* – LHF, Faeth (1977)] considera que a fase líquida e a fase gasosa se encontram em equilíbrio dinâmico e

termodinâmico. Assim, em cada ponto do escoamento, ambas as fases têm a mesma velocidade, temperatura e se encontram em equilíbrio de fases. Este modelo é usual apenas para sprays constituídos por gotículas infinitesimalmente pequenas. O modelo de escoamentos separados (*Separated Flow* - SF) leva em consideração os efeitos das taxas de transporte finitas entre as fases. Estes dois modelos são descritos com detalhes mais adiante.

2.4.1 APROXIMAÇÃO DE HOMOGENEIDADE LOCAL DE ESCOAMENTO

A premissa básica do LHF é que as escalas de tempo dos transportes interfásicos são muito rápidas em comparação as escalas de tempo do escoamento. Esta aproximação requer que as fases tenham a mesma temperatura e velocidade, como também, que o equilíbrio de fases seja mantido em todos os pontos do escoamento. Dessa forma, o LHF é um processo controlado pela mistura (Faeth, 1987). Estas aproximações são válidas se as gotículas forem muito pequenas.

Na aproximação de homogeneidade local, o spray é equiparado a um jato monofásico com as mesmas condições de contorno de quantidade de movimento linear e razão ar-combustível. Assim, esta aproximação pode ser considerada como o caso limite em que o spray é composto por gotículas de diâmetros infinitesimais. Faeth (1983) e Kuo (1986) mostraram que alguns autores avaliaram a semelhança entre chamas de sprays e chamas gasosas com mesmas condições de quantidade de movimento e razão ar-combustível. Estas análises demonstraram que maior semelhança foi obtida para sprays que apresentaram diâmetro de gotícula entre 10 μm e 20 μm . Particularmente, em suas análises deste modelo, Faeth (1983) apresentou que para chamas de spray submetidas à pressão atmosférica resultados satisfatórios só são alcançados com gotas menores que 10 μm .

A principal vantagem deste modelo é requerer informações mínimas sobre as características do injetor, neste caso, as distribuições de tamanho e velocidade das partículas não influenciam os cálculos. Essa é uma característica muito vantajosa desse modelo, pois a obtenção das propriedades do injetor é uma tarefa difícil e influencia fortemente os resultados de cálculos com o modelo SF. Outras vantagens deste modelo são que: códigos computacionais comuns não precisam sofrer adaptações significativas, pois a forma de cálculo é a mesma para escoamentos de monofásicos; e não são utilizadas muitas constantes empíricas, o que reduz as incertezas na modelagem. É válido frisar que as condições de contorno para a solução numérica da abordagem LHF são as mesmas utilizadas em escoamentos monofásicos, sendo que a fase líquida é especificada apenas como uma fração mássica.

Este modelo é útil para uma primeira estimativa da estrutura de sprays, servindo muito bem para a determinação das dimensões mínimas da chama e dando indicações do potencial do processo de combustão com a melhoria da atomização. Porém, para a aplicação em sprays práticos, o uso deste método é questionável. Faeth (1977) e Kuo (1986) discutiram resultados de trabalhos que procuraram simular sprays práticos com o modelo LHF e não obtiveram resultados satisfatórios, mesmo para gotículas com tamanhos próximos a 45 μm . Como alternativa de modelo mais geral para aplicações de spray encontram-se os modelos de escoamentos separados que são apresentados a seguir.

2.4.2 APROXIMAÇÃO POR ESCOAMENTOS SEPARADOS

Kuo (1986) considerou este tipo de aproximação a mais lógica para a simulação de problemas de combustão de spray. Faeth (1987) mencionou que esta aproximação tem a vantagem de poder ser aplicada a uma vasta diversidade de escoamentos dispersos. Modelos de escoamentos separados podem considerar de forma específica as taxas finitas de troca de

massa, quantidade de movimento linear e energia entre as fases. No entanto, estas taxas não são calculadas diretamente, mas sim modeladas, muitas vezes através de correlações empíricas, devido ao elevado custo computacional necessário para o seu cálculo (Sirignano, 2010).

Geralmente é assumido que o spray é diluído nestes modelos. A principal limitação no uso de modelos de escoamentos separados envolve a dificuldade nas calibrações de seus modelos de transferências interfásicas e a representação das características do injetor (Faeth, 1983). A aproximação por escoamentos separados trata invariavelmente a fase dispersante como fase contínua, porém a fase dispersa pode ser tratada como contínua ou discreta (Faeth, 1987).

A representação da fase dispersa como contínua pode ser feita de duas formas principais. A primeira envolve cálculos estatísticos e é chamada de modelo contínuo de gotículas [*continuous droplet model* – CDM, (Faeth, 1977)]. Neste modelo, as propriedades da fase dispersa são representadas por uma função de distribuição estatística definida em um espaço multidimensional. Esta função de distribuição é admitida como propriedade conservada e, com isso, é obtida uma equação de transporte desta função, a qual é resolvida conjuntamente com as equações da fase dispersante. A fase dispersante é modelada com uma abordagem Euleriana e os efeitos da fase dispersa são considerados com a introdução de termos fontes em suas equações de transporte.

A outra forma para a modelagem de sprays como escoamentos separados que emprega uma formulação contínua para a fase dispersa é o modelo de formulação contínua [*continuous-formulation model* – CFM, (Faeth, 1977)]. Este modelo parte da consideração que o escoamento das duas fases é interpenetrante e utiliza correlações empíricas para o transporte interfásico. Esse modelo assemelha-se ao LHF, porém considera os transportes interfásicos.

Faeth (1983) menciona que o CDM é melhor empregado quando apenas poucos fenômenos são calculados, como por exemplo, o movimento de partículas monodispersas não

evaporativas. Entretanto, o número de fases que devem ser consideradas [pois neste caso cada classe de tamanho de gotas (Sirignano, 2010) é considerada como uma fase], ou as dimensões das funções de distribuição estatísticas, tornam-se consideravelmente grandes para escoamentos polidispersos que envolvem transferências de calor e de massa (Faeth, 1987). Deste modo, a abordagem deste texto se limitará à formulação discreta da fase dispersa, sendo que ela supera as dificuldades encontradas pelo CDM e pelo CFM para a representação de sprays práticos.

A maioria das análises de escoamentos separados de sprays evaporativos e inflamáveis emprega uma aproximação chamada de *particle-source-in-cell* (PSIC) ou *discrete droplet model* (DDM) (Faeth, 1977). Esta aproximação divide o spray em um número representativo de amostras de gotas, cujo movimento e transportes são rastreados através do escoamento utilizando-se uma abordagem Lagrangeana. Esse procedimento corresponde a um cálculo estatístico (Monte Carlo) para as propriedades líquidas sendo que um número finito de gotas é usado para representar todo o spray (Faeth, 1983). Semelhantemente ao CDM, o DDM é acoplado com a fase dispersante através da inclusão de termos fonte nas equações governantes da fase dispersante.

O DDM elimina erros de difusão numérica na solução da dispersão e o número de classes de partículas utilizadas para representar o escoamento de forma satisfatória não é excessivo (Faeth, 1983). Este modelo, também é conveniente na representação completa dos fenômenos de transporte interfásicos.

Faeth (1983) e Kuo (1986) definem dois tipos de formulação para o DDM: a DSF (*deterministic separated flow*) e a SSF (*stochastic separated-flow*).

Na formulação DSF as taxas finitas de transporte interfásico e a diferença de velocidade entre as fases (escorregamento) são consideradas, mas as interações turbulência/fase dispersa são negligenciadas. Nesta formulação é assumido que as partículas interagem apenas com o

escoamento médio. Tendo em vista que o movimento das partículas é influenciado pelas características de sua injeção e da fase dispersante que as envolvem, quando as quantidades da fase dispersante são médias, partículas de mesmas propriedades que são injetadas numa mesma posição do domínio acabam seguindo trajetórias idênticas. Assim, em casos de modelagens em regime permanente com a formulação DSF as trajetórias das partículas tornam-se determinísticas.

Faeth (1987) destacou que havia evidências que tanto as taxas finitas de transporte interfásico quanto as interações fase dispersa/turbulência são importantes na maioria dos escoamentos práticos. Como descrito anteriormente, na aproximação LHF as taxas finitas de transporte e o escorregamento são negligenciados, como também, as interações turbulentas, que do mesmo modo são ignoradas na formulação DDM/DSF. Dessa forma, a formulação SSF foi proposta para superar essa deficiência na descrição do comportamento dos fenômenos envolventes à fase dispersa. Nela, os fenômenos de escorregamento, as taxas finitas de transporte interfásico e as interações turbulentas são considerados.

O acoplamento interfásico da turbulência pode ser representado pela dispersão turbulenta das partículas, que acopla a fase dispersa com a dispersante, como também pela modelagem da modulação da turbulência, que acopla a fase dispersante com a dispersa.

Uma das formas de se modelar a dispersão turbulenta de partículas, a qual foi utilizada neste presente estudo, é através de modelos de caminhada aleatório (Faeth, 1983). Neste tipo de abordagem, conforme as partículas discretas caminham através do escoamento assume-se que elas interagem com uma sucessão de turbilhões. Nos turbilhões as propriedades são admitidas como constantes, mas mudam de forma aleatória de um turbilhão para outro. Um dos modelos do tipo *random-walk* é apresentado com mais detalhes no item 4.4.5.

A modulação da turbulência corresponde à contabilização da influência da presença de partículas na produção e na dissipação de energia cinética turbulenta da fase dispersante. Na

literatura podem ser encontradas formas de se modelar a modulação de turbulência, como por exemplo, o modelo padrão (Faeth, 1983), o proposto em Crowe (2000), o modelo termodinamicamente consistente (Chrigui et al., 2004), o modelo consistente (Lain e Sommerfeld, 2003) e o proposto em Mando et al. (2009). Em Chrigui (2005) é apresentado um levantamento bibliográfico detalhado dos três primeiros modelos. Neste último trabalho estudos experimentais foram desenvolvidos para avaliar as características dos três modelos que foram escolhidos pelo autor. A modulação da turbulência é representada pela adição de termos fonte nas equações da energia cinética turbulenta e na equação da dissipação desta energia. Dessa forma, os efeitos da presença de partículas/gotículas são acoplados à turbulência da fase dispersante.

3 DADOS EXPERIMENTAIS

Experimentos bem projetados são essenciais para a validação de modelos de combustão (Kohse-Höinghaus e Jeffries, 2002). Experimentos de chamas de spray de etanol são imprescindíveis para se estudar a sua estrutura e suas demais características.

Com o objetivo de estudar a estrutura de chamas de spray de etanol Marley et al. (2004) utilizaram a técnica de LIF-OH em um combustor aberto com entrada de ar auxiliar paralela à linha de centro do spray. A injeção do combustível foi feita por um atomizador do tipo *pressure swirl*. Nessa mesma linha em Gounder et al. (2005) foi utilizada a técnica de LIF-OH em conjunto com a de espalhamento de Mie para a análise da estrutura de chamas de etanol em um combustor aberto com entrada de ar auxiliar paralela à linha de centro do spray, porém com um atomizador ultrassônico. Neste trabalho o combustor dispôs de uma chama piloto anular para estabilizar a chama de spray. Esses dois trabalhos apresentaram análises qualitativas de chamas de spray, em que apenas a localização das zonas de reação e das gotículas foi observada.

Poucos trabalhos apresentam medições detalhadas para servirem de base de comparação com resultados de simulações numéricas são encontrados na literatura. Os trabalhos de Ge e Gutheil (2008), Düwel et al. (2007) e Rochaya (2007) já descritos nesta monografia são exemplos dos que apresentam análises quantitativas detalhadas. Entretanto, como discutido no capítulo de revisão bibliográfica, os experimentos apresentados por estes autores ainda apresentaram insuficiências na determinação de algumas características da chama de spray. Nesses três trabalhos, seus respectivos autores mencionam que o desconhecimento detalhado da distribuição do tamanho e velocidade de gotas logo nas proximidades do injetor prejudicou os resultados das simulações.

Interessado em estudar os modos de combustão que predominam na iminência da ocorrência de *blow-off* em chamas de spray, Masri e Gounder (2010) apresentaram dados experimentais detalhados de chamas turbulentas de spray de etanol e acetona. Estes autores utilizaram o mesmo combustor que foi usado por Gounder et al. (2005), porém com algumas alterações.

O estudo desenvolvido por esses autores também teve o objetivo de fornecer dados detalhados para servir de base de comparação para a realização de validações de modelos físicos e matemáticos de processos de combustão de sprays. Nesse sentido, foram apresentadas medições de temperatura média da fase gasosa, distribuição radial da componente axial de velocidade média e de flutuações turbulentas de velocidade, como também, distribuição radial do tamanho das gotículas. O nível de detalhamento dos dados publicados foi o principal motivo que levou este trabalho a ser selecionado para servir de base de comparação para os resultados das simulações desenvolvidas nesta dissertação. Assim, a seguir é apresentada a descrição do aparato experimental utilizado, como também, os resultados obtidos pelos autores dessas medições.

Um esquema do combustor utilizado por Masri e Gounder (2010) é mostrado na Figura 5. O injetor por onde as gotículas foram lançadas tem 10,5 mm de diâmetro interno, o qual é envolto por uma chama piloto anular localizada 7 mm a montante do plano de saída. Uma entrada de ar auxiliar, com fluxo paralelo à chama, de 104 mm de diâmetro envolve o bocal e a chama piloto. Esta entrada forneceu ar a velocidade constante de 4,5 m/s com intensidade de turbulência menor que 1,0%. O combustor foi confinado em um túnel de vento vertical com seção transversal quadrada com 290 mm de lado que forneceu uma velocidade de 4,5 m/s, também com intensidade de turbulência menor que 1,0%. Um atomizador ultrasônico foi posicionado a 215 mm a montante do plano de saída do bocal, o qual gerou gotículas com momento linear nulo e um diâmetro médio de Sauter (*Sauter Mean Diameter* – SMD) de 40 μm . Um fluxo de ar arrastou estas gotículas até a saída do injetor onde a temperatura,

velocidade e distribuição de gotas foram medidas, o que permitiu a definição das condições de contorno para a modelagem da chama.

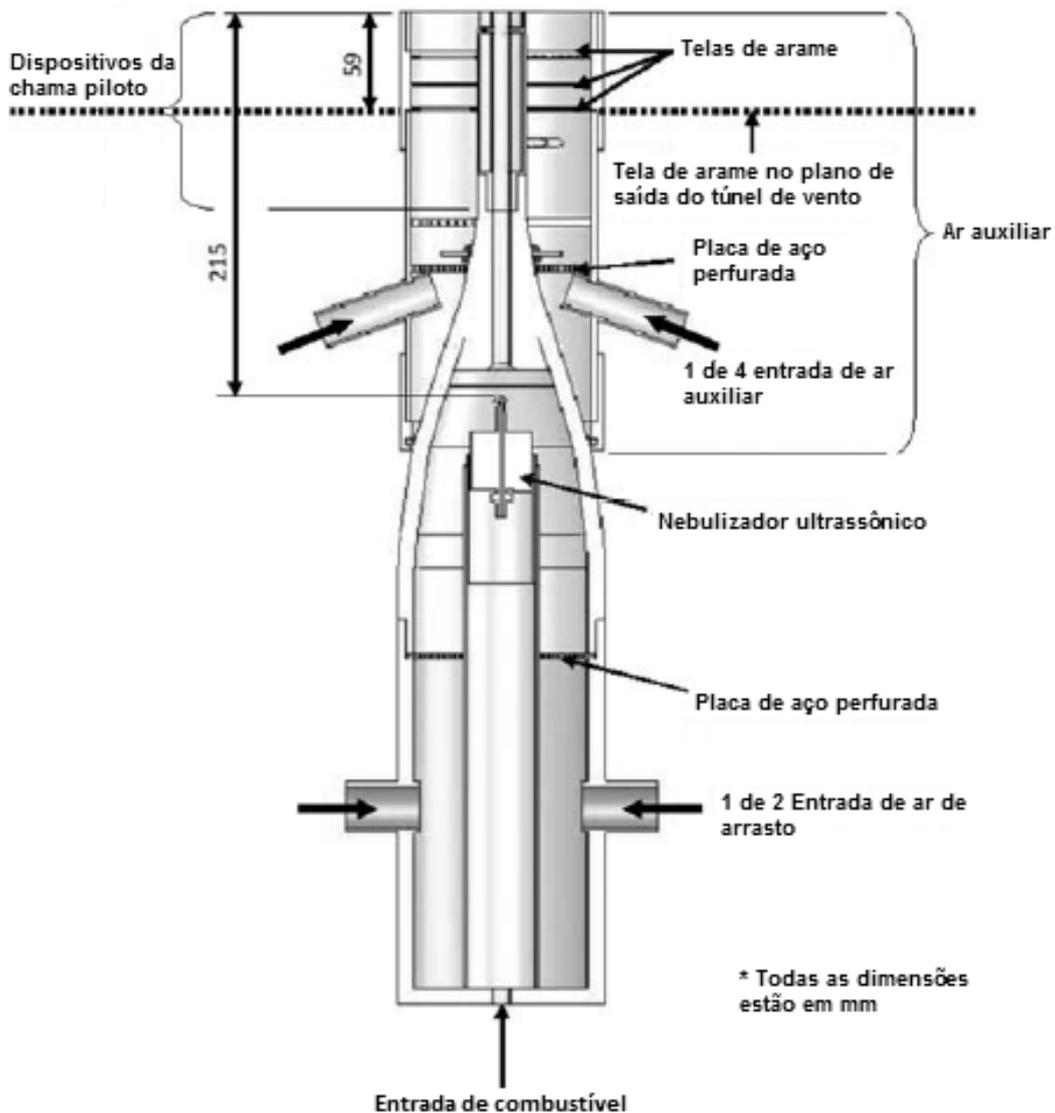


Figura 5: Esquema do combustor usado por Masri e Gounder (2010).

Nos experimentos, a chama piloto foi ajustada com uma mistura estequiométrica de hidrogênio, acetileno e ar com a mesma concentração de átomos de carbono e hidrogênio que a mistura ar-combustível do spray. A mistura da chama piloto foi injetada a uma velocidade de 1,5 m/s no plano de saída das placas perfuradas (a medição dessa velocidade foi feita com a mistura a frio). A vazão mássica de combustível líquido injetada pelo atomizador foi de 45,00 g/min, sendo que apenas 30,71 g/min foi medida após a saída do bocal. Dessa forma,

14,29 g/min de combustível líquido evaporou durante o processo de injeção de combustível no caminho definido entre o nebulizador ultrassônico e a região da chama, que pode ser visto na Figura 5.

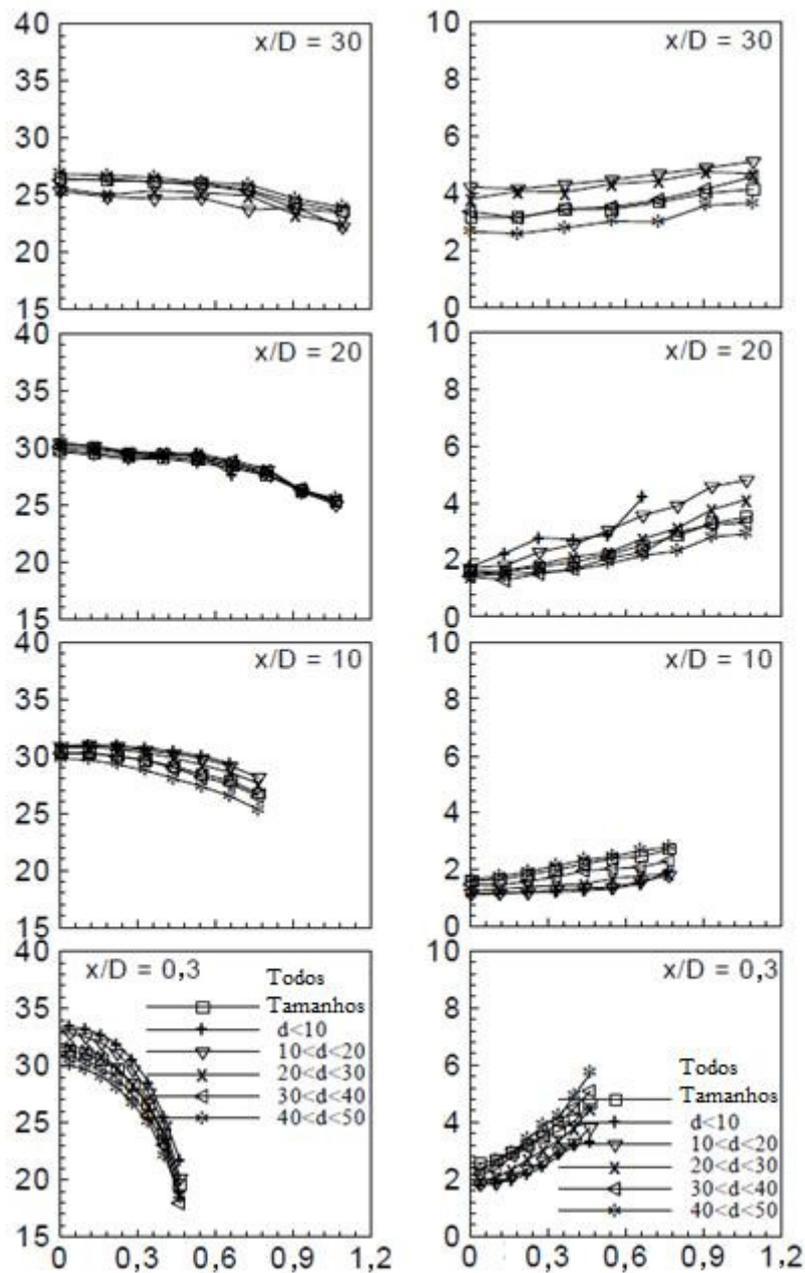


Figura 6: Distribuições de velocidade média axial (esquerda) e flutuações turbulentas de velocidade axial (direita) na direção radial do spray, extraído de Masri e Gounder (2010).

A partir das medições das componentes axiais de velocidades e de suas flutuações turbulentas podem ser extraídas essas mesmas quantidades para a fase gasosa. Segundo Masri e Gounder

(2010), essas grandezas para a fase gasosa equivalem-se às mesmas de gotículas que têm diâmetro menor que $10\ \mu\text{m}$, pois gotículas nessas dimensões acompanham o escoamento da fase gasosa. A Figura 6 apresenta estes perfis, para quatro posições axiais $x/D = 0,3; 10; 20$ e 30 (D é o diâmetro interno do injetor). Estes dados, como também a distribuição do tamanho de gotas, apresentado a seguir, foram obtidos com um PDA.

As distribuições de tamanho de gotículas são apresentadas da Figura 7 até a Figura 10, nos planos axiais de $x/D = 0,3; 10; 20$ e 30 . É importante destacar que as incertezas de todas as medições realizadas pelos autores do experimento em questão não foram apresentadas em Masri e Gounder (2010).

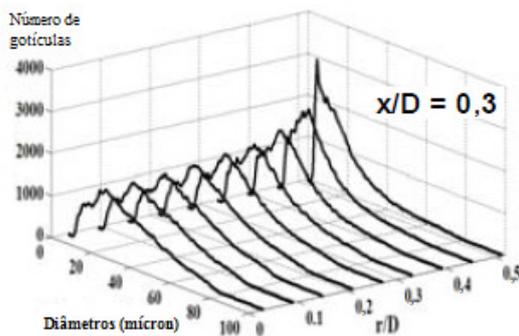


Figura 7: Distribuição de tamanho de gotículas no plano axial x/D 0,3, extraído de Masri e Gounder (2010).

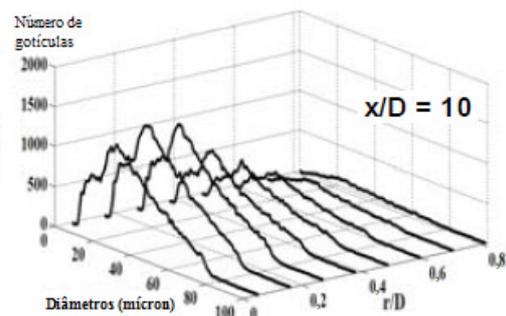


Figura 8: Distribuição de tamanho de gotículas no plano axial x/D 10, extraído de Masri e Gounder (2010).

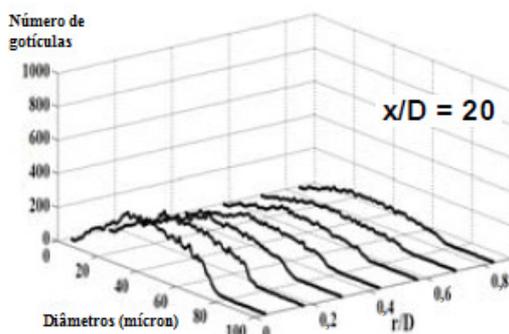


Figura 9: Distribuição de tamanho de gotículas no plano axial x/D 20, extraído de Masri e Gounder (2010).

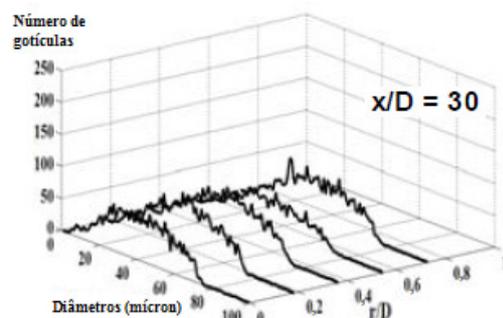


Figura 10: Distribuição de tamanho de gotículas no plano axial x/D 30, extraído de Masri e Gounder (2010).

Os perfis de temperaturas radiais foram medidos por Masri e Gounder (2010) com a utilização de um termopar do tipo R, sendo estes medidos nos planos de $x/D = 10, 20$ e 30 . Estes perfis são mostrados na Figura 11 até a Figura 13. Os valores obtidos para a temperatura encontram-se em Kelvin, mas devem ser acrescidos do valor de $298,15$ K que é a temperatura de referência.

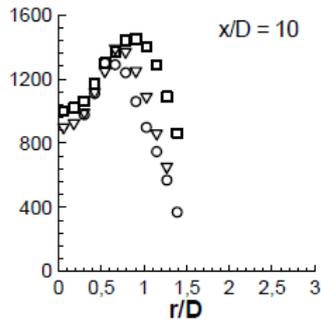


Figura 11: Distribuição de temperaturas no plano axial $x/D = 10$. (Chama estudada = Quadrados). Extraído de Masri e Gounder (2010).

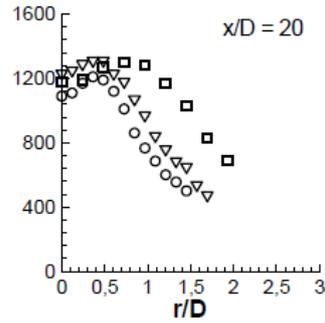


Figura 12: Distribuição de temperaturas no plano axial $x/D = 20$. (Chama estudada = Quadrados). Extraído de Masri e Gounder (2010).

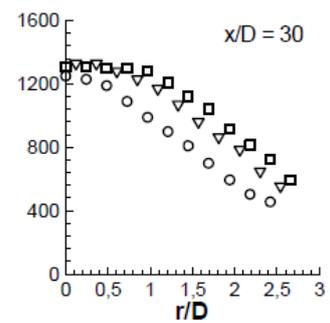


Figura 13: Distribuição de temperaturas no plano axial $x/D = 30$. (Chama estudada = Quadrados). Extraído de Masri e Gounder (2010).

4 MODELAGEM DA CHAMA DE SPRAY

A modelagem da chama de spray parte da abordagem Euler-Lagrange, neste trabalho. Nesta abordagem a fase dispersante é modelada com equações diferenciais parciais conservativas, as quais são obtidas assumindo um referencial Euleriano. A fase dispersa é modelada com equações diferenciais ordinárias obtidas a partir de um referencial Lagrangeano. Este capítulo apresenta essas equações, tanto as Eulerianas, quanto as Lagrangeanas.

Especificamente, numa primeira etapa são apresentadas as equações que foram utilizadas para modelar a fase gasosa. As equações dessa fase são semelhantes às empregadas em modelagens de escoamentos monofásicos de meios contínuos. Em seguida é apresentado o tratamento que foi utilizado para se modelar a turbulência e a combustão.

A modelagem do spray é descrita na quarta seção deste capítulo. Nela são descritos os modelos de movimentação e evaporação de gotículas, as interações entre elas, o acoplamento interfásico e, a dispersão turbulenta, como também a modulação de turbulência.

4.1 EQUAÇÕES DE CONSERVAÇÃO DA FASE GASOSA

Os principais processos envolvidos em um escoamento reativo correspondem à dinâmica da mistura, às reações químicas e à transferência de calor através dessa mistura num domínio de interesse. Apesar de esses processos serem acoplados entre si, é comum desacoplá-los para a sua modelagem. A dinâmica de uma mistura é bem representada por um conjunto de equações conservativas: de massa, de quantidade de movimento linear e das espécies químicas (para a maior parte dos escoamentos encontrados em aplicações práticas de engenharia). A modelagem da transferência de calor é feita através da equação de conservação da energia em conjunto com as equações anteriores, para escoamentos em que a transferência de calor por

radiação é desconsiderada, como é o caso deste trabalho. As reações químicas são modeladas com um conjunto de equações que representam um mecanismo cinético químico. Por motivo de simplificação do procedimento de cálculo, o mecanismo cinético pode ser limitado a uma única reação global, como foi feito neste trabalho.

A seguir são apresentadas as equações de conservação. A equação relacionada à reação química será apresentada mais adiante nesse capítulo, juntamente à descrição dos modelos de combustão. As equações apresentadas nesta seção correspondem às utilizadas em escoamentos de fluidos Newtonianos com baixo número de Mach ($Ma < 0,3$). Porém, apesar do baixo Ma do escoamento, o fluido foi modelado com massa específica variável. Esse tipo de tratamento é comumente utilizado na modelagem de processos de combustão em que a variação da massa específica é originada apenas por reações químicas, não ocorrendo assim, por variações de pressão como acontece em escoamentos de alta velocidade ($Ma > 0,3$).

As equações de conservação foram baseadas no sistema de coordenadas cartesiano tridimensional. Para simplificar a representação, essas equações são apresentadas na notação indicial. As equações que descrevem o comportamento de um spray serão apresentadas posteriormente.

A equação de conservação de massa pode ser descrita por:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i}{\partial x_i} = 0, \quad (1)$$

onde, ρ corresponde à massa específica, t ao tempo, u_i a velocidade do fluido na direção i , x_i a coordenada espacial na direção i . O primeiro termo do lado esquerdo desta equação corresponde à taxa de variação temporal e o segundo termo ao fluxo líquido devido ao transporte advectivo de massa. As equações de quantidade de movimento correspondem às equações de Navier-Stokes que são descritas como:

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i u_j}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[2\mu S_{ij} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \left(\mu \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \right) \right] + \rho g_i, \quad i = 1, 2, 3 \quad (2)$$

em que,

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right), \quad (3)$$

onde, p corresponde à pressão, δ_{ij} ao operador delta de Kronecker, μ à viscosidade molecular do fluido, S_{ij} ao tensor de deformação, e g_i à aceleração da gravidade na direção i . Semelhantemente à equação da conservação da massa, os termos do lado esquerdo correspondem, respectivamente, à taxa de variação temporal e ao fluxo líquido devido ao transporte advectivo de quantidade de movimento. Do lado direito encontram-se da esquerda para direita os fluxos de momentum devido: à diferença de pressão estática, à viscosidade molecular e à dilatação do volume fluido. O último termo do lado direito corresponde à produção de momentum devido ao empuxo.

Para descrever o processo de mistura é necessária a realização do transporte das espécies químicas.

O transporte das espécies químicas é representado neste trabalho com o transporte de suas respectivas frações mássicas, representados pela variável Y_k , onde o índice k refere-se à espécie k . A equação de transporte em questão é dada por:

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \frac{\partial \rho Y_k u_j}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho D_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_j} \right) + \dot{\omega}_k, \quad k = 1, \dots, K \quad (4)$$

onde, D_k é o coeficiente de difusão mássica da espécie k , $\dot{\omega}_k$ é a taxa volumétrica de geração, ou consumo, da espécie química k e K é o número total de espécies químicas na reação. O

termo fonte da eq.(4) é o responsável pela representação do consumo de reagentes e surgimento de produtos de reação de um processo de combustão. Os demais termos desta equação são a taxa de variação temporal, fluxo líquido devido ao transporte advectivo e fluxo líquido devido ao transporte molecular difusivo da massa da espécie k .

A equação da energia é representada aqui pela equação da entalpia absoluta específica da mistura (h). Nas condições de simulação do presente trabalho, os efeitos relacionados a escoamentos de alta velocidade (compressibilidade) são desprezados, como também, os efeitos de dissipação viscosa de energia e radiação. Assim, esta equação é escrita como:

$$\frac{\partial \rho h}{\partial t} + \frac{\partial \rho h u_j}{\partial x_j} = + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\frac{\mu}{\sigma_h} \frac{\partial h}{\partial x_j} + \mu \left(\frac{1}{Sc_k} - \frac{1}{\sigma_h} \right) h_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_j} \right], \quad (5)$$

onde h é dada por:

$$h = \sum_{k=1}^K Y_k h_k, \quad (6)$$

onde, h_k corresponde à entalpia absoluta específica da espécie k , que pode ser escrita como:

$$h_k = h_k^0 + \int_{T_0}^T c_{p,k} dT, \quad (7)$$

em que, h_k^0 corresponde a entalpia de formação da espécie k , calculada à temperatura T_0 e $c_{p,k}$ representa o calor específico sensível à pressão constante da espécie k , Sc_k é o número de Schmidt associado à espécie k que corresponde à razão entre as taxas de quantidade de movimento e massa transportados por difusão, dado por:

$$Sc_k = \frac{\mu}{\rho D_k}, \quad (8)$$

σ_h corresponde à razão entre as taxas de quantidade de movimento e energia térmica transportados, número de Prandtl, dado por:

$$\sigma_h = \frac{c_p \mu}{\lambda}. \quad (9)$$

Nesta equação, c_p representa o calor específico sensível à pressão constante da mistura e λ é a condutividade térmica da mistura. Considerando o número de Lewis para a espécie química k , (Le_k),

$$Le_k = \frac{\lambda}{\rho c_p D_k}, \quad (10)$$

e um único coeficiente de difusão mássica para todas as espécies químicas ($D_k = D$ para $k = 1, \dots, N$, onde N é o número de espécies na mistura) a equação da entalpia absoluta pode ser reescrita como:

$$\frac{\partial \rho h}{\partial t} + \frac{\partial \rho h u_j}{\partial x_j} = + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\frac{\mu}{\sigma_h} \frac{\partial h}{\partial x_j} + \mu \left(\frac{1}{Le} - 1 \right) h_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_j} \right]. \quad (11)$$

Admitindo-se o Le com valor unitário a equação em questão é simplificada para:

$$\frac{\partial \rho h}{\partial t} + \frac{\partial \rho h u_j}{\partial x_j} = + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\frac{\mu}{\sigma_h} \frac{\partial h}{\partial x_j} \right], \quad (12)$$

onde, os termos desta equação, da esquerda para direita, são a taxa de variação temporal, fluxo líquido devido ao transporte advectivo e fluxo líquido devido ao transporte molecular difusivo da entalpia específica da mistura. Observando esta equação, nota-se que a entalpia absoluta é um escalar conservativo.

4.2 MODELO DE TURBULÊNCIA

O modelo de turbulência utilizado no desenvolvimento deste estudo foi o $k-\varepsilon$ Padrão. A opção por este modelo baseou-se nos critérios:

- Modelo consolidado,
- Baixo custo de processamento computacional, e
- Robustez.

O critério de baixo custo de processamento computacional foi enfatizado, pois no desenvolvimento deste estudo maior atenção foi dada aos processos envolvidos no transporte do spray, que aumentam a demanda por processamento computacional. Para a modelagem dos processos envolvidos na dinâmica do spray foi necessária a seleção de um modelo robusto o suficiente para suportar os efeitos do acoplamento entre as duas fases. Assim, um modelo computacional robusto, bem validado e com baixo custo de processamento permite melhores condições para se estudar os fenômenos envolvidos no transporte de spray.

O modelo $k-\varepsilon$ Padrão baseia-se na média temporal das equações envolvidas na modelagem do escoamento de interesse. Para escoamentos com massa específica constante esta média temporal é feita utilizando-se a decomposição de Reynolds. Na decomposição de Reynolds as variáveis instantâneas são decompostas na soma de seu valor médio e sua flutuação turbulenta conforme mostra a Eq. (13), para a variável ψ .

$$\psi = \bar{\psi} + \psi' , \quad (13)$$

onde, $\bar{\psi}$ corresponde ao valor médio de ψ , e ψ' a sua flutuação turbulenta. Após esta decomposição, é feita a média temporal das equações governantes do escoamento reativo (Eqs. (1), (2), (4), e (12)) obtendo-se assim as equações médias baseadas na decomposição de Reynolds, ou RANS. Entretanto, como discutido por Versteeg e Malalasekera (2007) e Jones e Whitelaw (1982) a utilização desta forma de decomposição em escoamentos turbulentos com massa específica variável acarreta no aparecimento de termos relacionados à flutuação de massa específica nas equações. Para evitar esse problema é sugerida a utilização da decomposição de Favre que é dada por:

$$\psi = \tilde{\psi} + \psi'' = \frac{\overline{\rho\psi}}{\bar{\rho}} + \psi'', \quad (14)$$

$$\tilde{\psi} = \frac{\overline{\rho\psi}}{\bar{\rho}}. \quad (15)$$

Tendo em vista o objetivo deste trabalho em realizar simulações de chamas de spray, a decomposição de Favre foi utilizada para deduzir as equações das propriedades médias do escoamento. Ao aplicar esta decomposição ponderada pela densidade nas equações instantâneas que governam o escoamento reativo, e posteriormente fazendo a média temporal, chega-se a:

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i}{\partial x_i} = 0, \quad (16)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j}{\partial x_j} = - \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial (\tilde{\tau}_{ij} - \bar{\rho} \widetilde{u_i u_j})}{\partial x_j} + \bar{\rho} g_i, \quad (17)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Y}_k}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Y}_k \tilde{u}_j}{\partial x_j} = + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho D_k \frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial x_j} \right) + \tilde{\omega}_k, \quad (18)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{h}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{h} \tilde{u}_j}{\partial x_j} = + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu_t}{\sigma_t} \frac{\partial \tilde{h}}{\partial x_j} \right), \quad (19)$$

onde, $\tilde{\tau}_{ij}$ corresponde ao tensor das tensões viscosas do escoamento médio, $\bar{\rho} \widetilde{u_i u_j}$ é o tensor das tensões turbulentas, ou o tensor de Reynolds e, σ_t é o número de Prandtl turbulento que, neste trabalho, tem o valor de 0,85. O tensor das tensões viscosas do escoamento médio pode ser dado por:

$$\tilde{\tau}_{ij} = 2\mu \tilde{S}_{ij} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \left(\mu \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \right). \quad (20)$$

Os modelos de turbulência baseados na abordagem RANS têm por função a modelagem do tensor de Reynolds. O modelo $k-\varepsilon$ Padrão assume que há uma analogia entre esse tensor e o tensor das tensões viscosas do escoamento médio. Esta analogia é dada pela hipótese de Boussinesq que define o tensor de Reynolds como:

$$-\bar{\rho} \widetilde{u_i u_j} = 2\mu_t \tilde{S}_{ij} - \frac{2}{3} \bar{\rho} k \delta_{ij}, \quad (21)$$

onde, μ_t é a viscosidade turbulenta e k é a energia cinética turbulenta dada por:

$$k = \frac{1}{2} (\overline{u''_i u''_i}). \quad (22)$$

Pope (2000) destaca que o modelo k - ε Padrão consiste na modelagem da viscosidade turbulenta da seguinte forma:

$$\mu_t = \bar{\rho} C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon}, \quad (23)$$

onde, C_μ é uma constante de ajuste deste modelo de turbulência, com o valor de 0,09, e ε é a taxa de dissipação de energia cinética turbulenta. O modelo k - ε Padrão focaliza-se nos mecanismos que afetam a energia cinética turbulenta do escoamento (Versteeg e Malalasekera, 2007). Nesse sentido esse modelo propõe o cálculo do transporte da energia cinética turbulenta (k) e de sua taxa de dissipação (ε).

$$\frac{\partial \bar{\rho} k}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} k \tilde{u}_j}{\partial x_j} = + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu_t}{\sigma_k} \frac{\partial k}{\partial x_j} \right) + 2\mu_t \tilde{S}_{ij} \cdot \tilde{S}_{ij} - \bar{\rho} \varepsilon, \quad (24)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \varepsilon}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \varepsilon \tilde{u}_j}{\partial x_j} = + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right) + C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k} 2\mu_t \tilde{S}_{ij} \cdot \tilde{S}_{ij} - C_{2\varepsilon} \bar{\rho} \frac{\varepsilon^2}{k}, \quad (25)$$

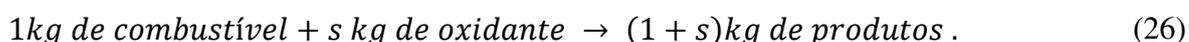
onde, σ_k , σ_ε , $C_{1\varepsilon}$, $C_{2\varepsilon}$ são constantes de ajustes que neste modelo de turbulência têm os valores de 1,00, 1,30, 1,44 e 1,92, respectivamente. Na Eq. (24) os termos partindo da esquerda correspondem: à taxa de variação temporal, ao fluxo líquido devido ao transporte advectivo, ao fluxo líquido devido ao transporte molecular difusivo, à taxa de produção e à taxa de dissipação da energia cinética turbulenta. Os termos da Eq.(25) são análogos aos da Eq. (24), porém aplicados a ε .

4.3 MODELO DE COMBUSTÃO

As reações de combustão são fortemente acopladas com os demais processos envolvidos em um escoamento reativo. Como resultado direto dessas reações encontram-se a geração de calor no escoamento e a alteração na composição química da mistura. A implicação deste resultado nas equações governantes do escoamento se resume à inclusão de termos fontes nas equações de conservação de energia e de espécies químicas, como também, na alteração de propriedades termodinâmicas e de transporte do fluido.

Para escoamentos turbulentos que realizam algum processo de média ou filtragem surge a problemática discutida por Jones e Whitelaw (1982). Esses autores ressaltam a importância da modelagem das flutuações turbulentas para a determinação dos termos fontes das equações de conservação das espécies químicas para casos de escoamentos com reações químicas. Uma das formas para se solucionar esta problemática é com a definição da fração de mistura. A utilidade da fração de mistura é a de que ela pode ser usada para gerar uma equação de conservação de espécies químicas sem termos fonte (Turns, 2000).

A definição da fração de mistura originalmente foi feita para casos onde apenas uma única reação global, estequiométrica e infinitamente rápida fosse considerada. A Eq. (26) apresenta uma equação global genérica para a definição da fração de mistura.



Admitindo que a equação de reação global genérica ocorra em quantidades estequiométricas das espécies envolvidas, a razão estequiométrica de oxidante/combustível em massa é dada por s . Nesse caso, tem-se que a taxa de consumo de combustível ($\dot{\omega}_f$) em relação à taxa de consumo de oxidante ($\dot{\omega}_{ox}$) pode ser dada por:

$$\dot{\omega}_f = \frac{1}{s} \dot{\omega}_{ox} . \quad (27)$$

Baseando-se na Eq. (4), pode-se escrever as equações das frações mássicas para o combustível e para o oxidante como:

$$\frac{\partial \rho Y_f}{\partial t} + \frac{\partial \rho Y_f u_j}{\partial x_j} = + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho D_f \frac{\partial Y_f}{\partial x_j} \right) + \dot{\omega}_f , \quad (28)$$

$$\frac{\partial \rho Y_{ox}}{\partial t} + \frac{\partial \rho Y_{ox} u_j}{\partial x_j} = + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho D_{ox} \frac{\partial Y_{ox}}{\partial x_j} \right) + \dot{\omega}_{ox} . \quad (29)$$

Definindo a variável φ como:

$$\varphi = s Y_f - Y_{ox} , \quad (30)$$

e admitindo que os coeficientes de difusão mássica para o combustível e para o oxidante são iguais ($\rho D_f = \rho D_{ox} = \rho D = \Gamma_\varphi$). Ao de subtrair a Eq. (29) da Eq. (28), chega-se a equação:

$$\frac{\partial \rho \varphi}{\partial t} + \frac{\partial \rho \varphi u_j}{\partial x_j} = + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\Gamma_\varphi \frac{\partial \varphi}{\partial x_j} \right) . \quad (31)$$

Turns (2000) define φ como um escalar conservativo, pois sua equação de transporte não possui termo fonte. Ao normalizar esse escalar obtem-se então a fração de mistura:

$$f = \frac{\varphi - \varphi_0}{\varphi_1 - \varphi_0} = \frac{(sY_f - Y_{ox}) - (sY_f - Y_{ox})_0}{(sY_f - Y_{ox})_1 - (sY_f - Y_{ox})_0}, \quad (32)$$

onde, o subscrito $(.)_1$ refere-se a um ponto do escoamento onde a fração mássica de combustível é máxima e o subscrito $(.)_0$ é associado a um ponto onde a presença de oxidante é máxima. Desse modo, partindo-se da Eq. (31) a equação de transporte para a fração de mistura pode ser dada por:

$$\frac{\partial \rho f}{\partial t} + \frac{\partial \rho f u_j}{\partial x_j} = + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\Gamma_f \frac{\partial f}{\partial x_j} \right). \quad (33)$$

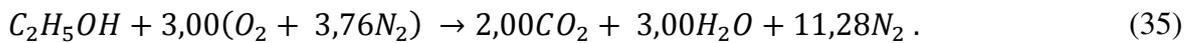
Ao se fazer a sua média temporal, com a utilização da decomposição de Favre para a modelagem de escoamentos turbulentos, chega-se em:

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{f}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{f} \tilde{u}_j}{\partial x_j} = + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\Gamma_f \frac{\partial \tilde{f}}{\partial x_j} \right). \quad (34)$$

4.3.1 MODELO FOLHA DE CHAMA

Versteeg e Malalasekera (2007) consideram que, em estudos cujo interesse se restringe à compreensão global do processo de combustão e à concentração final das espécies químicas predominantes, a simplificação por uma única reação global pode ser aplicada. Tendo em vista os objetivos deste trabalho e os tipos dados experimentais utilizados como base de comparação para os resultados das simulações, foi feita a opção por se implementar neste trabalho um modelo simplificado de uma única reação global, o modelo de folha de chama (Turns, 2000).

O modelo de folha de chama considera que a reação global da oxidação do combustível de interesse é infinitamente rápida e ocorre em proporção estequiométrica. Assim sendo, para a determinação das características desse modelo é necessária a definição da equação de reação global do combustível de interesse. Para ilustrar a formulação e os resultados fornecidos pelo modelo de folha de chama é apresentada a reação de combustão estequiométrica do etanol, combustível de principal interesse neste trabalho.



onde, os coeficientes que multiplicam as fórmulas químicas correspondem, respectivamente, ao seu número de moles na reação. Para a determinação da razão estequiométrica de oxidante/combustível em massa (s), utilizada na Eq. (26) é necessário o conhecimento da massa molar do etanol (C_2H_5OH) e do oxigênio (O_2) que são dadas respectivamente por 46,0 kg/kmol e 32,0 kg/kmol. Desse modo, s pode ser dada por:

$$s = \frac{n_{O_2} Mw_{O_2}}{n_{C_2H_5OH} Mw_{C_2H_5OH}} = \frac{3,00 \times 32,0}{1,00 \times 46,0} = 2,09 , \quad (36)$$

onde, n_k é o número de moles da espécie k e Mw_k é a massa molar da espécie k .

O modelo de folha de chama assume que as reações químicas somente ocorrem quando a mistura é estequiométrica, assim quando esta proporção é atingida no escoamento, não há a presença simultânea de combustível e de oxidante. Além disso, quando a fração de mistura é maior que o seu valor na proporção estequiométrica a mistura contém apenas combustível e produtos. Reciprocamente, quando a fração de mistura é menor que seu valor estequiométrico há, apenas, oxidante e produtos. De acordo com esta definição a equação (32) pode ser reescrita da seguinte forma:

$$f = \frac{(sY_f - Y_{ox}) - (-Y_{ox})_0}{(sY_f)_1 - (-Y_{ox})_0} = \frac{sY_f - Y_{ox} + Y_{ox0}}{sY_{f1} + Y_{ox0}} \quad (37)$$

A fração de mistura estequiométrica, f_{st} , é definida por:

$$f_{st} = \frac{Y_{ox0}}{sY_{f1} + Y_{ox0}}. \quad (38)$$

Para a região de fração de mistura menor que seu valor estequiométrico tem-se:

$$f = \frac{-Y_{ox} + Y_{ox0}}{sY_{f1} + Y_{ox0}}, \quad (39)$$

e onde a fração de mistura é maior que o seu valor na proporção estequiométrica:

$$f = \frac{sY_f + Y_{ox0}}{sY_{f1} + Y_{ox0}}. \quad (40)$$

Com a substituição dos valores relacionados à reação de interesse, pode ser montada uma tabela que relaciona a fração mássica das espécies envolvidas na reação com a fração de mistura. No presente trabalho, as gotículas, quando evaporam, injetam combustível nos volumes de controle que percorrem e a combustão ocorre somente na fase gasosa. Nesse sentido a maior fração mássica que pode aparecer em uma célula é a de valor unitário. No combustor estudado a entrada de ar auxiliar é composta de ar puro, assim $Y_{ox0} = 0,233$.

Portanto, com os valores apresentados para a reação global estequiométrica de etanol, podem-se obter as curvas mostradas na Figura 14:

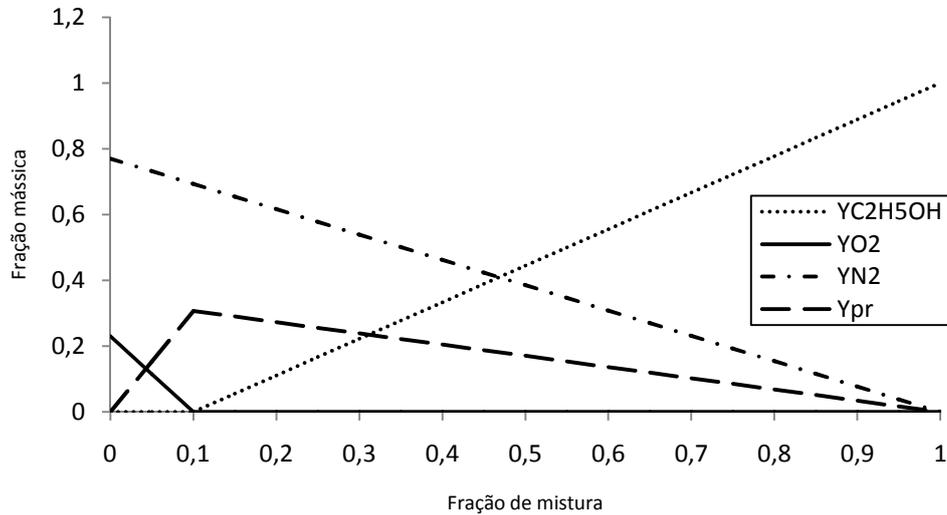


Figura 14: Fração mássica das espécies em função da fração de mistura.

A temperatura da mistura se relaciona através da entalpia absoluta da seguinte forma:

$$T = \frac{h - \sum_k [Y_k (h_k^0 - c_{p,k} T_0)]}{\sum_k Y_k c_{p,k}}, \quad (41)$$

onde, T é a temperatura da mistura e $c_{p,k}$ é o calor específico sensível da espécie k . No caso de uma reação adiabática, a temperatura se comporta em relação à fração de mistura conforme a curva apresentada na

Figura 15.

Ao normalizar-se a Eq. (12) com os valores máximos e mínimos da entalpia total do escoamento, chega-se em:

$$h^* = \frac{h - h_{ar,0}}{h_{f,1} - h_{ar,0}}. \quad (42)$$

Substituindo esta entalpia normalizada na Eq. (12) chega-se que a equação de transporte resultante é semelhante à equação de transporte da fração de mistura e assim, escreve-se a relação:

$$f = h^* = \frac{h - h_{ar,0}}{h_{f,1} - h_{ar,0}}. \quad (43)$$

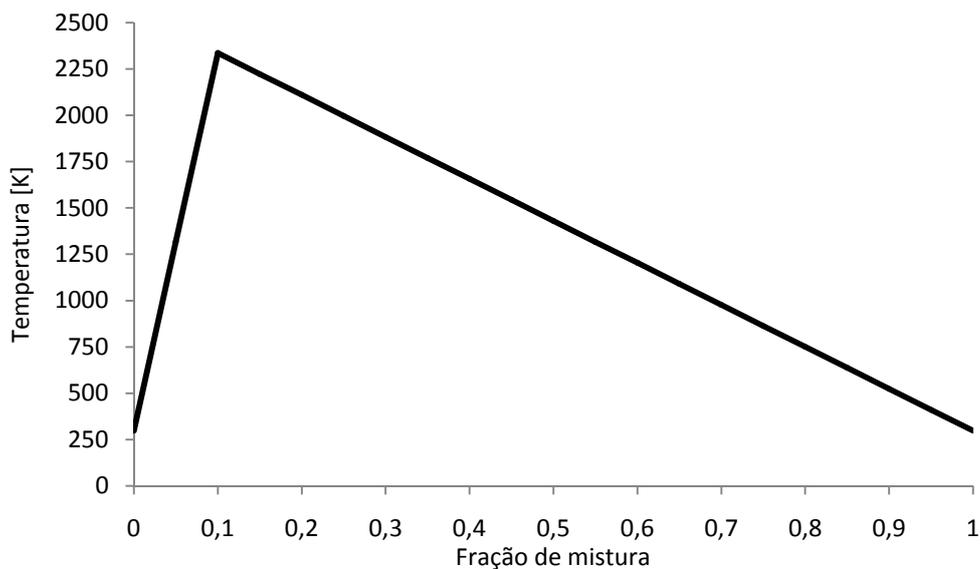


Figura 15: Temperatura da mistura em função da fração de mistura.

Nesse sentido a massa específica pode ser escrita em função da temperatura. A massa específica da mistura pode ser obtida através da equação dos gases perfeitos, a qual é escrita como:

$$\rho = \frac{p}{R_u T \sum_k \frac{Y_k}{MW_k}}, \quad (44)$$

onde, p é a pressão, R_u é constante universal dos gases perfeitos.

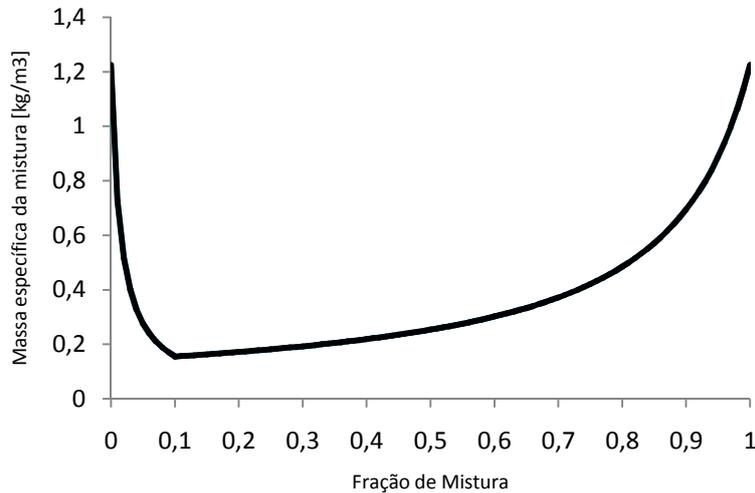


Figura 16: Massa específica da mistura em função da fração de mistura.

Portanto, no modelo de folha de chama, apenas com o transporte da fração de mistura, é definida a composição da mistura, como também é feita a representação da reação de combustão, que determina a temperatura e a massa específica da fase gasosa. Entretanto, na formulação deste modelo, a reação é considerada adiabática, o que não permite a representação do fenômeno de resfriamento evaporativo do spray. Deste modo, para que o resfriamento evaporativo pudesse ser representado foi feita uma adaptação no modelo folha de chama para considerar a redução de entalpia sensível do escoamento causada pela evaporação das gotículas.

A adaptação do modelo de folha de chama original foi feita com a consideração que a temperatura e massa específica da mistura gasosa seriam dependentes da fração de mistura e da entalpia. Com a representação do resfriamento evaporativo a aproximação apresentada na equação (43) foi invalidada, pois tanto a fração de mistura e a entalpia deixaram de serem escalares conservados. Para a modelagem do spray, a fase dispersante foi acoplada à fase líquida através da adição de termos fonte em suas equações de transporte (item 4.4.4), o que

tornou a fração de mistura e a entalpia escalares não conservados. Nesta adaptação as frações mássicas das espécies envolvidas na reação continuaram a ser dependentes apenas da fração de mistura, da mesma forma que no modelo original. Nesse sentido, não houve alteração da reação química devido ao resfriamento evaporativo.

Com a adaptação proposta, os valores de temperatura e massa específica da fase dispersante foram definidos entre duas condições limitantes do escoamento, a condição adiabática e a em que um máximo de entalpia sensível é retirado do escoamento. Para a definição da condição limitante não adiabática foi feita a hipótese de que toda a massa de combustível presente na reação foi proveniente da evaporação da fase líquida. Tendo em vista que a reação de combustão é infinitamente rápida e ocorre quando a fração de mistura atinge seu valor estequiométrico no modelo de folha de chama, a condição limitante não adiabática foi empregada para este valor de fração de mistura. Na adaptação proposta a reação química não foi alterada em relação ao caso adiabático, assim a temperatura pode ser calculada através da equação (41). Entretanto, nesse caso a entalpia absoluta da mistura foi calculada segundo a equação (45).

$$h = \sum_{k=1}^K h_k - Y_{f,st} \left[(h_{fl} + h_{fg}) + \left(\int_{T_{ref}}^T c_p dT - \int_{T_{ref}}^{T_l} c_p dT \right) \right], \quad (45)$$

em que, $Y_{f,st}$ corresponde à fração mássica de combustível presente na mistura em proporção estequiométrica, h_{fl} corresponde à entalpia de formação do líquido e h_{fg} corresponde à entalpia específica latente de vaporização do combustível. Na equação (45) foi considerado que, quando a fração de mistura atingiu seu valor estequiométrico, toda a massa de combustível presente na reação foi proveniente da evaporação de uma massa de combustível líquido a 298 K, temperatura em que as gotículas foram injetadas no presente trabalho.

Ao considerar que as maiores taxas de evaporação ocorrem nas regiões onde a diferença de temperatura entre as fases é maior, na adaptação proposta os efeitos do resfriamento evaporativo sobre a chama nas regiões em que a fase gasosa é composta apenas por combustível ou oxidante foram ignorados. Assim, nos valores extremos da fração de mistura os valores da temperatura foram os mesmos para o caso adiabático.

Com a definição desses três valores para a temperatura os valores intermediários de temperatura em função da fração de mistura para o caso limitante não adiabático foram obtidos através de interpolações lineares desses valores. Dessa forma, foi possível definir as curvas de temperatura da mistura para a reação adiabática e para a não adiabática, as quais são apresentadas na Figura 17.

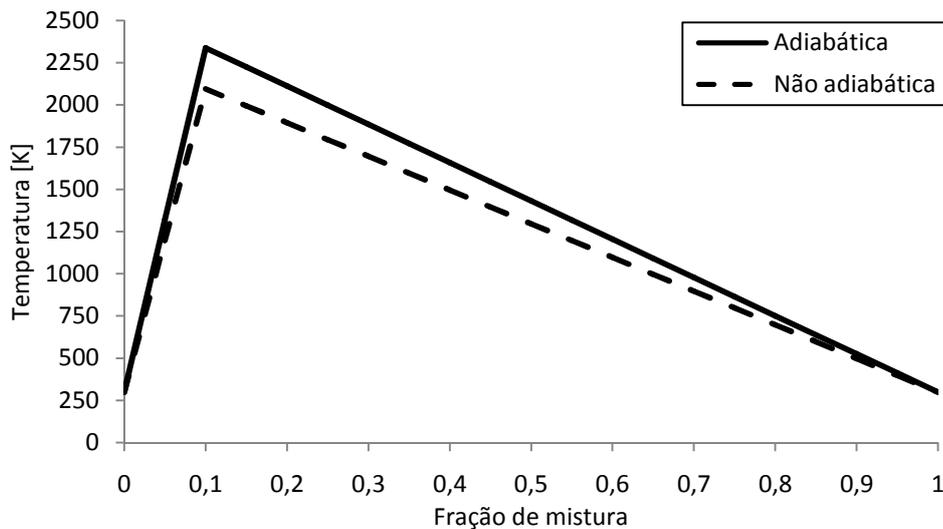


Figura 17: Temperatura da mistura em função da fração de mistura para a reação adiabática e a não adiabática.

Nesse modelo de folha de chama adaptado, os valores da temperatura e massa específica em condições intermediárias às curvas limitantes foram aproximados por interpolações lineares entre os valores dessas grandezas, em função da entalpia absoluta normalizada e da fração de mistura. A entalpia absoluta foi normalizada entre um valor máximo, definido na condição adiabática, e um valor mínimo, definido na condição não adiabática, para cada valor de fração

de mistura. Com esta adaptação foi possível contabilizar os efeitos do resfriamento evaporativo na modelagem do spray com o modelo de combustão de folha de chama.

4.3.2 TRATAMENTO ESTATÍSTICO DE REAÇÕES QUÍMICAS TURBULENTAS

Quando o processo de combustão se encontra no regime turbulento, deve-se ter cuidado com a representação dos efeitos da turbulência na modelagem das reações químicas. Como discutido na seção 2.2 há várias formas de se modelar a turbulência, porém é necessário que a modelagem da combustão esteja em concordância com as características do modelo de turbulência adotado.

As reações químicas são dependentes das quantidades instantâneas das concentrações das espécies químicas transportadas no escoamento, as quais são representadas nesse trabalho pela fração de mistura. Entretanto, neste trabalho foi selecionado um modelo de turbulência que considera, apenas, os valores das médias temporais das quantidades físicas transportadas no escoamento. Logo, não há concentrações instantâneas de fração de mistura disponíveis no cálculo do processo de combustão, apenas seus valores médios no domínio. Essa restrição imposta pelo modelo de turbulência selecionado impede que a formulação apresentada no item 4.3.1 seja usada, pois ela é baseada nos valores instantâneos da fração de mistura. Portanto, deve ser feito algum tratamento estatístico sobre essa formulação, baseada em médias temporais e em função da fração de mistura, para representar a combustão em regime turbulento.

Uma forma de se calcular este tratamento estatístico é com o uso de funções de densidade de probabilidade (PDF's). Com o uso de uma função PDF de uma variável ψ , a média de qualquer propriedade $q(\psi)$ que dependa desta variável pode ser feita como (Kuo, 1986):

$$\bar{q} = \int_{-\infty}^{\infty} q(\psi)P(\psi)d\psi, \quad (46)$$

onde $P(\psi)$ é a PDF da variável ψ . Para modelos em que é utilizada a média de Favre para as quantidades físicas transportadas, é apresentado em Jones e Whitelaw (1982) que o cálculo dessa média pode ser feito como:

$$\tilde{q} = \int_{-\infty}^{\infty} q(\psi) \tilde{P}(\psi) d\psi, \quad (47)$$

onde, $\tilde{P}(\psi)$ se relaciona com a PDF da média temporal da propriedade ψ através da expressão:

$$\tilde{P}(\psi) = \frac{\rho(\psi)}{\bar{\rho}} P(\psi). \quad (48)$$

As formas das funções de densidade de probabilidade variam para diversos tipos de escoamento e podem ser calculadas através de diferentes métodos. Dentre esses métodos destacam-se os métodos das PDF's presumidas, como, por exemplo, a função do tipo β e a função Gaussiana limitada, e, também, o método das PDF's transportadas.

O método das PDF's transportadas é mais elaborado que os das PDF's presumidas, em que equações de transporte são resolvidas para a determinação das PDF's do escoamento. Entretanto, apesar de ser mais exato, o método das PDF's transportadas exige um custo de processamento elevado (Versteeg e Malalasekera, 2007). Por outro lado, os métodos das funções de densidade de probabilidade dos tipos β e Gaussiana limitada se apresentam como alternativas de baixo custo de processamento para a modelagem de processos de combustão turbulenta.

As funções do tipo PDF presumida permitem aproximações razoáveis para a estimativa de temperatura e das espécies de maior concentração no escoamento. Jones e Whitelaw (1982)

ao revisarem algumas dessas funções presumidas observam que a função beta produziu os resultados com maior exatidão, juntamente com a função Gaussiana limitada. A β -PDF é considerada por Versteeg e Malalasekera (2007) como a mais utilizada atualmente por programadores e por códigos comerciais de CFD (*Computational Fluid Dynamics*). Sua facilidade de implementação foi uma das principais razões para ela ser utilizada no código computacional desenvolvido neste trabalho. A equação (49) ilustra a expressão utilizada para o cálculo da função β -PDF para a fração de mistura (Chen et al., 1994).

$$\tilde{P}(\psi) = \frac{f^{\alpha-1}(1-f)^{\beta-1}}{\int_0^1 f^{\alpha-1}(1-f)^{\beta-1}} , \text{ ou } \frac{f^{\alpha-1}(1-f)^{\beta-1}\Gamma(\alpha+\beta)}{\Gamma(\alpha)\Gamma(\beta)} , \quad (49)$$

onde, $\Gamma(\psi)$ é a função gama, a definição desta função pode ser encontrada em Pope (2000), enquanto que:

$$\alpha = \tilde{f} \left[\frac{\tilde{f}(1-\tilde{f})}{\tilde{f}''^2} \right] , \quad (50)$$

$$\beta = \frac{(1-\tilde{f})}{\tilde{f}} \alpha . \quad (51)$$

A variável \tilde{f}''^2 corresponde à média de Favre da variância da fração de mistura. Segundo Janicka e Kollmann (1979) e Jones e Whitelaw (1982) esta propriedade pode ser transportada através da seguinte equação:

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{f}''^2}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{f}''^2 \tilde{u}_j}{\partial x_j} = + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu_t}{\sigma_t} \frac{\partial \tilde{f}''^2}{\partial x_j} \right) + C_g \mu_t \left(\frac{\partial \tilde{f}}{\partial x_j} \right)^2 - C_d \frac{\bar{\rho} \varepsilon}{k} \tilde{f}''^2 ,$$

(52)

C_g e C_d são parâmetros de ajuste da equação e têm, neste trabalho presente, os valores de 2,0 e 2,8, respectivamente, os quais foram os mesmos valores de Jones e Whitelaw (1982) e Fluent (2006), respectivamente. No presente trabalho, essa equação de transporte da variância da fração de mistura, comumente utilizada para simulação de escoamentos monofásicos, foi adaptada para contabilizar os efeitos do escoamento bifásico, o que será apresentado na seção 4.4.4. A opção em usar essa equação foi feita por ter apresentado bons resultados para casos semelhantes em estudos apresentados na literatura como, por exemplo: Hollman e Gutheil (1996), Hollman e Gutheil (1998), Düwel et al. (2007), Chrigui et al. (2010a) e Chrigui et al. (2010b).

Até o momento foi apresentada a forma de se fazer a média de quantidades físicas dependentes de uma única variável. Essa abordagem se aplica para modelagens de chamas monofásicas gasosas, sendo a variável independente a fração de mistura. No entanto, como mencionado no item 4.3.1, o modelo de spray utilizado neste trabalho considerou a representação do fenômeno de resfriamento evaporativo causado pela evaporação das gotículas. Assim, a temperatura e a massa específica da fase gasosa passaram a depender não só da fração de mistura, mas também da entalpia transportada no escoamento. Nesse sentido a função de densidade de probabilidade teve que ser redefinida para considerar este comportamento. A PDF que descreve a média de uma quantidade dependente de mais de uma variável independente é escrita como:

$$\tilde{q} = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} q(\psi, \vartheta) \tilde{P}(\psi, \vartheta) d\psi d\vartheta, \quad (53)$$

onde, ϑ é uma variável genérica. Nessa expressão, $\tilde{P}(\psi, \vartheta)$ é a função PDF dependente de duas variáveis, que pode ser chamada de *joint* PDF de ψ e ϑ . Especificamente, no modelo desenvolvido neste trabalho foi utilizada uma função *joint* PDF para a fração de mistura e entalpia para considerar o resfriamento evaporativo. Para simplificar os cálculos dessa função, foi admitido que a fração de mistura e a entalpia são variáveis estatisticamente independentes. Com esta hipótese a *joint* PDF foi aproximada pela PDF condicional para a entalpia, que pode ser escrita como:

$$\tilde{P}(f, h) = \tilde{P}(f|h) \cdot \tilde{P}(h) = \tilde{P}(f) \cdot \tilde{P}(h), \quad (54)$$

onde, $\tilde{P}(f)$ foi aproximada pela β -PDF dada pela equação (49) e $\tilde{P}(h)$ foi aproximada por uma função de delta de Dirac, dada por:

$$\tilde{P}(h) = \delta(h - \tilde{h}). \quad (55)$$

Para tornar o cálculo das PDF's mais rápido neste trabalho foi feita a pré-integração dessas funções das duas condições limitantes definidas no item 4.3.1 para a consideração do resfriamento evaporativo.

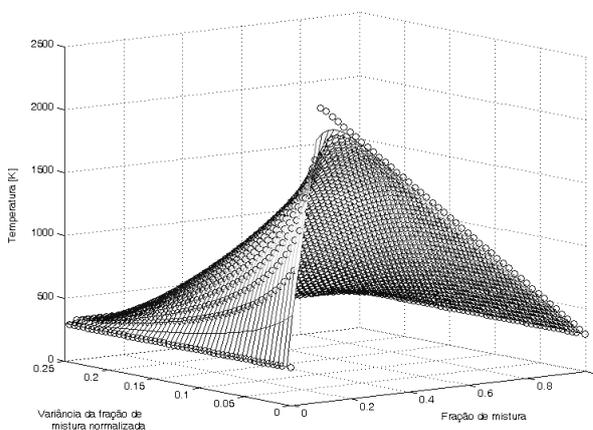


Figura 18: β -PDF para a condição adiabática.

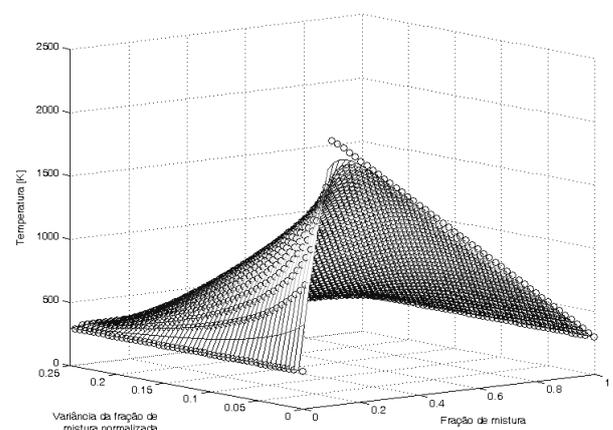


Figura 19: β -PDF para a condição não adiabática

A Figura 18 apresenta a PDF pré-integrada para a condição limitante adiabática e a Figura 19 apresenta esta função para a condição limitante não adiabática. Para a construção dessas curvas foi necessária a definição da variância da fração de mistura normalizada, que varia entre os valores 0,0 e 0,25, e pode ser escrita como:

$$\widetilde{f}_n^{\prime 2} = 0.25 \frac{\widetilde{f}^{\prime 2}}{[\widetilde{f}(1 - \widetilde{f})]}. \quad (56)$$

Semelhantemente ao realizado para o modelo de folha de chama, os valores da temperatura e da massa específica da fase gasosa em condições intermediárias foram aproximados por interpolações lineares baseadas nos valores dessas grandezas nas curvas limitantes.

4.4 MODELAGEM DO SPRAY

Masri e Gounder (2010) em seu experimento buscaram reproduzir chamas em sprays diluídos, como é mencionado no capítulo 3. Ao analisar os dados experimentais desses autores, os quais foram utilizados neste trabalho, pôde-se obter um valor menor que $5,0 \times 10^{-4}$ para a fração volumétrica da fase líquida (α_p) ainda nas proximidades do injetor. Segundo a classificação feita em Chrigui (2005) essa fração volumétrica classifica o spray como diluído. Nesta classificação com a definição do número de Stokes (St), juntamente com a fração volumétrica de líquido no spray, é possível estimar a influência da presença das partículas na turbulência da fase gasosa. O número de Stokes corresponde à razão entre a escala de tempo de relaxação das partículas (τ_p) e a escala de tempo integral da turbulência da fase gasosa (T), o qual é apresentado pela eq. (57).

$$St = \frac{\tau_p}{T_t}, \quad (57)$$

onde,

$$\tau_p = \left(\frac{18\mu C_D Re_e}{\rho_l d_p^2 24} \right)^{-1}, \quad (58)$$

em que, d_p é o diâmetro de uma gotícula, ρ_l é a massa específica da fase líquida, C_D é o coeficiente de arrasto (dado pela eq.(63)) e Re_e corresponde ao número de Reynolds de escorregamento, o qual é escrito como:

$$Re_e = \frac{\rho d_p |\vec{u} - \vec{u}_p|}{\mu}, \quad (59)$$

onde, \vec{u} é o vetor da velocidade instantânea da fase gasosa e \vec{u}_p é o vetor de velocidade instantânea da gotícula.

A escala de tempo de relaxação da partícula corresponde ao intervalo de tempo em que uma gotícula com dimensões representativas do spray, no caso 20 μm segundo as medições experimentais, leva para que o seu escorregamento se anule e assim ela passe a ter as mesmas velocidades do escoamento que a circunda. A classificação feita por Chrigui (2005) baseia-se no tipo de acoplamento que ocorre entre as duas fases, os quais podem ser: em um único sentido (a fase dispersa não interfere na fase contínua), em dois sentidos (a fase dispersa interfere na fase contínua) e em quatro sentidos (além do acoplamento em dois sentidos há, também, a interação entre gotículas). A Figura 20 apresenta esta classificação na forma de um diagrama.

Com os dados experimentais provenientes de Masri e Gounder (2010) foi determinado que o número de Stokes integral de toda a chama foi de aproximadamente 0,20. Para a determinação desse valor a escala de tempo integral da turbulência T_t foi definida a partir da mesma aproximação utilizada para a determinação do comprimento de mistura de jatos circulares, conforme apresentado em Versteeg e Malasekera (2007), em que se equivale à 0,75% da metade do diâmetro do jato. De acordo com a classificação de Chrigui (2005), as gotículas devem influenciar a turbulência da fase gasosa intensificando a dissipação. Portanto, tendo em vista que há a interferência da turbulência da fase gasosa pela fase dispersa, foi utilizada a formulação de escoamento separado estocástico (SSF) para a modelagem do escoamento bifásico, pois ela considera essa interferência. Esta formulação baseia-se no modelo de gotículas discretas (DDM), o qual é descrito no item 2.4.2, juntamente com a descrição do SSF.

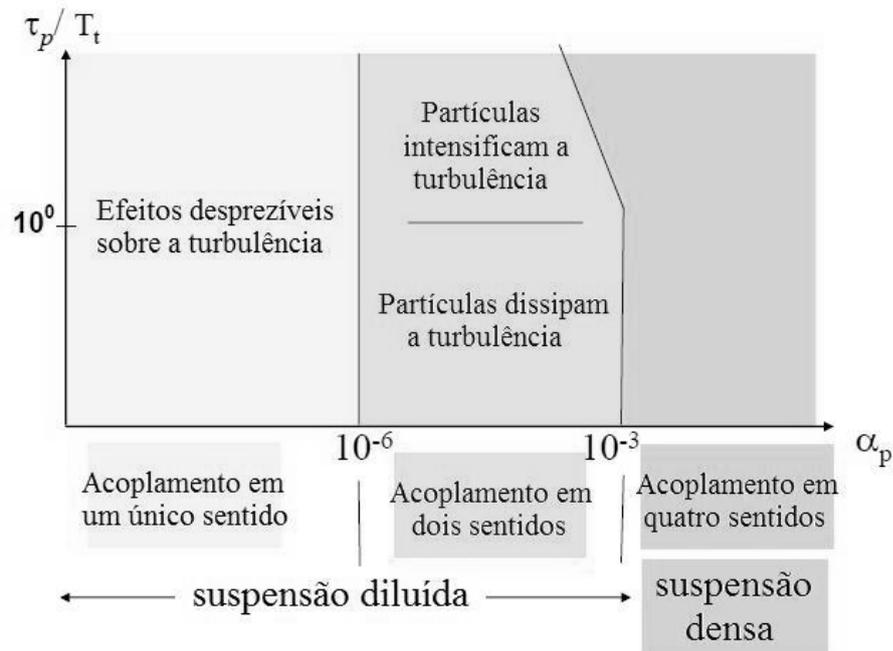


Figura 20: Classificação dos tipos de suspensão. Adaptado de Chrigui (2005).

4.4.1 MODELAGEM DO DESLOCAMENTO DE GOTÍCULAS

Na formulação SSF as gotículas são aproximadas por entidades discretas que caminham através do escoamento da fase dispersante através de equações Lagrangeanas. A posição de uma gotícula baseada nesta formulação pode ser encontrada com a integração da seguinte relação:

$$\frac{d\vec{x}_p}{dt} = \vec{u}_p, \quad (60)$$

onde, \vec{x}_p corresponde ao vetor deslocamento da gotícula, t é o tempo. A sua velocidade é obtida através da integração da equação da aceleração da gotícula. Esta equação provém da consideração de equilíbrio dinâmico de uma partícula. Uma forma convencional de se obter esta equação é considerando-se que a força resultante é a soma da força de arrasto aerodinâmica e a força causada pelo empuxo. Assim a equação da aceleração é escrita:

$$\frac{d\vec{u}_p}{dt} = \frac{3 C_D}{4 d_p} \left(\frac{\rho}{\rho_l} \right) (\vec{u} - \vec{u}_p) |\vec{u} - \vec{u}_p| + \frac{\vec{g}(\rho_l - \rho)}{\rho_l}, \quad (61)$$

onde, \vec{g} é a aceleração da gravidade. Com a definição do número de Reynolds de escorregamento a eq. (61) pode ser reescrita como:

$$\frac{d\vec{u}_p}{dt} = \frac{18\mu C_D Re_e}{d_p^2 \rho_l} (\vec{u} - \vec{u}_p) + \frac{\vec{g}(\rho_l - \rho)}{\rho_l}. \quad (62)$$

A formulação utilizada para a equação da aceleração e do coeficiente de arrasto despreza os efeitos de massa virtual, forças de sustentação provenientes de efeito Magnus e de efeito Saffman (Sirignano, 2010). Segundo Faeth (1983) esta aproximação é satisfatória para casos em que a densidade do líquido é superior à do gás e os gradientes de velocidade são baixos.

Neste trabalho, semelhante ao trabalho de Jones et al. (2011), o coeficiente de arrasto foi calculado com a formulação proposta por Yuen e Chen (1976) que ajusta a “curva padrão de arrasto” de esferas (Abramzon e Sirignano, 1989), para a consideração do fenômeno de evaporação para gotículas líquidas esféricas.

$$C_D = \left\{ \begin{array}{ll} \frac{24}{Re_e} \left(1 + \frac{Re_e^{2/3}}{6} \right) : 0 < Re_e < 1000 \\ 0.44 : & Re_e \geq 1000 \end{array} \right\}. \quad (63)$$

4.4.2 MODELAGEM DA EVAPORAÇÃO DE GOTÍCULAS

A evaporação de gotículas representa um fenômeno decisivo na preparação da mistura em dispositivos que utilizam a combustão de sprays. Entretanto, o problema de evaporação de gotas é um tema multidisciplinar desafiante. Ele pode envolver transferência de calor e de massa, dinâmica de fluidos e reações químicas (Sirignano, 2010).

No trabalho presente, para assegurar a descrição matemática do processo de evaporação foi necessária a adoção de algumas simplificações do fenômeno, as quais são listadas abaixo:

- Foi considerado o modelo de um único componente, assim a gotícula é composta apenas por combustível;

- As quantidades da fase gasosa foram assumidas como sendo uniformes na superfície da gotícula;
- Foi assumida a condição de equilíbrio de fases na interfase gás/líquido;
- O gás da fase gasosa não é solúvel na fase líquida;
- As reações químicas e a transferência de calor por radiação foram negligenciadas.

De forma geral, pode-se considerar que a modelagem da evaporação de gotículas baseia-se em três aspectos principais: a evolução da evaporação conforme a gotícula se desloca no escoamento, o comportamento da fase gasosa que a circunda, a interface gás/líquido e a dinâmica do líquido que a compõe. O comportamento da fase gasosa que circunda a gotícula é fornecido pelo cálculo da fase gasosa, porém os demais aspectos são apresentados detalhadamente neste tópico.

As aproximações da maneira como a evaporação das gotículas evoluiu dentro de um spray são classificadas em dois grandes grupos segundo Faeth (1983). O primeiro deles corresponde à aproximação por aquecimento transiente (*transient heat-up model*), a qual considera que a temperatura da gotícula se altera conforme ela caminha no escoamento. Neste caso, a taxa de transferência de massa é determinada pela diferença de concentração de vapor de combustível entre a superfície da gotícula e os seus arredores. Faeth (1983) considera que esta aproximação representa corretamente o comportamento de uma gotícula imersa em um spray, a qual não tem temperatura de bulbo úmido fixa. Segundo este autor, isso se deve às constantes alterações das propriedades da fase gasosa em seus arredores. A outra aproximação corresponde à de estágios, em que a gotícula se aquece gradualmente até atingir a temperatura de bulbo úmido, que se equivale à temperatura de ebulição do líquido a pressão ambiente. Enquanto esta temperatura não é atingida a gotícula não evapora. A evaporação na aproximação por estágios ocorre pela diferença de temperatura entre as fases a partir do momento em que a gotícula atinge a temperatura de ebulição, pois nessa aproximação a taxa

de evaporação, no período em que a gotícula se aquece, é considerada desprezível. Em ambas as aproximações os efeitos da convecção forçada são contabilizados com relações empíricas obtidas de estudos de gotas isoladas.

Faeth (1983) menciona que apesar de a aproximação por estágios facilitar os cálculos, a qualidade de seus resultados é questionável. Este autor descreve a situação de que, nesta aproximação as gotículas gastam a maior parte do seu tempo no núcleo frio do spray, onde as temperaturas do gás são relativamente baixas e a concentração de combustível é alta. Nessa região a estimativa da taxa de transferência de massa pela diferença de temperaturas, em comparação com o modelo de aquecimento transiente, não é tão boa.

Neste trabalho uma variação da aproximação por estágios é utilizada, a qual considera a transferência de massa no período em que a gotícula se aquece. Assim sendo, enquanto a gotícula se encontra com temperaturas mais baixas que a sua temperatura de ebulição à pressão ambiente, o potencial de evaporação é dado pela diferença de concentração de vapor de combustível. Porém, quando a gotícula atinge a temperatura de bulbo úmido ela passa a transferir massa pela diferença de temperatura entre as fases.

A modelagem do comportamento da interface gás/líquido determina as taxas de transferência de calor e massa para e da gotícula. Três formas principais para esta modelagem podem ser classificadas. A primeira delas considera as soluções analíticas de simplificações das equações de transporte de energia e massa para uma gotícula estacionária com o emprego de correções baseadas em dados empíricos para contabilizar os efeitos do movimento relativo entre as fases. A segunda considera o emprego da teoria de filme, utilizada por Abramzon e Sirignano (1989) e Apte et al. (2009). A terceira forma é através de equações de balanço na partícula. Essa forma é a mesma utilizada pelo programa computacional FLUENT® (Fluent, 2006). O presente trabalho emprega esta formulação para a interface gás/líquido, como será descrito em detalhes mais adiante.

Geralmente, a difusividade térmica da fase gasosa é maior que a da fase líquida, o que reflete num aquecimento mais demorado para a fase líquida do que para a fase gasosa. Muitas vezes, assim, a condição de regime quase-estático para a fase gasosa pode ser assumida, negligenciando as derivadas de tempo para esta fase, porém mantendo-as para a fase líquida. Esta hipótese é assumida neste trabalho.

Sirignano (2010) define seis tipos de formulações para se modelar a dinâmica do líquido.

Organizando-os de forma crescente com sua respectiva complexidade, são elas:

- Temperatura constante de gotículas;
- Condutividade líquida infinita;
- Aquecimento transitório esfericamente simétrico de gotícula;
- Condutividade efetiva;
- Modelo de vórtice de aquecimento de gotícula;
- Solução das equações de Navier-Stokes para o escoamento interno a gota.

A principal diferença entre essas formulações é o tratamento do aquecimento da fase líquida. Normalmente, este fenômeno é o que controla a taxa de evaporação das gotículas, especialmente quando imersas em gases com elevadas temperaturas, como o caso presente. Algumas dessas formulações correlacionam-se entre si, sendo que uma corresponde à outra em sua respectiva condição limitante.

Na formulação de temperatura constante, também conhecida como “lei de d^2 ” (em que o quadrado do diâmetro da gotícula decresce linearmente com o tempo) a temperatura do líquido permanece constante e igual à temperatura de ebulição à pressão ambiente. O modelo de condutividade infinita já é mais sofisticado, ao considerar a variação da temperatura com o tempo. Entretanto, a distribuição de temperaturas no interior da gota é uniforme. A terceira formulação, também chamada de condutividade limite, considera a variação da temperatura espacialmente, porém esta variação é esfericamente simétrica.

Os três primeiros modelos podem ser diretamente aplicados à situação em que não há movimento relativo entre as fases ou em que uma correlação baseada no Re_e pode ser aplicada para levar em conta as transferências de calor e de massa entre as fases por convecção. No entanto, o escoamento do líquido no interior da gotícula, a circulação interna, não é considerada nesses três primeiros modelos. A formulação da condutividade efetiva considera a circulação interna e o aquecimento convectivo interno de maneira *ad hoc*, ao propor a multiplicação da condutividade do líquido por um fator de ajuste, definido experimentalmente. Esse modelo, como também o de condutividade limite necessita da solução da equação de condução no interior da gota, o que é obtida através de métodos numéricos. Normalmente, para a solução da condução de calor no interior da gota é utilizado o método das diferenças finitas como feito por Abramzon e Sirignano (1989).

O modelo de vórtice descreve mais diretamente a situação física do escoamento interno à gotícula ao simular a circulação interna pela aproximação de dois vórtices, um em cada hemisfério da gotícula. As soluções das equações de Navier-Stokes são, em princípio, exatas no meio contínuo. Ambos os métodos, de vórtices e com a solução das equações de Navier-Stokes, necessitam da utilização de métodos numéricos para a sua solução.

Os quatro últimos modelos, que necessitam de métodos numéricos para a sua solução demandam maior consumo de processamento computacional para serem calculados. Nesse sentido, eles consomem muito tempo da simulação, o que os inviabiliza para a solução de sprays completos. Já os dois primeiros facilitam o cálculo de sprays completos, sendo comuns neste tipo de simulação (Faeth, 1983).

Neste estudo, o modelo de condutividade infinita foi escolhido como uma primeira aproximação para a modelagem do comportamento da fase líquida. Esta escolha foi feita em base dos resultados apresentados por Chirigui et al. (2009) e Rochaya (2007), os quais utilizaram esse mesmo modelo em suas simulações.

Considerando a escolha feita neste trabalho pela aproximação baseada em dois estágios e pelos modelos da interace gás/líquido e da dinâmica do líquido, a transferência de massa de uma gotícula pode ser escrita para o primeiro estágio como:

$$\frac{dm_p}{dt} = -N_l A_p M_{w_l}, \quad (64)$$

$$N_l = k_c (C_{l,s} - C_{l,\infty}), \quad (65)$$

$$C_{l,s} = \frac{p_{sat}(T_p)}{T_p R_u}, \quad (66)$$

$$C_{l,\infty} = X_l \frac{p}{T \cdot R_u}, \quad (67)$$

$$Sh = \frac{k_c d_p}{D_{l,m}} = 2,0 + 0,6 Re_e^{1/2} Sc^{1/3}, \quad (68)$$

onde, N_l é o fluxo molar de combustível, m_p é a massa da gotícula, T_p é a temperatura da gotícula, A_p é sua área superficial, M_{w_l} é a massa molecular do líquido, k_c é o coeficiente de transferência de massa, $C_{l,s}$ é a concentração do vapor do líquido na superfície da gotícula, $C_{l,\infty}$ é a concentração de vapor do líquido na fase gasosa, $p_{sat}(T_p)$ é a pressão de saturação do líquido em função de sua temperatura, X_l é a fração molar de vapor na fase gasosa, p é a pressão ambiente no gás, $D_{l,m}$ é o coeficiente de difusão binária do vapor no ar, Sc é o número de Schmidt e Sh é o número de Sherwood, proveniente da relação de Ranz-Marshall (Incropera e Dewitt, 2003).

Neste trabalho a pressão de saturação em função da temperatura é dada pela equação de Antoine (Reid et al., 1977), a qual é derivada da relação de Clausius-Clapeyron (Kuo, 1986 e Sirignano, 2010). A opção pelo uso da equação de Antoine foi feita pelo fato dela possibilitar boas aproximações com dados experimentais através do ajuste de seus parâmetros. Os parâmetros utilizados neste trabalho presente para o etanol foram os mesmos apresentados em Reid et al. (1977).

Esta formulação para a taxa de transferência mássica é válida enquanto a temperatura da fase líquida é menor que a temperatura de ebulição baseada na pressão ambiente da fase gasosa (T_{bp}). Nesse sentido, a equação que modela o aquecimento da gotícula nesse estágio é escrita como:

$$m_p c_p \frac{dT_p}{dt} = h A_p (T - T_p), \quad (69)$$

onde, c_p é o calor específico sensível do líquido, e nesta expressão h é o coeficiente de transferência de calor por convecção. Este coeficiente é obtido através da taxa de transferência de calor adimensional para a fase líquida, o número de Nusselt (Nu), que neste trabalho, semelhantemente ao Sh , é dado pela expressão de Ranz-Marshall (Incropera e Dewitt, 2003):

$$Nu = \frac{h d_p}{k_\infty} = 2,0 + 0,6 Re_e^{1/2} Pr^{1/3}, \quad (70)$$

onde, k_∞ é a condutividade térmica da fase gasosa, e Pr é o número de Prandtl já definido na seção 4.1. A expressão que representa a transferência de massa no segundo estágio de evaporação é obtida diretamente da expressão de transferência de calor para a fase líquida quando sua temperatura é constante e igual à T_{bp} . Nesse caso, o calor que entra na fase líquida

é transformado em calor latente, evaporando uma quantidade de massa proporcional ao calor específico latente do líquido. A eq.(71) ilustra esta expressão.

$$\frac{dm_p}{dt} h_{fg} = -hA_p(T - T_p), \quad (71)$$

Esta expressão pode ser representada diretamente como a taxa de redução do diâmetro da gotícula, tendo em vista que neste trabalho a massa específica da fase líquida é mantida constante, assim, ela pode ser reescrita como:

$$\frac{dd_p}{dt} = -\frac{2}{h_{fg}\rho_p} \left[\frac{Nu \cdot k_\infty}{d_p} (T - T_p) \right]. \quad (72)$$

Neste estágio, a formulação do Nu é alterada para uma expressão fornecida por Kuo (1986). Este novo Nu aplica-se para situações com taxa de evaporação elevada e altas temperaturas da fase gasosa,

$$Nu = \frac{\ln(1+B)}{B} (1 + 0.39Pr^{1/3}Re^{1/2}), \quad B = \frac{c_p}{h_{fg}} (T - T_p), \quad (73)$$

onde B é o número de Spalding (Abramzon e Sirignano, 1989).

4.4.3 INTERAÇÕES E QUEBRA DE GOTÍCULAS

O spray é considerado diluído neste trabalho, como mostrado no início da seção 4.4. Sob esta hipótese as colisões entre gotículas podem ser desprezadas e os efeitos de proximidade entre elas nas relações de transporte (transferências de calor e massa), como também na equação de

deslocamento, podem ser negligenciados. Isto significa que coeficientes de arrasto e correlações de convecção são implementados sem correções para casos onde houver gotas com grande proximidade entre si.

Nos experimentos apresentados em Masri e Gounder (2010), devido às características do injetor e do atomizador, não são observados filmes líquidos. Com esta observação pode-se supor que neste spray não ocorre a quebra de gotículas. Uma forma de se avaliar a quebra de gotículas é através da verificação do número de Weber (We). Este número corresponde à razão entre as forças viscosas e a forças de tensão superficial da partícula, ver Eq. (74). Conforme este número adimensional aumenta, a capacidade do campo de pressões, externo a gotícula, em deformá-la torna-se maior. Faeth (1983) menciona que quando o We atinge seu valor crítico sua tensão superficial aproxima-se de zero, sendo que nesse caso as deformações e quebras começam a ser importantes. Rochaya (2007) menciona que o número de Weber crítico para o etanol é próximo a 12 para as condições de um spray livre. Este número adimensional pode ser escrito como:

$$We = \frac{\rho_g d_p |\vec{u}_p - \vec{u}|^2}{2\sigma_{ts}}, \quad (74)$$

onde, σ_{st} corresponde à tensão superficial do líquido. Considerando os dados de Masri e Gounder (2010), apresentados na Figura 6, e negligenciando os efeitos das componentes radiais da velocidade, pode-se observar que a maior velocidade de uma gotícula é próxima de 35,0 m/s para as que têm diâmetros entre 40 μm e 50 μm . Admitindo a situação máxima em que uma gota com essa velocidade é lançada em ar parado, chega-se a um valor de escorregamento de 35,0 m/s. Segundo Reid et al. (1977) a tensão superficial do etanol a 298,0 K é de aproximadamente $20,8 \cdot 10^{-3}$ N/m. Dessa forma, o número de Weber máximo no escoamento é próximo de 1,5 que ainda se encontra muito abaixo do We crítico.

Portanto, nesse caso o fenômeno de quebra de gotículas pode ser desconsiderado. Quando o número de Weber é muito menor que 20, Kuo (1986) menciona que a forma das gotas é praticamente esférica. Nesse sentido, observa-se que a aproximação de gotas esféricas neste trabalho é uma hipótese razoável.

4.4.4 ACOPLAMENTO INTERFÁSICO

A interação da fase contínua com a fase dispersa é feita em ambos os sentidos neste trabalho. Os valores das quantidades da fase gasosa são calculados na posição de cada gotícula provendo, assim, as quantidades necessárias para a solução das equações de cada uma delas. Os valores dessas quantidades são atualizados a cada iteração das equações da fase dispersa. Dessa forma, a fase dispersa se acopla à fase gasosa.

A influência da fase dispersa na fase gasosa é contabilizada com a somatória das taxas de transferência de quantidade de movimento linear, massa, energia e fração de mistura de cada partícula enquanto elas atravessam um volume de controle. As somatórias das taxas dessas quantidades físicas são incluídas nas equações de transporte da fase contínua através de termos fontes. Nesse sentido as equações de transporte da fase dispersante (Eqs. (16), (17), (34) e (19)) são reescritas como:

$$\frac{\partial \bar{p}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{p} \tilde{u}_i}{\partial x_i} = \bar{S}_1, \quad (75)$$

$$\frac{\partial \bar{p} \tilde{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial \bar{p} \tilde{u}_i \tilde{u}_j}{\partial x_j} = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial (\bar{\tau}_{ij} - \bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j)}{\partial x_j} + \bar{\rho} g_i + \bar{S}_{ui}, \quad (76)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{f}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{f} \tilde{u}_j}{\partial x_j} = + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\Gamma_f \frac{\partial \tilde{f}}{\partial x_j} \right) + \bar{S}_f, \quad (77)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{h}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{h} \tilde{u}_j}{\partial x_j} = + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu_t}{\sigma_t} \frac{\partial \tilde{h}}{\partial x_j} \right) + \bar{S}_h, \quad (78)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} k}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} k \tilde{u}_j}{\partial x_j} = + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu_t}{\sigma_k} \frac{\partial k}{\partial x_j} \right) + 2\mu_t \widetilde{S}_{ij} \cdot \widetilde{S}_{ij} - \bar{\rho} \varepsilon + \bar{S}_k, \quad (79)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \varepsilon}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \varepsilon \tilde{u}_j}{\partial x_j} = + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right) + C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k} 2\mu_t \widetilde{S}_{ij} \cdot \widetilde{S}_{ij} - C_{2\varepsilon} \bar{\rho} \frac{\varepsilon^2}{k} + \bar{S}_\varepsilon, \quad (80)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{f}^{\prime\prime 2}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{f}^{\prime\prime 2} \tilde{u}_j}{\partial x_j} = + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu_t}{\sigma_t} \frac{\partial \tilde{f}^{\prime\prime 2}}{\partial x_j} \right) + C_g \mu_t \left(\frac{\partial \tilde{f}}{\partial x_j} \right)^2 - C_d \frac{\bar{\rho} \varepsilon}{k} \tilde{f}^{\prime\prime 2} + \bar{S}_{f^{\prime\prime 2}}, \quad (81)$$

onde, \bar{S}_1 , \bar{S}_{ul} , \bar{S}_f , \bar{S}_h , \bar{S}_k , \bar{S}_ε e $\bar{S}_{f^{\prime\prime 2}}$ correspondem respectivamente aos termos fonte de massa, quantidade de movimento linear, fração de mistura, entalpia absoluta específica, energia cinética turbulenta, dissipação de energia cinética turbulenta e variância da fração de mistura.

Uma característica importante do acoplamento interfásico é a relação entre as formas distintas de tratamento do regime de cálculo das duas fases. Como apresentado nas equações de transporte Lagrangeanas, termos referentes à taxa de variação temporal são mantidos nas equações; isso ocorre independentemente se a abordagem da fase dispersante é em regime permanente ou transitório. Devido à abordagem Lagrangeana ser utilizada para o cálculo de sistemas, que é uma abordagem não conservativa (diferentemente da abordagem por volume de controle), as formulações utilizadas para a modelagem da dinâmica das gotículas são intrinsecamente transitórias. Governadas por essas formulações, um número finito de

partículas é utilizado na abordagem Lagrangeana para representar o spray. Assim, através desse número representativo de partículas as propriedades do spray são extraídas através de um processo de integração de Monte Carlo (Collins, 2003), o que permite o acoplamento da fase dispersa sobre a fase contínua.

Nesse sentido, para a inclusão dos termos fonte associados ao transporte e evaporação das gotículas é realizada uma média de conjunto (Chrigui, 2005), a qual é obtida sobre um número de partículas que representa o spray. Jones *et al.* (2009) mostraram que o processo de média sobre os termos fonte das partículas pode ser dado por:

$$\bar{S} = \frac{1}{\Delta V} \sum_{\psi=1}^{\alpha} S^{\psi}, \quad (82)$$

onde, ΔV corresponde ao volume do volume de controle e α ao número de partículas que se encontram dentro dele.

Quando a fase dispersante é calculada em regime permanente é necessária a criação de um intervalo de tempo virtual para que os cálculos da fase discreta possam ser realizados. Esse cálculo pode ser feito definindo-se um número mínimo de iterações das equações da fase dispersa para cada gotícula enquanto esta passa por um volume de controle.

Desse modo, a abordagem transitória das equações governantes da fase dispersa independe do regime de cálculo da fase dispersante, pois o acoplamento interfásico é efetuado através de cálculos estatísticos.

Chrigui *et al.* (2009) descreveram detalhadamente os termos fontes apresentados acima, exceto o de fração de mistura e entalpia. Os termos fonte utilizados neste trabalho são apresentados a seguir:

$$\bar{S}_1 = \sum_{\psi=1}^{\alpha} (\Delta m_p / \Delta t_p)_{\psi} / \Delta V, \quad (83)$$

$$\bar{S}_{ui} = \sum_{\psi=1}^{\alpha} \left[\left(\frac{1}{\tau} (u_{p_i} - u_i) - \frac{g_i (\rho - \rho_l)}{\rho_l} \right) m_p \right]_{\psi} \frac{1}{\Delta V} + \sum_{\psi=1}^{\alpha} \overline{S_1(u_{p_l})}_{\psi}, \quad i = 1, 2, 3, \quad (84)$$

$$\bar{S}_f = \frac{s}{s + Y_{ox,0}} \bar{S}_1, \quad (85)$$

$$\bar{S}_h = \sum_{\psi=1}^{\alpha} \left[\frac{\left(\Delta m_p (h_{fl} - h_{gv}) - \frac{m_p}{Mw_l} \int_{T_{ref}}^{T_{ps}} c_{p,l} dT + \frac{(m_p + \Delta m_p)}{Mw_l} \int_{T_{ref}}^{T_{pe}} c_{p,l} dT - \frac{\Delta m_p}{Mw_l} \int_{T_{pe}}^T c_{p,g} dT \right)}{\Delta t_p} \right]_{\psi} \frac{1}{\Delta V}, \quad (86)$$

onde, Δm_p é a variação mássica de uma gotícula devido à evaporação, Δt_p é o intervalo de tempo de iteração das equações das gotículas, u_i é a velocidade da fase gasosa na direção i calculada na posição da gotícula, u_{p_i} é a velocidade de uma gotícula na direção i , T_{pe} é a temperatura da gotícula no instante anterior ao cálculo da transferência de calor e T_{ps} é a temperatura da gotícula no instante posterior ao cálculo da transferência de calor. Na equação (84) a primeira somatória corresponde ao arrasto da fase gasosa pelas gotículas e a segunda somatória à injeção de quantidade de movimento causada pela massa de combustível que evaporou da fase líquida. O primeiro termo do interior da somatória da equação (86) relaciona-se à injeção de entalpia de formação e retirada de calor específico latente na mistura. Já os demais termos dessa equação relacionam-se à retirada de calor da mistura para o aquecimento da fase líquida e para o aquecimento da fase gasosa que evaporou da gotícula.

Os termos fontes associados à energia cinética turbulenta e a sua dissipação são apresentados no item 4.4.5, pois estão relacionados à modelagem da modulação da turbulência que é

descrita neste item. O termo fonte da equação da variância da fração de mistura foi obtido segundo a relação proposta em Hollmann e Gutheil (1996), o qual é escrito como:

$$\overline{S_{f^{n2}}} = \frac{\widetilde{f^{n2}}(1 - 2\widetilde{f})}{\widetilde{f}} \overline{S_f}, \quad (87)$$

onde, $\overline{S_f}$ corresponde ao termo fonte de fração de mistura proveniente da equação (85). O termo fonte apresentado na equação (87) provém da forma modelada dos termos fonte associados ao transporte e evaporação de gotículas para a equação da variância da fração de mistura originalmente constituída para escoamentos monofásicos (equação (52), seção 4.3.2), conforme apresentado em Hollmann e Gutheil (1996).

4.4.5 DISPERSÃO TURBULENTA E MODULAÇÃO DE TURBULÊNCIA

Quando um escoamento turbulento é modelado com um modelo de turbulência baseado em RANS, e até mesmo em LES (Jones et al., 2009), é necessário se tomar um cuidado especial para a reprodução da dispersão turbulenta das gotículas. Se este mecanismo de dispersão for desconsiderado, a formulação aproxima-se da DSF para escoamentos modelados com modelos de turbulência baseados em RANS, item 2.4.2. Pois, nesse caso, as partículas seguirão trajetórias determinísticas prescritas por suas condições iniciais e pelas propriedades médias da fase gasosa (Faeth, 1983).

Na apresentação da formulação SSF, item 2.4.2, é mencionado que, à medida que as partículas discretas caminham através do escoamento, admite-se que elas interagem com uma sucessão de turbilhões. Esse é o principal embasamento teórico que sustenta a formulação comumente adotada para o cálculo das flutuações turbulentas das propriedades da fase gasosa. O modelo utilizado neste trabalho assume que, nos turbilhões, as propriedades são constantes,

mas mudam de forma aleatória de um turbilhão para outro. Essas flutuações, quando somadas às propriedades médias do escoamento, transportadas pelas equações de conservação, seção 4.1, representam os valores instantâneos dessas propriedades que são utilizadas nas equações da fase discreta.

Faeth (1987) apresenta uma revisão histórica abrangente dos modelos de dispersão turbulenta da fase discreta. Seguindo os resultados de suas análises, já apresentados em Faeth (1983), o modelo utilizado neste trabalho considera que as partículas interagem com os turbilhões no menor intervalo de tempo definido entre o intervalo de travessia (t_{cross}) e o tempo de vida (t_e) de um turbilhão. Esses intervalos de tempo são escritos como:

$$t_e = -\frac{L_e}{\sqrt{2k/3}} \log(r), \quad (88)$$

$$L_e = C_\mu^{3/4} \frac{k^{3/2}}{\varepsilon}, \quad (89)$$

$$t_{cross} = -\tau_p \ln\left(\frac{1 - L_e}{\tau_p |u - u_p|}\right), \quad (90)$$

onde, L_e é o tamanho característico de um turbilhão e r é uma variável aleatória de distribuição uniforme entre 0,0 e 1,0. Uma vez determinado o tempo de interação da partícula com um turbilhão, são feitos os cálculos das flutuações das propriedades do escoamento. O procedimento de cálculo das flutuações turbulentas utilizado neste estudo adiciona anisotropia nestas variáveis, em que os seus componentes obedeceram a uma distribuição Gaussiana. A flutuação turbulenta da velocidade teve como desvio padrão a quantidade $\sqrt{2k/3}$ calculada na

posição da gotícula. A flutuação de cada componente do vetor velocidade \vec{u} da fase gasosa é calculada como:

$$u_i' = \zeta_i \sqrt{\frac{2k}{3}}, \quad (91)$$

onde, ζ_i são variáveis aleatórias que seguem uma distribuição Gaussiana para cada direção cartesiana i , onde $i = 1, 2$ e 3 .

Quando o tempo de interação entre a partícula e o turbilhão se esgota outro intervalo de tempo é recalculado, como também as flutuações de velocidade que acompanham a partícula são recalculadas.

A representação da produção e dissipação da energia cinética turbulenta da fase dispersante pela presença das gotículas foi feita com a consideração da modulação de turbulência. Para isso foi utilizado o modelo padrão, o qual também foi utilizado em Chrigui et al. (2009).

Conforme mencionado no item 2.4.2, a contabilização da modelagem da modulação de turbulência na fase dispersante é feita através da adição de termos fonte nas equações de transporte de energia cinética turbulenta e de sua dissipação, o que foi apresentado pelas equações (79) e (80). Os seus termos fontes são dados pelas equações (92) e (93), conforme a formulação proposta pelo modelo padrão.

$$\overline{S_k} = \overline{u_i S_{ui}} - \overline{u_i} \overline{S_{ui}} + \frac{1}{2} (\overline{u_i^2 S_1} - \overline{u_i^2} \overline{S_1}) \quad i = 1, 2, 3 \quad e, \quad (92)$$

$$\overline{S_\varepsilon} = C_{3\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k} \overline{S_k}, \quad (93)$$

onde, $C_{3\varepsilon}$ corresponde a uma constante de ajuste que é derivada de dados experimentais. Este parâmetro depende da distribuição de diâmetros e da concentração de gotículas na fase dispersante (Chrigui, 2005). Hollmann e Gutheil (1998) utilizaram o valor de $1,00$ para seus estudos com chamas de spray em ambiente aberto e Chrigui (2005) encontrou o valor de $1,87$, que se ajustou muito bem com os resultados de suas medições. Entretanto, neste presente trabalho, o valor de $1,15$ foi utilizado para este parâmetro, que possibilitou maior aproximação entre os resultados das simulações e os dados experimentais. Esse valor foi encontrado após uma análise de sensibilidade realizada com simulações diretas da chama de spray.

5 MÉTODO NUMÉRICO

A solução das equações apresentadas nos modelos matemáticos, tanto para a fase dispersante quanto para a fase dispersa, necessita de técnicas baseadas em métodos numéricos. Desse modo, as equações diferenciais apresentadas são transformadas em um sistema de expressões algébricas que são resolvidas com processos iterativos.

Neste trabalho foi utilizado um código computacional, escrito em linguagem C++, criado originalmente para a solução de escoamentos com modelos de turbulência baseados em LES (Fukumasu, 2010). Este código passou por modificações para permitir a solução de escoamentos bifásicos reativos com modelos de turbulência baseados em RANS.

O código computacional é baseado no método dos volumes finitos, que é apresentado na primeira seção deste capítulo, para malhas cartesianas tridimensionais, com o arranjo colocalizado. Este código utiliza o método de processamento paralelo OpenMPTM, que proporcionou um aumento na velocidade de processamento de até 4 vezes. Esse aumento de processamento ocorreu pelo fato de que a solução de uma parcela dos laços do código computacional ter sido paralelizada.

Após a apresentação do método dos volumes finitos, as formas de discretização das equações da fase dispersante, o acoplamento pressão-velocidade e a formulação pseudo-transiente que foram implementados são descritos. Logo em seguida à descrição do conjunto de procedimentos que foram tomados para a solução das equações Eulerianas são apresentadas as discretizações empregadas no conjunto de equações que modela o comportamento da fase dispersa.

A última parte do capítulo apresenta o algoritmo empregado para o rastreamento de partículas no domínio computacional, de fundamental importância para a solução de um problema baseado na aproximação Euler-Lagrange.

5.1 MÉTODO DOS VOLUMES FINITOS

As simulações desenvolvidas neste trabalho foram realizadas através do método dos volumes finitos (MVF) (Patankar, 1980). Este método tem como principal característica a solução de um sistema de equações algébricas aproximadas, que são obtidas através da discretização das equações diferenciais (as quais descrevem o fenômeno de interesse) integradas em volumes de controle elementares. Ao realizar a integração dessas equações sobre volumes de controle elementares o método em questão sempre garante a conservação das quantidades físicas transportadas.

A aplicação deste método parte da divisão do domínio de interesse em um conjunto de volumes elementares, que não se intersectam, de forma que cada volume englobe um nó de uma malha de pontos. As interpolações necessárias para a representação das variações das equações integradas nas equações algébricas são feitas com funções do tipo *piecewise*, que envolvem os nós do elemento em que ocorre a integração e os nós de seus vizinhos. O MVF permite a interpretação física direta dos termos das equações aproximadas.

5.2 DISCRETIZAÇÃO DAS EQUAÇÕES DA FASE DISPERSANTE

As equações que descrevem o comportamento da fase dispersante (Eqs. (75), (76), (77), (78), (79) e (80)) podem ser representadas através de uma equação geral de transporte para a variável ψ , que é escrita como:

$$\frac{\partial \rho \psi}{\partial t} + \frac{\partial \rho \psi u_j}{\partial x_j} = + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\Gamma_\psi \frac{\partial \psi}{\partial x_j} \right) + S_\psi . \quad (94)$$

Como mencionado na seção 5.1, o método dos volumes finitos parte da integração das equações governantes do fenômeno de interesse em um volume elementar, neste caso, as equações da fase contínua (Eqs. (75), (76), (77), (78), (79) e (80)). Para a realização deste cálculo foi definido um volume de controle elementar, o qual é apresentado na Figura 21 para esclarecer a notação utilizada nas equações aproximadas.

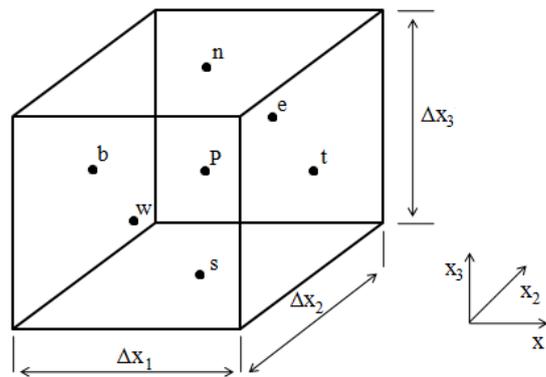


Figura 21: Volume de controle elementar.

Na Figura 21, a letra P identifica o nó do volume de controle, que é realizada a integração, como também serve de índice para identificar o próprio volume, considerando que no código utilizado foi adotado o arranjo co-localizado de variáveis. A opção por este tipo de arranjo foi feita para tornar a alocação de variáveis das células mais conveniente na fase de programação do código computacional. As letras distribuídas nas faces do elemento nomeiam-nas da seguinte forma: b corresponde à face de baixo (*bottom*), t é associada à face de cima (*top*), n a face norte (*north*), s a face sul (*south*), e a face leste (*east*) e w a face oeste (*west*). Letras minúsculas servem para identificar faces de elementos, enquanto que letras maiúsculas servem para identificar os próprios elementos. A notação empregada neste trabalho é baseada na proposta por Maliska (2004).

A integração da Eq. (94) é realizada da seguinte forma:

$$\int_{V,t} \frac{\partial \rho \psi}{\partial t} dV dt + \int_{V,t} \frac{\partial \rho \psi u_j}{\partial x_j} dV dt = + \int_{V,t} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\Gamma \psi \frac{\partial \psi}{\partial x_j} \right) dV dt + \int_{V,t} S_\psi dV dt , \quad (95)$$

o que resulta em:

$$\begin{aligned} \frac{M_P \psi_P - M_P^0 \psi_P^0}{\Delta t} + \dot{M}_e \psi_e^\theta - \dot{M}_w \psi_w^\theta + \dot{M}_n \psi_n^\theta - \dot{M}_s \psi_s^\theta + \dot{M}_t \psi_t^\theta - \dot{M}_b \psi_b^\theta = D_e \left[\frac{\partial \psi}{\partial y} \right]_e^\theta - \\ D_w \left[\frac{\partial \psi}{\partial y} \right]_w^\theta + D_n \left[\frac{\partial \psi}{\partial z} \right]_n^\theta - D_s \left[\frac{\partial \psi}{\partial z} \right]_s^\theta + D_t \left[\frac{\partial \psi}{\partial x} \right]_t^\theta - D_b \left[\frac{\partial \psi}{\partial x} \right]_b^\theta + L[S\psi]^\theta , \end{aligned} \quad (96)$$

onde, \dot{M}_γ corresponde ao fluxo mássico na face γ , que é dado por:

$$\dot{M}_\gamma = \rho u_\gamma B_\gamma . \quad (97)$$

A variável u_γ corresponde à velocidade normal à face γ e B_γ corresponde à área desta mesma face. Na equação (96) também é apresentada a variável D_γ que corresponde ao coeficiente difusivo calculado na face γ que é escrito como:

$$D_\gamma = \Gamma_{\psi_\gamma} B_\gamma , \quad (98)$$

onde, Γ_{ψ_γ} é o coeficiente de difusão da propriedade ψ calculado na face γ .

Neste trabalho o sobrescrito θ serve para representar o tipo de discretização temporal empregada nas equações. A variável θ pode ter o valor de 0 para esquemas explícitos, 1/2 para esquemas semi-implícitos (esquema de *Crank-Nicolson*) e 1 para esquemas implícitos.

No presente trabalho, os valores das quantidades físicas utilizadas para a determinação dos fluxos de massa definidos nas faces dos volumes de controle foram os referentes à iteração

anterior do processo de cálculo. Esse procedimento, tendo em vista que quando a simulação converge os valores das quantidades transportadas não variam, não prejudica os resultados finais da simulação, tanto em condições de regime permanente, ou mesmo, de um passo de tempo para o outro, em condições de regime transitório.

O termo $L[S_\psi]^0$ representa a integração da variável que se encontra entre colchetes. As variáveis S_ψ que foram atribuídas às quantidades físicas: massa, quantidade de movimento, fração de mistura, variância da fração de mistura, entalpia, energia cinética turbulenta e sua dissipação, são mostradas na Tabela 1.

Tabela 1: Termos das equações Eulerianas admitidos como termo fonte na integração.

Ψ	S_ψ
Massa	\bar{S}_1
Quantidade de movimento na direção i	$-\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial}{\partial x_j} [\bar{\rho} k + (\mu_t \frac{\partial \bar{u}_k}{\partial x_k})] + \bar{\rho} g_i + \bar{S}_{ui}$
Fração de mistura (f)	\bar{S}_f
Variância de f	$C_g \mu_t \left(\frac{\partial \bar{f}^n}{\partial x_j} \right)^2 - C_d \frac{\bar{\rho} \varepsilon}{k} \bar{f}^n{}^2$
Entalpia	\bar{S}_h
Energia cinética turbulenta (k)	$2\mu_t \bar{S}_{ij} \cdot \bar{S}_{ij} - \bar{\rho} \varepsilon + \bar{S}_k$
Dissipação de k	$C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k} 2\mu_t \bar{S}_{ij} \cdot \bar{S}_{ij} - C_{2\varepsilon} \bar{\rho} \frac{\varepsilon^2}{k} + \bar{S}_\varepsilon$

Alguns dos termos fontes apresentados pela variável S_ψ dependem da própria quantidade física transportada (para o caso da variável genérica, S_ψ dependente de ψ). Nesses casos é necessário fazer uma boa representação destes termos para que o processo iterativo de solução seja estável e convergente. Em Maliska (2004) é mencionado que esses termos fontes devem ser tratados o mais implicitamente possível para não torná-los constantes durante o processo iterativo. Uma das alternativas para se solucionar essa questão é com a linearização desses termos, conforme apresentado em Patankar (1980) e Maliska (2004).

Os termos atribuídos como termos fonte nas equações aproximadas são linearizados quando se transformam em uma expressão semelhante a:

$$S_{\psi} = S_{\psi_p} \psi + S_c, \quad (99)$$

onde, S_{ψ_p} deve ser negativo para não permitir com que a equação de transporte aproximada viole o critério de Scarborough (Scarborough, 1966). A Eq. (99) pode ser obtida com a realização de uma expansão em série de Taylor do termo fonte dependente da própria quantidade transportada em função dessa quantidade:

$$S_{\psi} = S_{\psi^*} + \left[\frac{dS_{\psi}}{d\psi} \right]_P^* (\psi_P - \psi_P^*) = S_{\psi_a} \psi + S_b, \quad (100)$$

onde o sobrescrito * indica o valor da quantidade no instante de tempo anterior, enquanto a sua ausência indica o valor atual na iteração. Maliska (2004) indica que para se obter o termo S_{ψ_p} negativo, caso este seja positivo após a realização da expansão, é necessária a criação de um artifício que aumente S_c . Desse modo, após a realização da expansão em série de Taylor, uma das formas para se fazer o aumento artificial na parcela explícita do termo fonte pode ser ilustrada através da seguinte operação:

$$S_{\psi} = S_{\psi_p} \psi + S_c = (1 - F) S_{\psi_a} \psi + S_{\psi_a} F + S_b \quad (101)$$

onde, F é um fator maior que $1,0$. No presente trabalho os termos fonte das equações de \widehat{f}^{n2} e ε foram linearizados seguindo esse procedimento, pois foi adotada a discretização implícita para as equações da fase contínua.

Neste estudo as interpolações dos valores das propriedades calculadas nas faces dos elementos foram escritas com a inclusão dos fatores de ajuste α_γ e β_γ , que permitem a alteração dos esquemas de discretização dos termos advectivos das equações de transporte com maior versatilidade. Assim, esta abordagem para os termos advectivos fornece que:

$$\psi_\gamma = \left(\frac{1}{2} + \alpha_\gamma\right) \psi_P + \left(\frac{1}{2} - \alpha_\gamma\right) \psi_\Gamma, \text{ para } \gamma = e, n, t; \Gamma = E, N, T, \quad (102)$$

$$\psi_\gamma = \left(\frac{1}{2} + \alpha_\gamma\right) \psi_\Gamma + \left(\frac{1}{2} - \alpha_\gamma\right) \psi_P, \text{ para } \gamma = w, s, b; \Gamma = W, S, B. \quad (103)$$

Para os termos difusivos:

$$\Gamma_\gamma^\psi \left[\frac{\partial \psi}{\partial x} \right]_\gamma = \beta_\gamma \Gamma_\gamma^\psi \left(\frac{\psi_\Gamma - \psi_P}{\Delta x_\gamma} \right), \text{ para } \gamma = e, n, t; \Gamma = E, N, T, \quad (104)$$

$$\Gamma_\gamma^\psi \left[\frac{\partial \psi}{\partial x} \right]_\gamma = \beta_\gamma \Gamma_\gamma^\psi \left(\frac{\psi_P - \psi_\Gamma}{\Delta x_\gamma} \right), \text{ para } \gamma = w, s, b; \Gamma = W, S, B. \quad (105)$$

Os termos difusivos foram discretizados utilizando-se o esquema de diferenças centrais (*Central Differencing Scheme* - CDS), o que pode ser verificado nas equações (104) e (105).

Com a definição das propriedades calculadas nas faces da equação (96) nas equações (102)-(105) e, ao substituí-las na equação (96) juntamente com a subtração da equação da conservação da massa, chega-se em:

$$\frac{M_P}{\Delta t} \psi_P + A_P^* \psi_P^\theta = A_e \psi_E^\theta + A_w \psi_W^\theta + A_n \psi_N^\theta + A_s \psi_S^\theta + A_t \psi_T^\theta + A_b \psi_B^\theta + \frac{M_P^0}{\Delta t} \psi_P^0 + S_c \Delta V, \quad (106)$$

onde:

$$A_P^* = A_e + A_w + A_n + A_s + A_t + A_b - \frac{M_P}{\Delta t} + \frac{M_P^0}{\Delta t}, \quad (107)$$

$$A_\gamma = -\left(\frac{1}{2} - \alpha_\gamma\right) \dot{M}_\gamma + \frac{D_\gamma \beta_\gamma}{\Delta x_\gamma}, \quad \text{para } \gamma = e, n, t, \quad (108)$$

$$A_\gamma = +\left(\frac{1}{2} + \alpha_\gamma\right) \dot{M}_\gamma + \frac{D_\gamma \beta_\gamma}{\Delta x_\gamma}, \quad \text{para } \gamma = w, s, b. \quad (109)$$

Neste trabalho foram implementados os esquemas de discretização dos termos advectivos do tipo *Upwind* de primeira ordem, Híbrido e de diminuição de variação total (*Total Variation Diminishing – TVD*). Os dois primeiros esquemas podem ser aplicados apenas com o ajuste dos coeficientes α_γ e β_γ , já o TVD necessita também da adição de um termo de correção deferida no termo fonte S_c . Esses três esquemas são apresentados a seguir.

Nesse sentido, para o esquema *Upwind* de primeira ordem têm-se que para as faces t, n e e :

$$\beta_\gamma = 1,0 \text{ e } \alpha_\gamma = -0,5 \text{ se } -\dot{M}_\gamma > 0,0 \text{ senão } \alpha_\gamma = +0,5 \quad \text{para } \gamma = t, n, e \quad (110)$$

Para as faces b, s e w :

$$\beta_\gamma = 1,0 \text{ e } \alpha_\gamma = +0,5 \text{ se } \dot{M}_\gamma > 0,0 \text{ senão } \alpha_\gamma = -0,5 \quad \text{para } \gamma = b, s, w \quad (111)$$

No esquema híbrido, têm-se que para as faces t, n e e :

$$\max \left[-\dot{M}_\gamma; \left(D_\gamma - \frac{\dot{M}_\gamma}{2} \right); 0,0 \right] = \begin{cases} -\dot{M}_\gamma \rightarrow (\alpha_\gamma = -0,5 \text{ e } \beta_\gamma = 0,0) \\ \left(D_\gamma - \frac{\dot{M}_\gamma}{2} \right) \rightarrow (\alpha_\gamma = 0,0 \text{ e } \beta_\gamma = 1,0) \\ 0,0 \rightarrow (\alpha_\gamma = +0,5 \text{ e } \beta_\gamma = 0,0) \end{cases} \quad (112)$$

onde, $\gamma = t, n \text{ e } e$; e j corresponde a direção normal a respectiva face. Para as faces $b, s \text{ e } w$:

$$\max \left[\dot{M}_\gamma; \left(D_\gamma + \frac{\dot{M}_\gamma}{2} \right); 0,0 \right] = \begin{cases} \dot{M}_\gamma \rightarrow (\alpha_\gamma = 0,5 \text{ e } \beta_\gamma = 0,0) \\ \left(D_\gamma + \frac{\dot{M}_\gamma}{2} \right) \rightarrow (\alpha_\gamma = 0,0 \text{ e } \beta_\gamma = 1,0) \\ 0,0 \rightarrow (\alpha_\gamma = -0,5 \text{ e } \beta_\gamma = 0,0) \end{cases} \quad (113)$$

Para a aplicação do esquema TVD os coeficientes α_γ e β_γ são os mesmos aplicados para o caso do esquema *Upwind* de primeira ordem, entretanto nesse esquema é realizada uma correção deferida (S_u^{DC}), a qual é somada ao termo fonte S_c da equação (106). A correção deferida é escrita como:

$$\begin{aligned} S_u^{DC} &= \frac{1}{2} \dot{M}_t [(1 - \alpha'_t) \psi(r_t^-) - \alpha'_t \cdot \psi(r_t^+)] (\psi_T - \psi_P) \\ &+ \frac{1}{2} \dot{M}_b [\alpha'_b \psi(r_b^+) - (1 - \alpha'_b) \cdot \psi(r_b^-)] (\psi_P - \psi_B) \\ &+ \frac{1}{2} \dot{M}_e [(1 - \alpha'_e) \psi(r_e^-) - \alpha'_e \cdot \psi(r_e^+)] (\psi_E - \psi_P) \\ &+ \frac{1}{2} \dot{M}_w [\alpha'_w \psi(r_w^+) - (1 - \alpha'_w) \cdot \psi(r_w^-)] (\psi_P - \psi_W) \\ &+ \frac{1}{2} \dot{M}_n [(1 - \alpha'_n) \psi(r_n^-) - \alpha'_n \cdot \psi(r_n^+)] (\psi_N - \psi_P) \\ &+ \frac{1}{2} \dot{M}_s [\alpha'_s \psi(r_s^+) - (1 - \alpha'_s) \cdot \psi(r_s^-)] (\psi_P - \psi_S), \end{aligned} \quad (114)$$

onde, $\psi(r)$ é a função limitante (Versteeg e Malalasekera, 2007) para a variável r . Neste trabalho as formulações implementadas para a função limitante são apresentadas na Tabela 2.

Tabela 2: Formulações da função limitante

<i>Formulação</i>	<i>Função limitante $\psi(r)$</i>
Van Leer	$\frac{r + r }{1 + r}$
Van Albada	$\frac{r + r^2}{1 + r^2}$
Min-Mod	$\psi(r) = \begin{cases} \min(r, 1) & \text{se } r > 0 \\ 0 & \text{se } r \leq 0 \end{cases}$
SUPERBEE	$\max[0, \min(2r, 1)], \min(r, 2)$
Sweby	$\max[0, \min(\beta r, 1)], \min(r, \beta)$
UMIST	$\max[0, \min(2r, (1 + 3r)/4, (3 + r)/4, 2)]$

Os argumentos da função limitante são definidos em todas as direções do domínio de forma semelhante à definição apresentada para a direção x_2 (indicada na Figura 21) nas equações (115) e (116).

$$r_e^+ = \left(\frac{\psi_P - \psi_W}{\psi_E - \psi_P} \right) \text{ e } r_w^+ = \left(\frac{\psi_W - \psi_{WW}}{\psi_P - \psi_W} \right), \quad (115)$$

$$r_e^- = \left(\frac{\psi_{EE} - \psi_E}{\psi_E - \psi_P} \right) \text{ e } r_w^- = \left(\frac{\psi_E - \psi_P}{\psi_P - \psi_W} \right), \quad (116)$$

Os coeficientes que α'_γ , em que $\gamma = t, b, e, w, n, s$ são ajustados automaticamente no processo de cálculo segundo a relação apresentada pela equação (117).

$$\alpha'_\gamma = 1 \text{ se } \dot{M}_\gamma > 0 \text{ e } \alpha'_\gamma = 0 \text{ se } \dot{M}_\gamma < 0, \text{ para } \gamma = t, b, e, w, n, s, \quad (117)$$

Os esquemas TVD's com as funções limitantes descritas na Tabela 2 são apresentados, em Versteeg e Malalasekera (2007), como esquemas que possibilitam aproximações de 2ª ordem das funções de interpolação e permitem soluções livres de oscilações não físicas, presentes em esquemas de interpolação de alta ordem como QUICK e CDS. Portanto, o esquema TVD com a função limitante SUPERBEE foi adotado para a realização das simulações deste trabalho. Como mencionado em Versteeg e Malalasekera (2007), não há argumentos convincentes em favor de algumas das funções limitantes apresentadas na Tabela 2, sendo a sua seleção apenas uma questão de preferência. A função limitante SUPERBEE foi selecionada apenas por não apresentar as regiões de singularidades apresentadas pelas funções de Van Leer (denominador nulo para $r = -1$) e Van Albada (valores negativos entre -1 e 0) e ser relativamente simples, o que reduz o custo de processamento computacional.

5.3 ACOPLAMENTO PRESSÃO-VELOCIDADE

O acoplamento pressão-velocidade utilizado em escoamentos de baixas velocidades ($Ma < 0,3$) parte do princípio de que um campo de pressões aplicado às equações de momentum deve proporcionar o resultado de um campo de velocidades que satisfaça a conservação da massa. Neste trabalho o método PRIME (*PRessure Implicit Momentum Explicit*) foi utilizado.

Este método utiliza o seguinte algoritmo (Maliska, 2004):

1. Estima-se o campo de velocidades;
2. São calculados os coeficientes A_i 's, Eqs. (107) - (109);
3. As velocidades aproximadas \hat{u}_i são calculadas Eq. (119);

4. Calcula-se o campo de pressões;
5. Corrige-se o campo de velocidades;
6. Calculam-se os transportes das demais variáveis do problema $(k, \varepsilon, f, f'^2, h)$ e;
7. Retorna-se até o passo 2. até a convergência.

Como observado, neste método são usadas correções para as velocidades, estas correções são dadas por expressões semelhantes à eq. (118), que apresenta o cálculo para a face e . A partir deste tópico a notação do sistema de coordenadas é passada da notação indicial para a notação cartesiana convencional a fim de tornar a notação mais clara para o leitor, em que x, y e z equivalem respectivamente à x_1, x_2 e x_3 .

$$u_e = \hat{u}_e - \overline{d_e^u}(P_E - P_P). \quad (118)$$

Para o arranjo co-localizado:

$$\hat{u}_e = \frac{1}{2}(\hat{u}_E + \hat{u}_P), \quad (119)$$

$$\overline{d_e^u} = \frac{1}{2} \left(\left(\frac{\Delta V}{A_P \Delta y} \right)_P + \left(\frac{\Delta V}{A_P \Delta y} \right)_E \right), \quad (120)$$

onde, A_P é o coeficiente do sistema linear das equações de transporte de quantidade de movimento linearizadas referente à célula P. As componentes das velocidades aproximadas são calculadas reescrevendo-se as equações de quantidade de movimento, retirando-se o gradiente de pressão do termo fonte e isolando a velocidade, o que resulta em:

$$\hat{u}_I = \frac{A_j u_j + B^i}{A_I}, \quad (121)$$

onde, u_j corresponde à velocidade armazenada no nó da célula e B^i corresponde aos termos fonte da equação de quantidade de movimento, exceto o gradiente de pressão. A equação do campo de pressões é obtida substituindo-se as equações das correções para a velocidade (Eq. (118)) na equação da continuidade, o que resulta:

$$A_{PP}P_P = A_{Pe}P_{Pe} + A_{Pw}P_{Pw} + A_{Pn}P_{Pn} + A_{Ps}P_{Ps} + A_{Pt}P_{Pt} + A_{Pb}P_{Pb} + S_{PP}, \quad (122)$$

onde, utilizando a face e para apresentar os termos das equações:

$$A_{PP} = A_{Pe} + A_{Pw} + A_{Pn} + A_{Ps} + A_{Pt} + A_{Pb}, \quad (123)$$

$$A_{Pe} = \left(\frac{\Delta V}{\Delta y}\right)^2 \frac{\rho_e}{A_p}, \quad (124)$$

$$S_{PP} = -\frac{\Delta \rho}{\Delta t} - \left(\hat{M}_e - \hat{M}_w + \hat{M}_n - \hat{M}_s + \hat{M}_t - \hat{M}_b\right) + \bar{S}_1, \quad (125)$$

\hat{M}_i associa-se ao fluxo na face i obtido com a velocidade aproximada.

5.4 FORMULAÇÃO PSEUDO-TRANSIENTE

Versteeg and Malalasekera (2007) mencionam que cálculos em regime permanente podem ser interpretados como formulações pseudo-transientes (ou, transiente distorcido) com incrementos de tempo variados. Esses autores comparam uma equação em regime permanente

sub-relaxada com uma equação em regime transiente implícita e obtêm uma relação entre o passo de tempo e coeficiente de sub-relaxação. No manual do programa computacional FLUENT[®] (Fluent, 2006) é mencionado que a sub-relaxação das equações em regime permanente, também conhecida como sub-relaxação implícita, é utilizada em códigos do tipo *pressure-based* para estabilizar a convergência da solução. Esse controle de estabilidade numérica permite a atualização gradual das quantidades físicas calculadas. Com a relação obtida define-se um *CFL* (número de Courant-Friedrichs-Lewy), o qual é utilizado neste trabalho.

$$CFL = \frac{\gamma}{1 - \gamma}, \quad (126)$$

onde γ é o coeficiente de sub-relaxação das equações em regime permanente. O incremento de tempo pode ser definido como:

$$\Delta t = \min \left[\left(CFL \frac{\rho \Delta V}{A_p} \right)_1, \dots, \left(CFL \frac{\rho \Delta V}{A_p} \right)_n, \dots, \left(CFL \frac{\rho \Delta V}{A_p} \right)_N \right]. \quad (127)$$

Aqui, o subscrito n corresponde à célula de índice n e N corresponde ao número total de células do domínio de cálculo. Assim, o incremento de tempo é definido como o menor valor entre todas as células do domínio definido pela expressão entre parênteses da eq. (127).

5.5 DISCRETIZAÇÃO DAS EQUAÇÕES DA FASE DISPERSA

Neste trabalho as equações da fase dispersa são resolvidas com métodos numéricos. Para simplificar a representação do método numérico a Eq. (62) é reescrita da seguinte forma:

$$\frac{d\vec{u}_p}{dt} = a(\vec{u} - \vec{u}_p) + b. \quad (128)$$

Se, as variáveis a , b e \vec{u} fossem admitidas como constantes, a Eq. (128) poderia ser integrada analiticamente. Entretanto, estas variáveis são as responsáveis pelo acoplamento da fase dispersa com a fase dispersante e variam consideravelmente ao longo do escoamento. Assim, métodos numéricos apresentam-se como uma alternativa para a solução desta equação, como também das demais equações da fase dispersa.

A equação do balanço de forças na partícula é discretizada com o Método de Euler Implícito (MEI). Durante o passo de tempo de integração desta equação as propriedades da fase gasosa são adotadas como constantes e referem-se ao resultado da última interpolação realizada no local da partícula. Aplicando este método a Eq. (128) resulta em:

$$\frac{\vec{u}_p^{n+1} - \vec{u}_p^n}{\Delta t} = a(\vec{u} - \vec{u}_p^{n+1}) + b \rightarrow \vec{u}_p^{n+1} = \Delta t[a(\vec{u} - \vec{u}_p^{n+1}) + b] + \vec{u}_p^n \rightarrow$$

$$\vec{u}_p^{n+1}(1 + a\Delta t) = \Delta t[a\vec{u} + b] + \vec{u}_p^n \rightarrow \vec{u}_p^{n+1} = \frac{\Delta t[a\vec{u} + b] + \vec{u}_p^n}{(1 + a\Delta t)}. \quad (129)$$

O sobrescrito n indica a variável calculada no passo e tempo anterior e o $n+1$ ao passo de tempo atual. Após a solução da equação do balanço de forças a Eq. (60) pode ser resolvida, a qual também é discretizada implicitamente, o que resulta:

$$\frac{\vec{x}_p^{n+1} - \vec{x}_p^n}{\Delta t} = \vec{u}_p^{n+1} \rightarrow \vec{x}_p^{n+1} = \vec{x}_p^n + \vec{u}_p^{n+1} \Delta t \quad (130)$$

A discretização da Eq. (64), como as demais equações, foi realizada com o Método de Euler Explícito (MEE) para simplificar o seu cálculo, que resulta em:

$$m_p^{n+1} = m_p^n - N_l A_p M w_l \Delta t . \quad (131)$$

A discretização da Eq. (69) resultou em:

$$T_p^{n+1} = T_p^n + \frac{h A_p^n (T - T_p^n)}{m_p^n c_p} \Delta t . \quad (132)$$

E, finalmente, a Eq. (72) discretizada é escrita como:

$$d_p^{n+1} = d_p^n + \left\{ \frac{2}{h_{fg} \rho_p^n} \left[\frac{Nu \cdot k_\infty}{d_p^n} (T - T_p^n) \right] \right\} \Delta t . \quad (133)$$

Apte et al. (2009) definem que sub-iterações na solução das equações da fase discreta são necessárias. Esses autores escolheram como incremento de tempo para o avanço da solução das equações da fase dispersa o menor entre os intervalos de tempo definidos: pelo incremento de tempo da solução da fase dispersante, pelas escalas de transferência de calor e de massa, como também, o definido pelo tempo de relaxação da gotícula. Esta escolha é aceitável quando os incrementos de tempo da fase dispersante são pequenos. Assim sendo, para as simulações realizadas por Apte et al. (2009) que utilizaram um modelo de turbulência baseado em LES, isso não foi um problema. Porém, quando modelos de turbulência baseados em RANS são utilizados, a escolha do incremento de tempo semelhante à feita por esses autores tornaria o procedimento de cálculo demasiadamente lento. Portanto, neste trabalho foi utilizado um esquema semelhante ao apresentado no manual do programa computacional

FLUENT[®] (Fluent, 2006), em que um fator de deslocamento espacial é definido. Este fator especifica quantas vezes as equações de cada gotícula devem ser calculadas enquanto elas passam por uma célula. Com este critério os passos de tempo das sub-iterações tornam-se maiores, reduzindo o tempo de processamento do cálculo.

5.6 ALGORITMO DE RASTREAMENTO DE PARTÍCULAS

Durante o cálculo da fase discreta, em cada sub-iteração, as posições das gotículas devem ser conhecidas para permitir que sejam feitas as interpolações das propriedades da fase contínua. Neste trabalho cada gotícula foi calculada individualmente, esta opção foi feita para se obter melhor representação estatística do spray. Dessa forma, o número delas atingiu valores da ordem de 10^6 para permitir essa representação, o que requereu um algoritmo extremamente rápido para que as gotículas pudessem ser localizadas em cada sub-iteração.

O rastreamento de partículas pode ser dividido em duas etapas principais:

1. A verificação de presença de gotículas em uma célula
2. A procura no domínio computacional

A verificação da presença de uma gotícula em uma célula implementada neste trabalho é a mesma utilizada por Apte et al. (2003). O critério que define se uma gotícula está dentro de uma célula baseia-se em análises vetoriais. Os vetores normais as faces da célula em análise são comparados com vetores formados entre a partícula e os pontos correspondentes a sua projeção normal as faces da célula, ou seja, vetores normais as faces que tem como origem a partícula. Quando uma partícula encontra-se no interior de uma célula os seus vetores apontam para a mesma direção que os vetores normais as faces. A Figura 22 ilustra este critério.

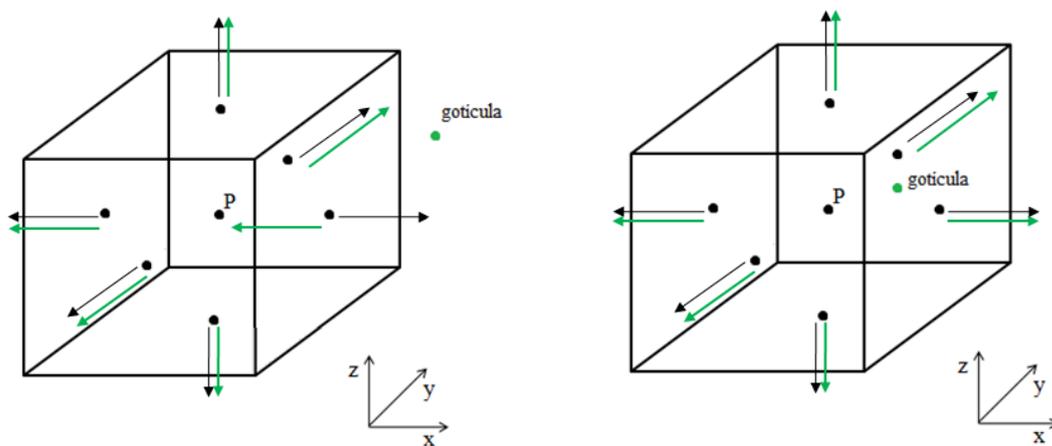


Figura 22: Representação do critério de verificação de presença de gotícula. Os vetores verdes são os obtidos da projeção da partícula, com origem no centro da face, os pretos são os normais às faces.

Uma aproximação por buscas sucessivas, semelhante à apresentada por Li e Modest (2001) foi utilizada neste trabalho. Este método é usado para designar em qual célula o critério de verificação de presença deve ser aplicado. Especificamente, o método criado aqui se baseia em análises vetoriais.

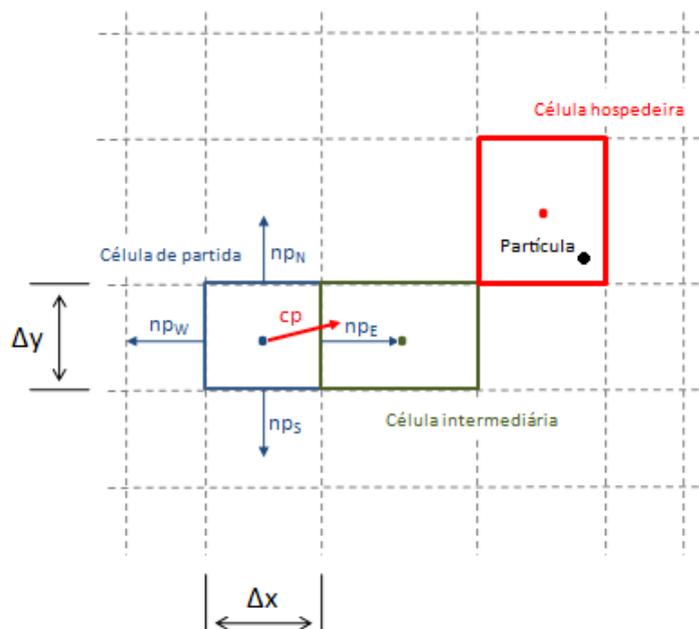


Figura 23: Esquemática do algoritmo de busca de partículas.

A busca inicia-se com a criação de um vetor com base no centróide da última célula onde o critério de verificação foi aplicado (célula de partida), e com ponta na posição da partícula (vetor cp). Este vetor é normalizado e comparado com um conjunto de vetores normalizados que conectam o centróide da célula de partida com os centróides de suas células vizinhas (vetores np_i , em que i indica a célula vizinha). Cada um desses vetores criados entre centróides de células vizinhas aponta para sua respectiva célula vizinha. Desse modo, o vetor np_i que melhor se aproximar do vetor cp indicará a célula i como a próxima célula onde o critério de verificação de presença será aplicado.

Na Figura 23 é apresentada uma esquematização do mecanismo de buscas sucessivas. O vetor vermelho corresponde ao vetor cp normalizado. Observe que neste caso o vetor np_e é o mais próximo dele, indicando a próxima célula, célula intermediária, para ser verificada.

Semelhantemente à estrutura utilizada por Apte et al. (2003) em seu algoritmo de procura, neste trabalho quando o algoritmo de buscas sucessivas entra em redundância, recorre-se a um algoritmo de força bruta modificado (Lohner, 2005). Neste segundo algoritmo o critério é aplicado sucessivamente, e com ordem fixa, em todos os elementos vizinhos de uma das células em redundância. Caso a partícula não seja encontrada o processo torna-se recorrente e efetua a busca nos vizinhos dos vizinhos até que todas as células do domínio sejam verificadas.

6 RESULTADOS E DISCUSSÕES

Este capítulo apresenta os resultados obtidos nas simulações numéricas realizadas no desenvolvimento do presente trabalho, juntamente com discussões desses resultados baseadas em comparações com dados experimentais e trabalhos encontrados na literatura. Duas partes principais dividem este capítulo, validação e chama de spray.

A parte de validação foi necessária para se avaliar o funcionamento do código computacional utilizado neste trabalho. É válido ressaltar que este código teve o seu funcionamento verificado em Fukumasu (2010), em que o método das soluções manufaturadas (Salari e Knupp, 2000) foi utilizado. Assim, nessa parte de validação foi feita a comparação de resultados de simulações com os dados experimentais da chama Sandia/TUD D [Chama D (Flame D, 2010)], a qual corresponde a uma chama monofásica, turbulenta e de difusão, proveniente de um jato circular. Tendo em vista que em Fukumasu (2010) foi feita a avaliação do funcionamento do código com o modelo de turbulência LES, na etapa de validação do presente trabalho foi feita a avaliação desse mesmo código ao considerar o processo de combustão com o uso do modelo de turbulência $k-\varepsilon$ Padrão.

Na segunda parte do capítulo são apresentados os resultados da simulação da chama de spray comparados com os dados experimentais de Masri e Gounder (2010), apresentados no capítulo 3. Esta etapa teve como finalidade avaliar o funcionamento do modelo proposto neste estudo para o cálculo de chamas turbulentas de spray de etanol, sendo que é o objetivo principal do presente trabalho.

6.1 VALIDAÇÃO

A parte de validação do código computacional foi dedicada para a análise do seu funcionamento em simulações de escoamentos reativos com o modelo de turbulência $k-\varepsilon$

Padrão. Para isso, foram realizadas simulações da Chama D. Esta chama, apesar de injetar uma mistura de 25% de metano e 75% de ar, tem o comportamento de uma chama de difusão. Ela foi proposta e caracterizada de forma conjunta pelo laboratório norte-americano *Sandia National Laboratories* e pela Universidade Tecnológica de Darmstadt. Simulações desta chama podem ser encontradas em Barlow e Hinz (1999) que apresentaram resultados de simulações enviadas ao TNF4, *workshop* destinado ao estudo de chamas turbulentas de difusão. Tendo em vista a disponibilidade dos dados experimentais dessa chama, como também, a qualidade de sua caracterização, ela foi escolhida neste trabalho para servir de base de comparação de resultados de simulações numéricas nesta etapa de validação do código computacional. As simulações realizadas nesta etapa foram comparadas com os dados disponíveis em Flame D (2010).

Para a realização da validação foi definido o critério de que o erro dos valores da componente axial de velocidade média da mistura e da fração de mistura ao longo da linha de centro do jato deveria manter-se menor que 20% do bocal de injeção da mistura até uma região distante de 45 diâmetros desse bocal. Esse valor foi definido como aceitável para a realização das simulações propostas nesse trabalho, tendo em vista que as comparações com os dados experimentais foram realizados, nas seções transversais, até essa distância de 45 diâmetros do bocal. A equação (134) ilustra como foi feito o cálculo do erro.

$$erro = \left[\frac{(\psi_m - \psi_s)}{\psi_m} \right] \times 100, \quad (134)$$

onde, ψ_m corresponde ao valor da grandeza proveniente das medições e ψ_s corresponde ao valor da grandeza proveniente das simulações.

6.1.1 MALHA

Para a validação do código computacional foi utilizada uma malha tridimensional, cartesiana, com elementos de tamanho uniforme na região de refino e com elementos com uma taxa de crescimento linear e uniforme nas demais regiões. A Figura 24 apresenta a vista de topo e lateral dessa malha. A opção por esta configuração de malha foi feita após as análises realizadas em Fukumasu (2010) que adotou a configuração apresentada em Mustata et al. (2009).

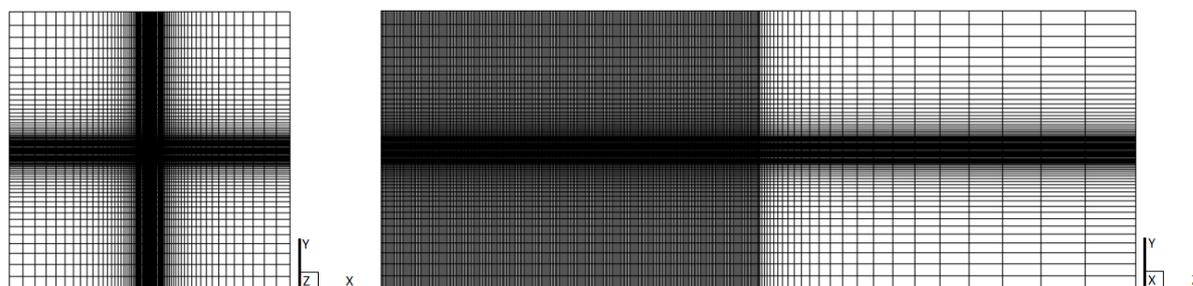


Figura 24: Vista de topo e lateral da malha utilizada para as simulações da chama Sandia/TUD D

O número de elementos utilizados foi de 1.952.000, sendo 252.000 na região de refino com dimensões de $1/8D \times 1/8D$ (em que, D é o valor do diâmetro do bocal de injeção da mistura, para a Chama D este diâmetro tem o valor de 7,2 mm) nas direções transversais e com dimensões variando de $1/8D$ na direção longitudinal até valores maiores devido à zona de crescimento uniforme. A distribuição dos elementos na seção transversal é semelhante para as quatro laterais, sendo: 50 elementos na região de refino com lado de $1/8D$ e 25 elementos em cada região de crescimento linear uniforme com uma razão de 1,11 e lado inicial de $1/8 D$. Na direção longitudinal, os primeiros 280 elementos possuem altura uniforme de $0,19 D$ e a região de crescimento linear uniforme tem uma razão de 1,15 com altura inicial de $0,19 D$. As dimensões do domínio computacional foram $39D \times 39D \times 105D$. Essa dimensão foi definida

de forma a possibilitar soluções estáveis do código computacional, tendo em vista melhor definição da localização das condições de contorno.

Durante o desenvolvimento da validação do código computacional foram realizadas simulações com o código computacional comercial ANSYS FLUENT versão 12.0.16 para a realização de análises paramétricas dos modelos utilizados para a simulação da Chama D. As simulações com o programa comercial foram bidimensionais e axi-simétricas para possibilitar a realização de simulações relativamente rápidas para uma análise paramétrica. Para essas simulações duas malhas foram utilizadas, uma refinada com 52.026 células e outra com as mesmas especificações da malha tridimensional utilizada no código desenvolvido neste trabalho, a qual foi composta por 15.675 células. Ambas as malhas são apresentadas respectivamente na Figura 25 e na Figura 26.

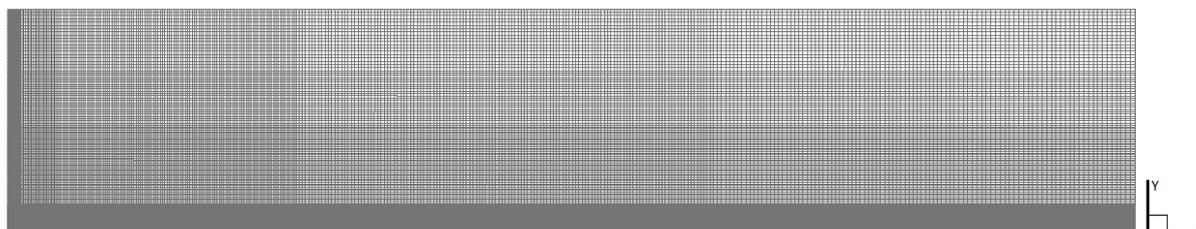


Figura 25: Malha refinada utilizada nas simulações com o programa ANSYS FLUENT

A malha apresentada na Figura 25 apresenta as seguintes especificações: 14 elementos na região de refino com lado de $1/28D$ e 124 elementos na região de crescimento linear uniforme com uma razão de 1,02 e lado inicial de $1/28 D$. Na direção longitudinal, os primeiros 14 elementos possuem altura uniforme de $1/28 D$ e a região de crescimento linear uniforme tem uma razão de 1,005 com altura inicial de $1/28 D$. As dimensões do domínio computacional foram $20D \times 100D$.

Neste capítulo, apesar de as malhas utilizadas no código serem tridimensionais e cartesianas, as coordenadas em que os resultados são apresentados foram referenciadas como radial e axial ao invés de transversal e longitudinal, apenas para simplificar a notação.

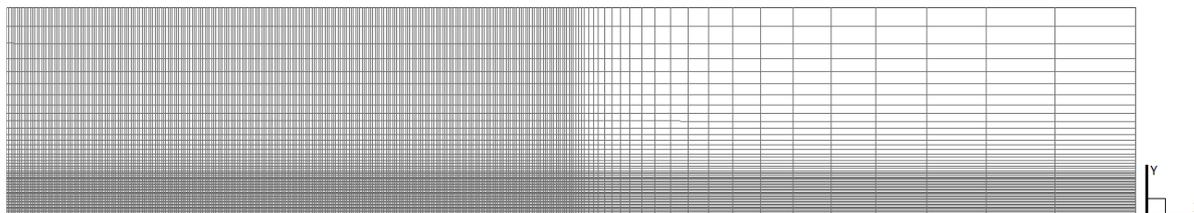


Figura 26: Malha com especificações semelhantes à tridimensional utilizada nas simulações com o código desenvolvido neste trabalho

6.1.2 CONDIÇÕES DE CONTORNO

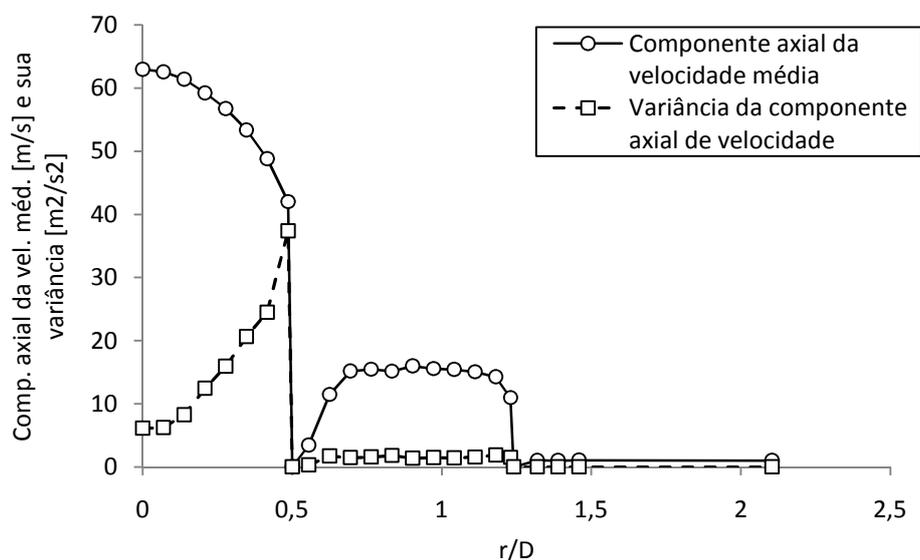


Figura 27: Perfil de velocidade média axial e de flutuação turbulenta axial de velocidade da chama Sandia/TUD D. Adaptado de Flame D (2010).

As simulações da chama Sandia/TUD D realizadas no código computacional desenvolvido neste trabalho tiveram como condições de contorno para a velocidade média o perfil de velocidades levantado a partir dos dados medidos experimentalmente, em que apenas o componente axial desta quantidade teve valor não nulo. Este perfil de velocidades é mostrado na Figura 29. Assim, para a velocidade, como também para as demais grandezas físicas transportadas a condição de entrada foi do tipo Dirichlet em todas as simulações realizadas

neste trabalho, exceto para a pressão. O perfil de velocidades da Chama D foi interpolado linearmente nas faces dos elementos que compõe o plano de entrada do domínio.

As perturbações da velocidade, também apresentadas na Figura 27, serviram para a formulação das condições de contorno para a energia cinética turbulenta, que foi obtida ao se considerar que as flutuações de velocidade nas direções transversais do jato eram desprezíveis. Dessa forma, k e ε foram determinados através das seguintes relações:

$$k = \frac{\sqrt{u_3'^2}}{2} \quad (135)$$

$$\varepsilon = C_\mu^{3/4} \frac{k^{3/2}}{0,07 \left(\frac{D}{2}\right)} \quad (136)$$

A condição de entrada para a pressão não é definida, pois no acoplamento pressão-velocidade PRIME as velocidades nas faces não precisam ser corrigidas, assim o gradiente de pressões na face de entrada é nulo (condição de contorno do tipo Neumann de valor nulo). Essa condição de entrada para a pressão é adotada em todas as simulações desenvolvidas com o código computacional desenvolvido neste trabalho.

As demais faces do domínio são tratadas como saídas de pressão (*pressure outlet*, Fluent (2006)), onde as condições de contorno para a pressão são do tipo Dirichlet (nesse caso com valor nulo). As condições de contorno para as demais quantidades físicas transportadas são do tipo Neumann com valor nulo. Essas condições de contorno também foram adotadas para todas as outras simulações desenvolvidas neste trabalho, exceto para as realizadas com o programa ANSYS FLUENT.

Apesar da Chama D ser estabilizada por uma chama piloto, seus efeitos foram desprezados na simulação. Desse modo, o perfil da fração de mistura na superfície de entrada do domínio é

do tipo *top hat*, sendo que as faces das células que se localizam na saída do jato têm valor unitário e nas demais regiões desta superfície tem valor nulo. Os valores para a variância da fração de mistura foram definidos com interpolações lineares dos dados extraídos de medições experimentais, os quais são fornecidos em Flame D (2010).

Nas simulações com o programa computacional ANSYS FLUENT as condições de contorno na região de entrada da chama para o componente axial da velocidade média, k e ε foram diferentes das utilizadas no código desenvolvido neste trabalho. Devido às dificuldades associadas à interpolação dos perfis de velocidade no programa comercial, as condições de entrada para a velocidade tiveram valores fixos correspondentes ao valor da integração desta quantidade na respectiva área superficial da injeção. Assim, os valores de 49,0 m/s e 11,4 m/s foram utilizados, respectivamente, para o bocal de injeção de mistura e para a região de injeção da chama piloto.

Com a determinação desses valores as condições de k e ε puderam ser encontradas através das relações apresentadas, respectivamente, através das eqs. (137) e (136).

$$k = \frac{3}{2} (U_0 T_i)^2, \quad (137)$$

onde, U_0 é a componente axial da velocidade média na linha de centro na saída do bocal, T_i é a intensidade de turbulência, que neste caso foi calculada de forma aproximada através dos valores apresentados na Figura 27 resultando nos valores de 10,0% para as superfícies do bocal e da chama piloto e 7,0% para a região de entrada de ar auxiliar.

6.1.3 SIMULAÇÕES

Inicialmente, na etapa de validação foram realizadas simulações da Chama D com o código computacional desenvolvido neste trabalho utilizando-se o modelo de turbulência k - ε Padrão,

em que os valores de seus parâmetros foram os mesmos apresentados na seção 4.2. Entretanto, devido às discrepâncias observadas nos resultados dessas simulações em comparação com os dados experimentais foi feito um estudo com o programa comercial ANSYS FLUENT versão 12.0.16 para investigar as potenciais fontes que originaram essas discrepâncias observadas. A opção pelo programa comercial foi feita por ele apresentar a possibilidade da realização de simulações bidimensionais e assim, maior velocidade de processamento do que o código desenvolvido neste trabalho, o que torna este estudo investigativo viável.

Os resultados da simulação da Chama D com o código computacional desenvolvido neste trabalho, juntamente com o estudo investigativo realizado com o programa comercial são apresentados nesta seção na mesma sequência em que os estudos foram realizados na etapa de validação deste trabalho. Ao final desses estudos foi possível identificar os grandes contribuintes das discrepâncias observadas inicialmente na simulação da Chama D com o modelo $k-\varepsilon$ Padrão, a qual é apresentada a seguir.

Os resultados das simulações da Chama D com o código desenvolvido neste trabalho foram coletados quando se admitiu a convergência dos resultados, o que ocorreu próximo a 60.000 iterações. A convergência foi admitida quando os valores das quantidades transportadas variaram menos de 0,05% e os resíduos de cálculo dos sistemas lineares foram inferiores a $1,0 \times 10^{-5}$. A forma de cálculo desses resíduos foi a mesma utilizada em Fukumasu (2010). Essas simulações despenderam aproximadamente 500 horas de simulação em uma máquina SGI® Altix® XE320 com 16 processadores. Em média o passo de tempo de cálculo de ambas as simulações foi da ordem de 10^{-4} s. Em todas as simulações realizadas com o código deste trabalho a compilação foi feita com o programa Intel® Professional Compiler para Linux.

Os resultados dessa primeira simulação são identificados com a legenda “Simulação I”, justamente para simplificar sua identificação nas figuras e as discussões apresentadas no

decorrer do texto. Esses resultados são apresentados nas figuras seguintes juntamente com os resultados das análises feitas com o programa comercial ANSYS FLUENT. A Tabela 3 apresenta um quadro resumo das legendas dessas primeiras análises para facilitar a leitura desta seção.

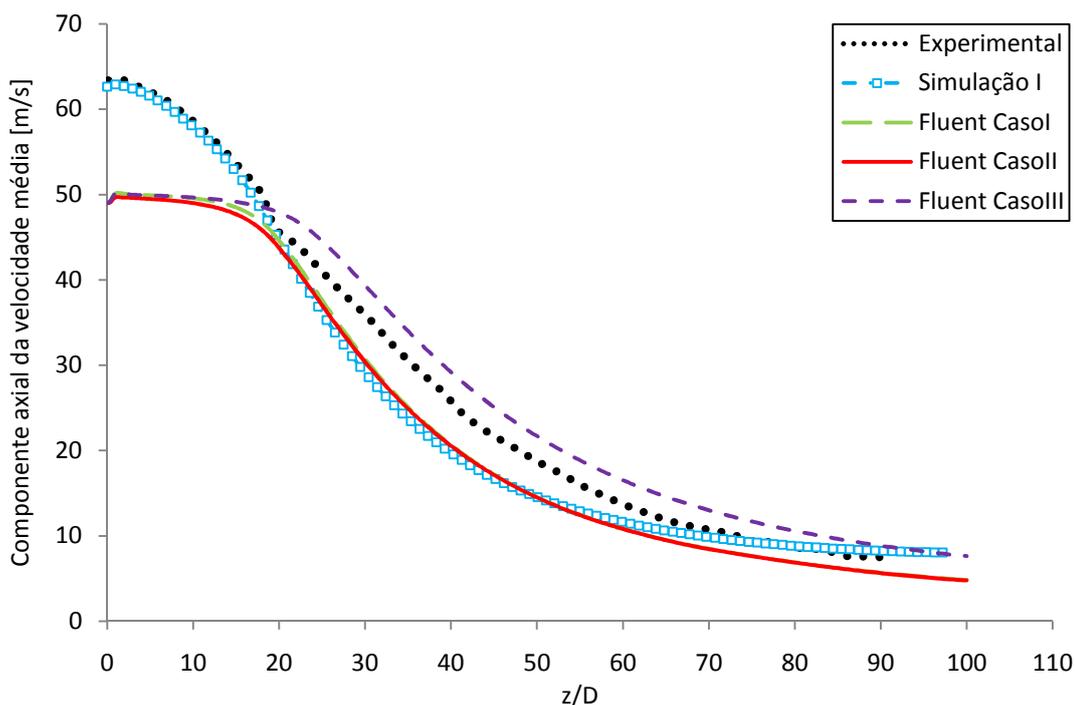


Figura 28: Comparação entre os resultados da simulação e os dados experimentais da componente axial da velocidade

Ao observar a Figura 28, que apresenta comparações de resultados de simulações com os dados de medições experimentais do componente axial de velocidade média ao longo da linha de centro da chama, pode-se notar que os resultados da “Simulação I” se distanciam da curva experimental a partir de uma distância de 20 diâmetros do bocal de injeção da mistura. Esse afastamento também pode ser identificado na Figura 29, que apresenta comparações entre resultados simulados e dados de medições experimentais da fração de mistura média ao longo da linha de centro da chama. Entretanto, boa aproximação pode ser notada a distâncias inferiores a $20 D$.

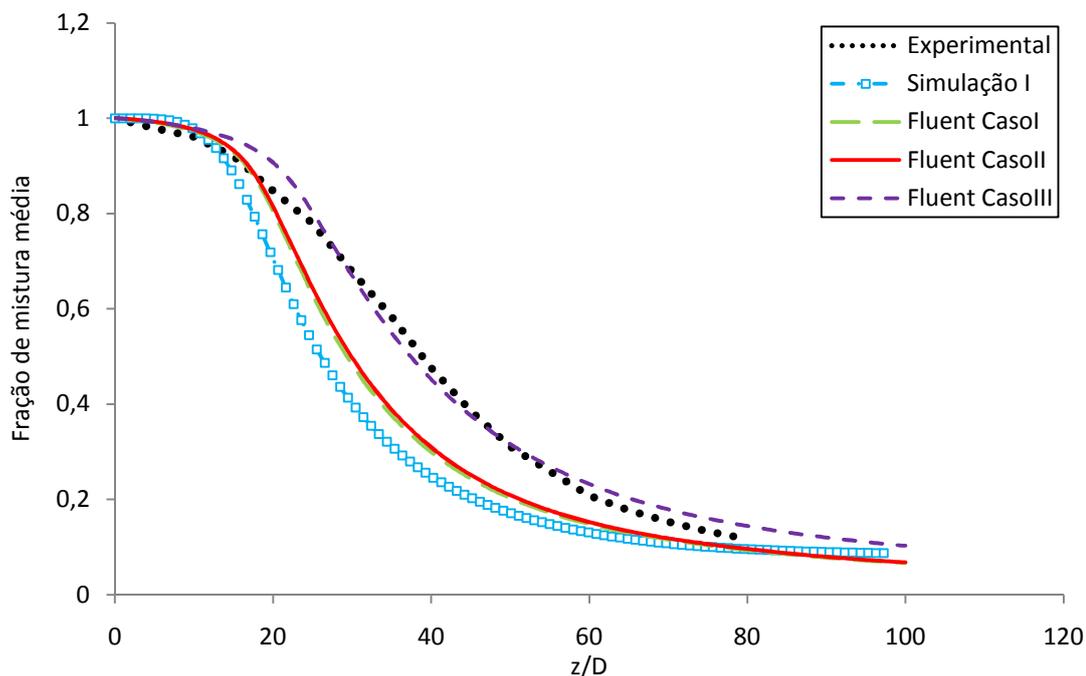


Figura 29: Comparação entre os resultados da simulação e os dados experimentais da fração de mistura

As discrepâncias observadas na Figura 29 podem ser verificadas também na Figura 30, que apresenta os perfis radiais da fração de mistura média em três seções transversais da chama. As seções transversais localizaram-se a distâncias de 15, 30 e 45 diâmetros do bocal de injeção da mistura. É válido ressaltar que comparações entre dados experimentais e resultados de simulações de perfis radiais não foram realizadas para o componente axial da velocidade média por não terem sido encontrados na literatura dados experimentais desses perfis de velocidade média.

Na Figura 30 é claramente observável que a uma distância de $z/D = 15$ do bocal de injeção da mistura boa aproximação em relação aos dados experimentais foi alcançada pelo modelo. Entretanto, a distâncias maiores a diferença entre os resultados da “Simulação I” e os dados experimentais foi crescente, o que é coerente com os resultados observados ao longo da linha de centro da chama (Figura 29). Ainda desses perfis radiais, pode ser verificado que as

maiores discrepâncias são encontradas nas proximidades da linha de centro da chama, sendo que boas aproximações foram encontradas para maiores distâncias da linha de centro.

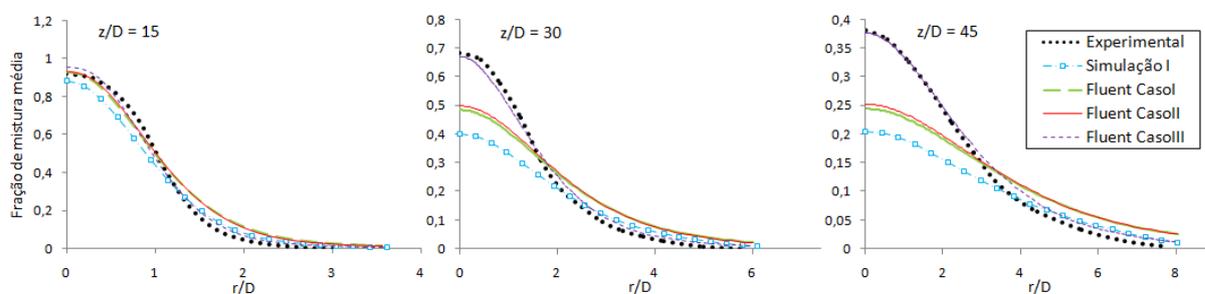


Figura 30: Perfis radiais de fração de mistura média

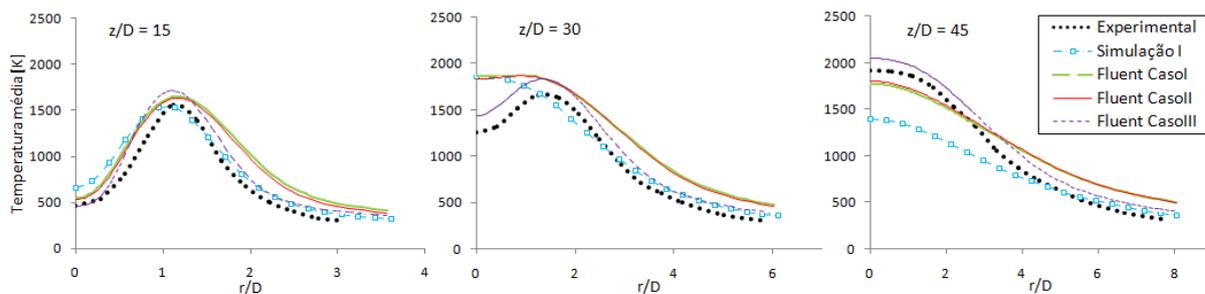


Figura 31: Perfis radiais de temperatura média

A Figura 31 apresenta os perfis radiais de temperatura média nas mesmas seções transversais em que foram apresentados os perfis radiais de fração de mistura média, na Figura 30. Ao relacionar essas duas últimas figuras e, tendo em vista que a fração de mistura estequiométrica da reação da Chama D é de aproximadamente 0,35, pode-se notar que apesar de os efeitos das reações químicas nas quantidades transportadas terem sido modelados com a função β -PDF que também leva em consideração a variância da fração de mistura, há uma forte correlação entre a fração de mistura média e o campo de temperatura média. Essa constatação pode ser verificada observando a localização dos pontos de maior temperatura na Figura 31, que coincidem com os de fração de mistura estequiométrica.

Ao analisar o conjunto de resultados pode-se notar que as quantidades transportadas no escoamento (componente axial de velocidade e fração de mistura) apresentaram valores

inferiores aos observados experimentalmente, a partir de certa distância longitudinal do bocal de injeção de mistura. Esse comportamento mostra que a partir de certa distância do bocal de injeção a simulação superestimou os efeitos difusivos do escoamento. A observação dessa difusão superestimada foi o resultado responsável pelo desenvolvimento dos estudos com o programa comercial ANSYS FLUENT.

Diante dos resultados da “Simulação I”, foi proposto o estudo das principais fontes da difusão superestimada através de um programa comercial para torná-lo viável, tendo em vista o alto custo de tempo de processamento das simulações realizadas com o código desenvolvido neste trabalho. Nesse sentido, o programa ANSYS FLUENT foi selecionado por ter sido de fácil acesso e utilização no LETE (Laboratório de Engenharia Térmica e Ambiental), local onde o presente trabalho foi desenvolvido.

Dentre as eventuais fontes da difusão superestimada, duas foram selecionadas para serem estudadas com o programa comercial: difusão numérica e turbulência superestimada. A difusão numérica foi escolhida pelo fato de a “Simulação I” ter sido realizada com o esquema de discretização dos termos advectivos das equações de transporte do tipo *Upwind* de primeira ordem, que como discutido em Versteeg e Malalasekera (2007) e Maliska (2004) introduz difusão numérica na solução do escoamento. A turbulência superestimada foi selecionada pelo fato de o modelo $k-\varepsilon$ Padrão superestimar a difusão turbulenta, como mencionado por Hinz et al. (1999a).

Inicialmente, foi feita uma simulação com os mesmos modelos e parâmetros da “Simulação I” com o programa ANSYS FLUENT a fim de servir de base de comparação para as simulações subsequentes, tendo em vista as diferenças das simulações feitas com o programa comercial e das feitas no código desenvolvido neste trabalho. As principais diferenças entre os programas relacionaram-se ao fato de as simulações realizadas com o ANSYS FLUENT terem utilizado malhas bidimensionais, discretizações das equações de transporte com formulações de malhas

não estruturadas (o que implica em métodos de interpolação distintos para os valores das propriedades nas faces das células) e malha mais refinada (Figura 25) num primeiro momento. A opção por se utilizar uma malha mais refinada foi feita para buscar a influência da malha nessas investigações. A malha refinada apresentada na Figura 25 foi utilizada nas simulações identificadas como “Fluent Caso I”, “Fluent Caso II” e “Fluent Caso III”.

Tabela 3: Quadro resumo das legendas das primeiras análises

Caso	Descrição
Simulação I	Código próprio com modelo de turbulência padrão e <i>Upwind</i> de 1ª ordem
Fluent Caso I	Semelhante à Simulação I, mas simulado com o ANSYS FLUENT
Fluent Caso II	Alteração da discretização dos termos advectivos da fração de mistura
Fluent Caso III	Alteração do $C_{2\epsilon}$ para 1,80 e <i>Upwind</i> de 1ª ordem em todas equações

Os resultados das simulações com o programa ANSYS FLUENT foram coletados quando se admitiu a convergência dos resultados, o que ocorreu próximo a 200.000 iterações. A convergência foi admitida quando a solução das quantidades variou menos de 0,05% e os resíduos de cálculo dos sistemas lineares foram inferiores a 10^{-5} . Essas simulações despenderam aproximadamente 80 horas em um computador de mesa equipado com um processador AMD® Phenom IV® com quatro processadores, entretanto, esses casos foram monoprocessados.

A simulação que utilizou os mesmos modelos e parâmetros da “Simulação I” foi identificada com a legenda “Fluent Caso I”. A principal fonte de discrepâncias entre essa solução e a da “Simulação I” foi associada à malha mais refinada utilizada na simulação “Fluent Caso I”. As influências associadas ao modelo de combustão e à forma de cálculo das quantidades nas faces das células são discutidas mais adiante.

A primeira fonte de difusão investigada foi a difusão numérica. Os resultados dessa primeira investigação são identificados pela legenda “Fluent Caso II” nas figuras desta seção.

Para investigar a eventualidade da difusão numérica foi feita a substituição da forma de discretização dos termos advectivos da equação de transporte da fração de mistura média para o esquema *Upwind* de 2ª ordem. O fato de apenas essa equação ter sido alterada, enquanto as outras continuaram com o esquema de discretização do tipo *Upwind* de 1ª ordem, foi pelo fato de não ter sido possível a obtenção de uma solução estável ao aplicar o esquema de 2ª ordem nas demais equações de transporte e, da fração de mistura média apresentar marcadamente gradientes elevados logo nas proximidades do bocal de injeção de mistura. Esses gradientes elevados foram provenientes do fato de que essa quantidade variava entre seus valores mínimos e máximos de uma célula de cálculo a outra nas proximidades do bocal, sendo que a fração de mistura média injetada pelo bocal tinha valor máximo, enquanto que logo na região da chama piloto seu valor era nulo. Segundo Versteeg e Malalasekera (2007) os gradientes elevados intensificam a difusão numérica. Nesse sentido, as influências da difusão numérica foram avaliadas apenas pela equação de transporte da fração de mistura média.

Ao observar os resultados das simulações comparados com os dados experimentais ao longo da linha de centro da chama na Figura 28 e na Figura 29 nota-se que não houve diferenças significativas da simulação “Fluent Caso II” em relação à simulação “Fluent Caso I”. Na Figura 30 e na Figura 31 algumas diferenças são encontradas, em que o caso com o esquema *Upwind* de 2ª ordem apresentou um deslocamento sutil em direção aos dados experimentais.

Na investigação da turbulência superestimada os resultados obtidos alteraram-se notadamente em relação aos anteriores, como pode ser visto nas figuras anteriores pela legenda “Fluent Caso III”. Nesta etapa de investigação das eventuais fontes da difusão superestimada foi feita a alteração do valor do parâmetro $C_{2\epsilon}$ de 1,92 para 1,80 segundo o modelo proposto em Hinz et al. (1999a), que procurou reduzir a difusão superestimada na simulação de jatos circulares

com o modelo $k-\varepsilon$ Padrão. Como pode ser notado nas figuras que comparam os valores da fração de mistura média, houve grande aproximação entre os resultados das simulações e os dados experimentais. Na Figura 28 pode ser observado que o componente axial de velocidade foi superestimado por essa alteração. Essas discrepâncias observadas na comparação entre os perfis de velocidade ao longo da linha de centro foram atribuídas ao acoplamento entre as equações de transporte da quantidade de movimento linear média e a fração de mistura média. Certamente, a grande aproximação observada pela fração de mistura e as discrepâncias observadas pela velocidade média mostram que ainda há deficiências no modelo do caso “Fluent Caso III”. Entretanto, tendo em vista que esse estudo com o programa ANSYS FLUENT teve a finalidade de ser investigativo, pode-se concluir que a turbulência superestimada foi a principal fonte de da difusão superestimada observada nas simulações realizadas com os valores padrões dos parâmetros das equações de transporte de k e de ε .

Dentre as eventuais causas desse desacoplamento entre as equações de fração de mistura média e de quantidade de movimento linear média podem ser listadas: a incapacidade do modelo de combustão em calcular corretamente a massa específica da mistura, pois ao observar as comparações entre os perfis de temperatura média na Figura 31 nota-se que esta quantidade foi superestimada pelo modelo de combustão do programa ANSYS FLUENT (modelo de equilíbrio químico com uma única reação global e tratamento estatístico das reações turbulentas feitas por funções do tipo β -PDF); a modelagem incorreta da difusividade da equação de transporte da fração de mistura média. Dessa forma, eventuais possibilidades para melhorar os resultados da simulação com o modelo da simulação “Fluent Caso III” são a alteração do modelo de combustão e análises de variações paramétricas do número de Prandtl turbulento (σ_t) da equação de transporte da fração de mistura, o que alteraria o valor de sua difusividade.

A equação de ε , segundo mencionado em Pope (2000), é melhor interpretada como uma equação empírica e associada ao fluxo de energia cinética turbulenta na cascata de energia turbulenta. Dessa forma, os valores de seus parâmetros, inclusive o $C_{2\varepsilon}$, devem ser definidos de acordo com observações experimentais. Tendo em vista que a dissipação da turbulência comporta-se de forma distinta em escoamentos diferentes, uma equação generalista para ε sempre insere na solução uma discrepância associada ao desvio da dissipação de energia cinética turbulenta do escoamento estudado em relação ao escoamento em que os parâmetros da equação generalista foram ajustados. Entretanto, como observado em Pope (1978) a discrepância associada ao decaimento superestimado da turbulência relaciona-se à anomalia de jatos circulares livres. Neste último trabalho foram apresentadas outras formas de se corrigir essa anomalia alterando os valores dos parâmetros da equação de ε , as quais foram criticadas pela falta de generalidade de aplicação. Assim, Pope (1978) apresentou uma forma genérica para a correção deste problema introduzindo um termo associado ao estiramento de vórtices na equação de ε , em que boas aproximações de jatos foram obtidas para o cálculo de jatos circulares em malhas bidimensionais axi-simétricas. Entretanto, tendo em vista a aplicação mais acessível do modelo de turbulência, a alteração do valor do parâmetro $C_{2\varepsilon}$ de 1,92 para 1,80 foi adotada para as simulações subsequentes, considerando-se que neste presente trabalho apenas simulações de jatos circulares livres foram realizadas.

Após a investigação realizada para se determinar a origem da turbulência superestimada foi feita uma simulação com o código desenvolvido neste trabalho com a alteração do parâmetro $C_{2\varepsilon}$ e aplicando-se o esquema de discretização dos termos advectivos das equações de transporte do tipo TVD/SUPERBEE. Os resultados dessa simulação são identificados com a legenda “Simulação II” nas figuras desta seção. A Figura 32 apresenta os resultados obtidos com essa simulação para os campos das quantidades médias: componente axial de velocidade, fração de mistura e temperatura.

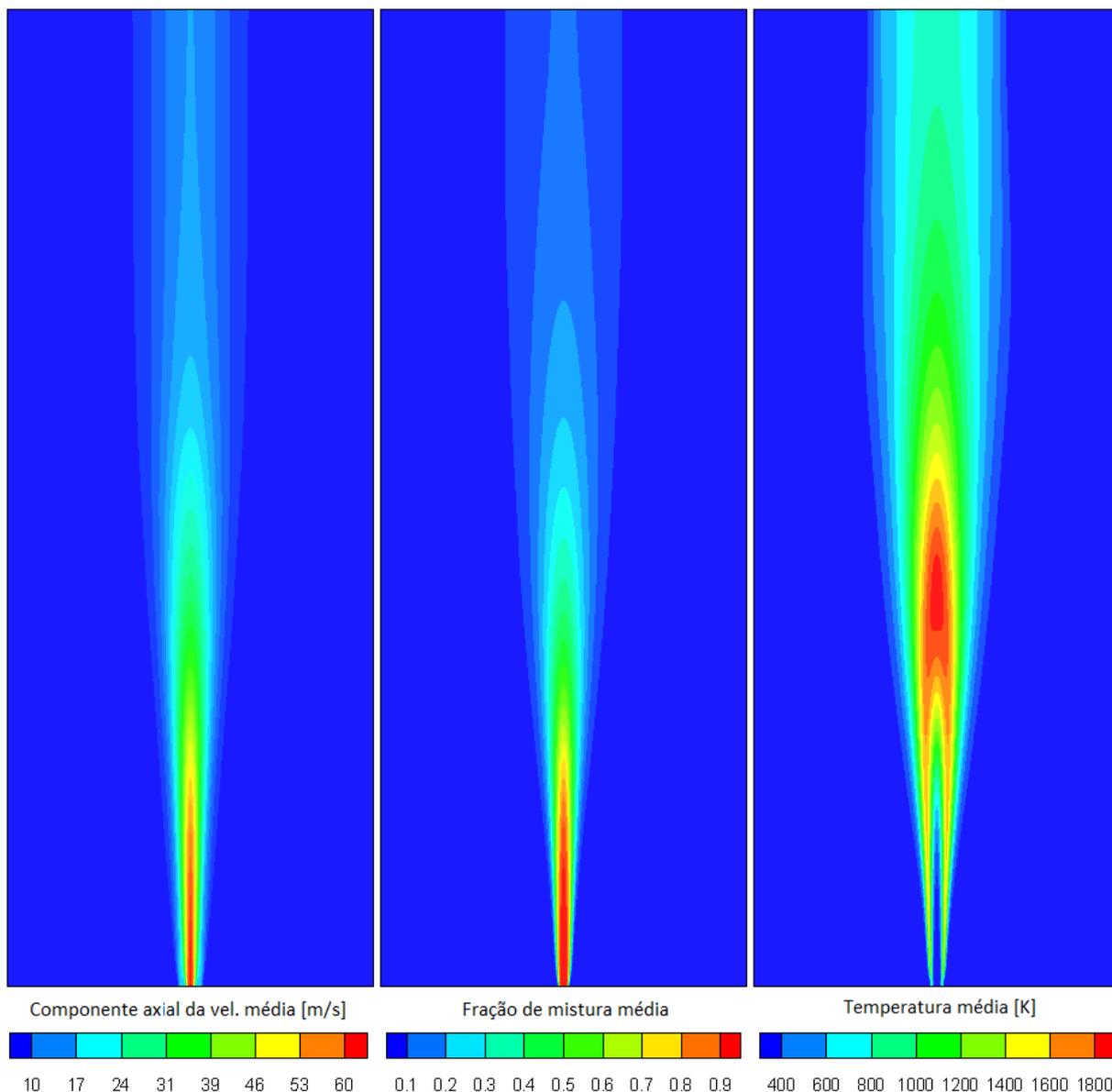


Figura 32: Campos de temperatura, fração de mistura e componente axial de velocidade da "Simulação II"

Ao observar a Figura 33 nota-se que resultados semelhantes para o decaimento do componente axial da velocidade média ao longo da linha de centro da chama foram encontrados em relação aos resultados da simulação "Fluent Caso III". Como observado na Figura 34 os resultados para a fração de mistura média ao longo da linha de centro aproximaram-se mais dos dados experimentais em relação à "Simulação I", porém não alcançaram os resultados obtidos com a simulação "Fluent Caso III". Resultados semelhantes puderam ser observados na Figura 35, que apresenta os perfis radiais da fração de mistura

média nas mesmas seções transversais dos dados apresentados na Figura 30. A Tabela 4 apresenta um quadro resumo desta segunda etapa de simulações.

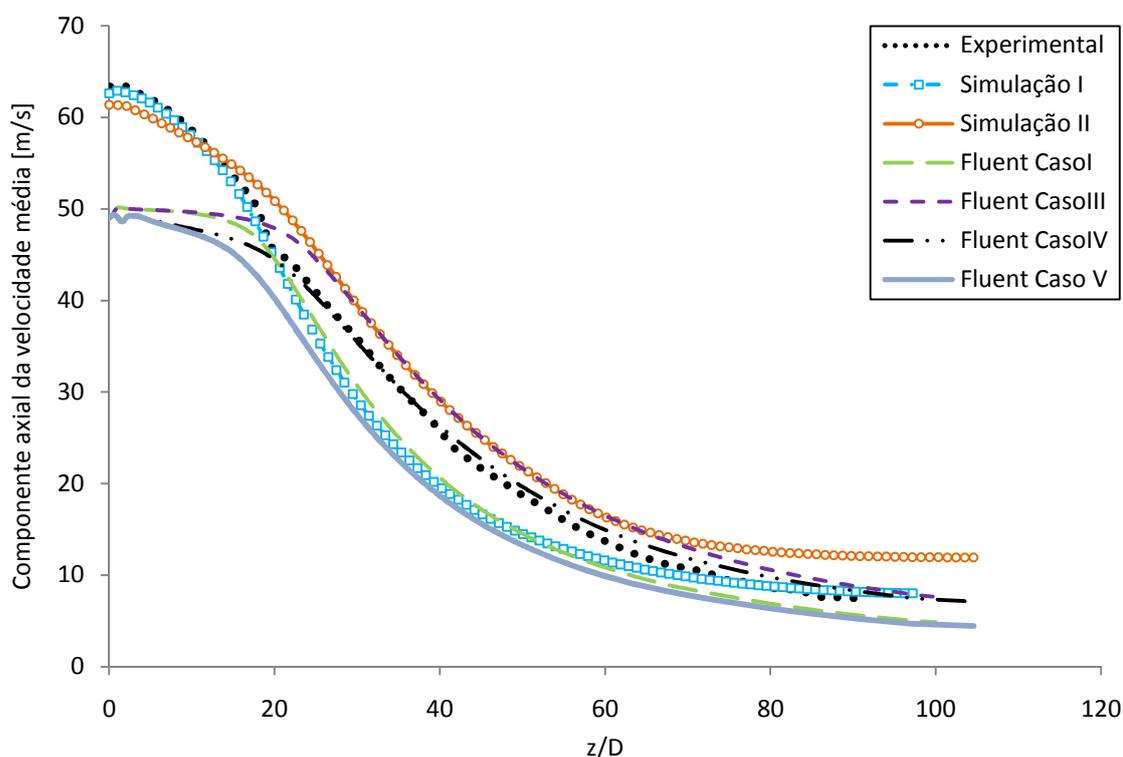


Figura 33: Comparação entre os resultados das simulações corrigidas e os dados experimentais da componente axial da velocidade

Tabela 4: Quadro resumo das legendas da segunda etapa de análises

Caso	Descrição
Simulação I	Código próprio com modelo de turbulência padrão e <i>Upwind</i> de 1ª ordem
Simulação II	“Simulação I” com TVD/SUPERBEE e $C_{2\varepsilon} = 1,80$
Fluent Caso I	Semelhante à Simulação I, mas simulado com o ANSYS FLUENT
Fluent Caso III	Alteração do $C_{2\varepsilon}$ para 1,80 e <i>Upwind</i> de 1ª ordem em todas equações
Fluent Caso IV	“Fluent Caso III” com malha da Figura 26
Fluent Caso V	“Fluent Caso I” com malha da Figura 26

As discrepâncias observadas entre as simulações “Simulação II” e “Fluent Caso III” foram atribuídas à diferença entre as malhas utilizadas em cada uma das simulações. Portanto, para

avaliar essa justificativa e, assim, validar rigorosamente o código foram realizadas simulações com a malha apresentada na Figura 26, que possui as mesmas características geométricas malha usada na “Simulação I” e na “Simulação II”.

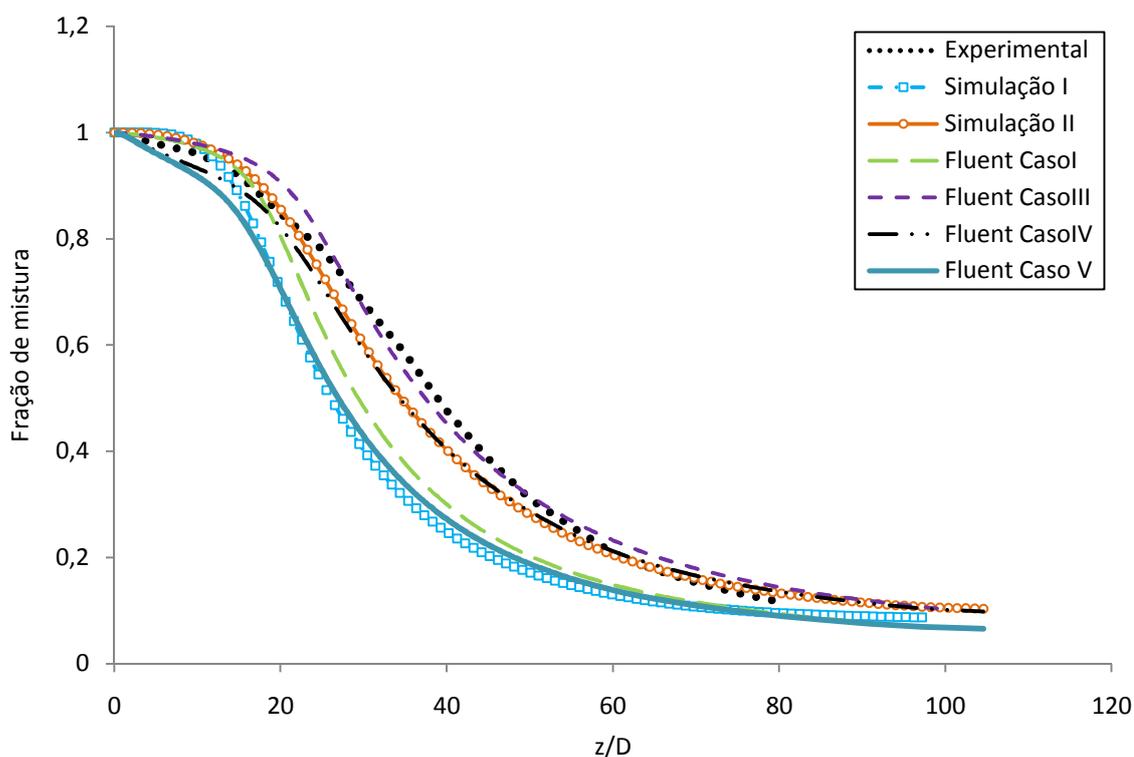


Figura 34 Comparação entre os resultados das simulações corrigidas e os dados experimentais da fração de mistura

Duas simulações foram realizadas com o programa ANSYS FLUENT e com a malha apresentada na Figura 26, uma com os valores padrão dos parâmetros da equação de transporte de ε (“Fluent Caso V”, semelhante ao “Fluent Caso I”) e outra com o parâmetro $C_{2\varepsilon}$ ajustado (“Fluent Caso IV”, semelhante ao “Fluent Caso III”).

Observando-se os resultados da fração de mistura média de “Fluent Caso IV”, nota-se que houve grande aproximação entre seus resultados e os apresentados pela “Simulação II” ao longo da linha de centro da chama, como mostrado na Figura 34, e nos perfis radiais, como mostrado na Figura 35. Semelhantemente, os resultados dessa mesma quantidade para a simulação “Fluent Caso V” comparados com os obtidos na “Simulação I” também apresentam

grande aproximação ao longo da linha de centro (Figura 34) e nos perfis radiais apresentados na Figura 35.

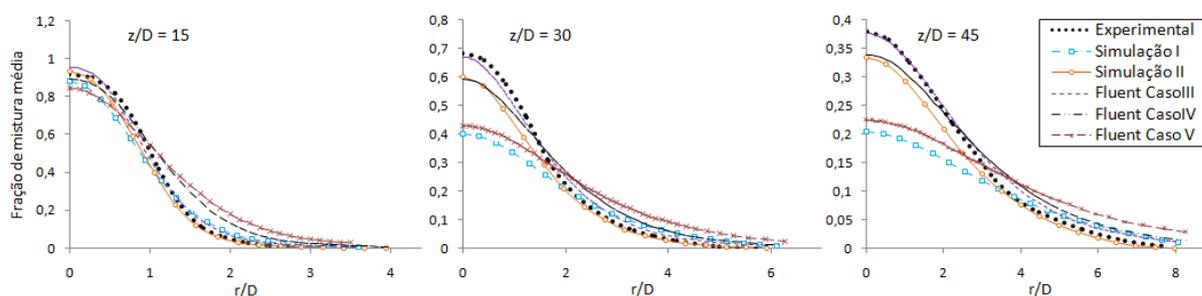


Figura 35: Perfis radiais de fração de mistura média das simulações corrigidas

Ao analisar o comportamento da velocidade ao longo da linha de centro na Figura 33 nota-se que os resultados do caso “Fluent Caso IV” sofreram alterações em relação aos obtidos na simulação “Fluent Caso III”, entretanto não se aproximaram consideravelmente dos resultados da “Simulação II”. Porém, os resultados do caso “Fluent Caso V” além de sofrerem alterações em relação aos obtidos na simulação “Fluent Caso I”, também se aproximaram razoavelmente dos apresentados pela “Simulação I”. Na Figura 33 pode-se observar que a influência da malha no componente axial de velocidade média ao longo da linha de centro entre os resultados dos casos com o modelo de turbulência padrão e com o modelo ajustado é semelhante. As diferenças entre os casos “Fluent Caso IV” e “Fluent Caso III” e entre os casos “Fluent Caso V” e “Fluent Caso I” são muito próximas. A Figura 36 mostra uma comparação dessas diferenças ao longo da linha de centro, em que Vel_{mr} corresponde à velocidade do caso de malha refinada e Vel_{mg} ao caso de malha menos refinada.

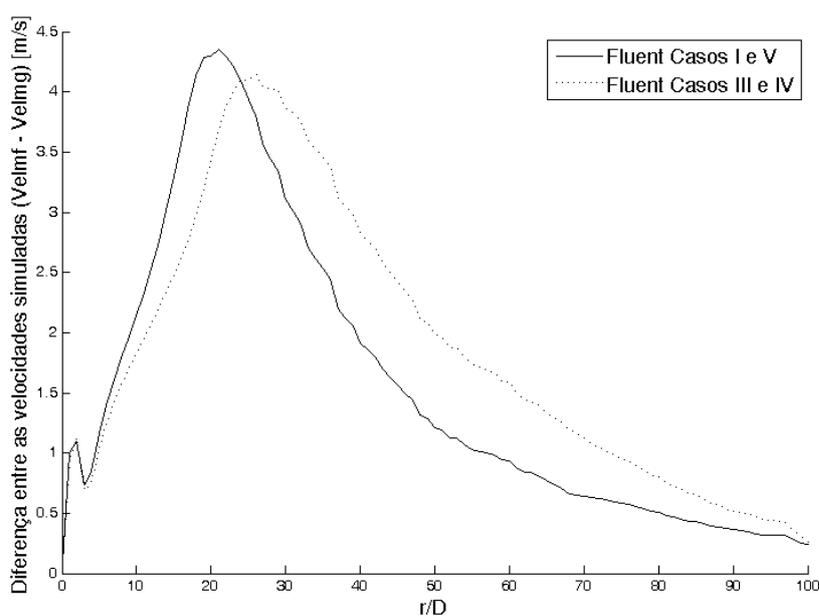


Figura 36: Comparação entre as diferenças de velocidades entre os casos do programa ANSYS FLUENT

A Figura 37 mostra uma comparação semelhante à realizada para as velocidades na Figura 36, porém para a fração de mistura, em que a diferença é definida entre os resultados das malhas mais refinadas (f_{mr}) menos os obtidos com as malhas menos refinadas (f_{mg}).

Ao observar essas duas figuras, nota-se que a influência das malhas nos resultados das simulações é muito semelhante, o que permite a conclusão que o refinamento da malha foi a principal causa de os resultados da “Simulação II” não terem alcançado os da simulação “Fluent Caso III”.

Simulações com malhas mais refinadas que a apresentada na Figura 24 não foram feitas com o código deste trabalho, pois seriam inviáveis no tempo de desenvolvimento deste estudo, tendo em vista o alto custo de processamento que demandariam. É válido ressaltar que o código desenvolvido nesse trabalho não teve como objetivo o baixo custo de processamento, mas sim uma sintaxe didática para permitir o seu uso posterior por outros usuários, o que prejudicou o desempenho dos cálculos.

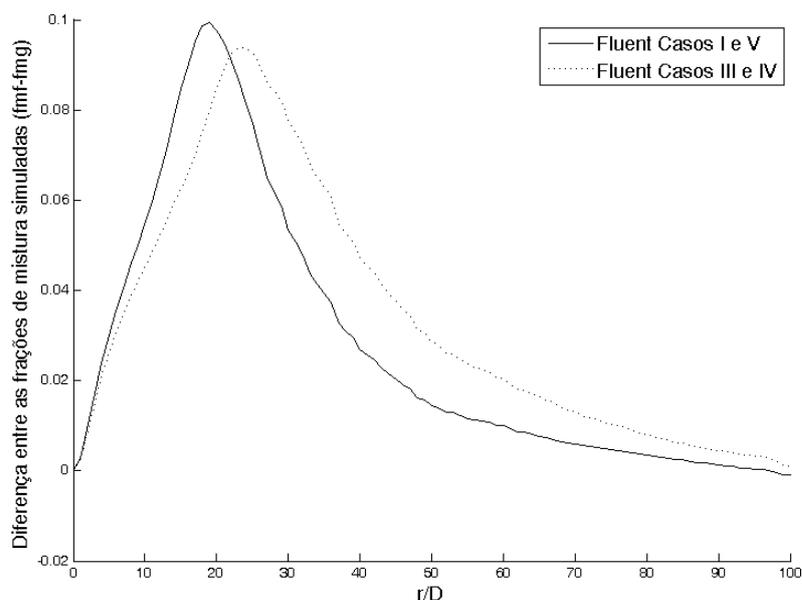


Figura 37: Comparação entre as diferenças de fração de mistura entre os casos do programa ANSYS FLUENT

As diferenças sutilmente maiores entre os casos I e V também podem ser verificadas na Figura 35, em que as simulações do caso V apresentam-se levemente superestimadas em relação ao caso I e mesmo em relação à “Simulação I”.

A partir dos resultados da Figura 36 e da Figura 37 nota-se que as velocidades na malha mais grosseira foram menores que as da malha mais refinada, o que permite concluir que a malha mais grosseira introduziu difusão numérica na solução. Essa difusão numérica provém do fato de os erros de conservação das quantidades transportadas na malha mais grosseira serem mais pronunciados que na refinada. Esses erros apresentam valores numéricos maiores quando as quantidades transportadas também apresentam valores numéricos maiores, o que tornam os erros de conservação mais pronunciados como pode ser visto entre os resultados do modelo de turbulência ajustado na Figura 36, que mostra erros de valores mais elevados que na comparação entre os casos do modelo de turbulência não ajustado nessa mesma figura. Tendo em vista que com o ajuste do modelo de turbulência a dissipação de turbulência aumenta, a

velocidade média do escoamento também aumenta. Essas mesmas observações também podem ser extraídas da Figura 34 e da Figura 37 para a fração de mistura média.

A maior diferença entre as simulações “Fluent Caso IV” e “Simulação II” do que a entre as simulações “Fluent Caso V” e “Simulação I” podem ser justificadas, pelas diferenças entre as condições de contorno das simulações realizadas com o programa ANSYS FLUENT e das realizadas com o código deste trabalho.

Como mencionado no item 6.1.2 a velocidade de injeção da mistura no programa comercial foi obtida pela integração do perfil de velocidades obtido experimentalmente na superfície do bocal de injeção, dividida pela sua área. Isso garantiu que a mesma vazão de mistura medida experimentalmente fosse injetada na simulação. Entretanto, essa abordagem faz com que valores menores para velocidades sejam definidos como condição de contorno nas proximidades da linha de centro da chama em relação aos medidos experimentalmente, o que introduz discrepâncias nas simulações. Nas proximidades do bocal de injeção, os valores das velocidades foram nitidamente menores devido a esta abordagem, sendo que estas diferenças se esvaneceram quando a chama atingiu a região de auto-similaridade. Apesar de que, inicialmente, como pode ser visto nas figuras que apresentam resultados ao longo da linha de centro, o decaimento da velocidade do programa comercial foi menor que o das simulações do código deste trabalho, os valores dessa quantidade foram menores, o que deslocou a curva da região de auto-similaridade para valores menores. Isso foi intensificado na malha grosseira quando as quantidades transportadas tiveram maior intensidade por introduzirem maior difusão associada a não conservação das quantidades transportadas, como foi o caso da simulação “Fluent Caso IV” em que o modelo de turbulência foi ajustado. Portanto, maiores diferenças entre as simulações “Fluent Caso IV” e “Simulação II” do que a entre as simulações “Fluent Caso V” e “Simulação I” foram encontradas para o componente axial de velocidade média.

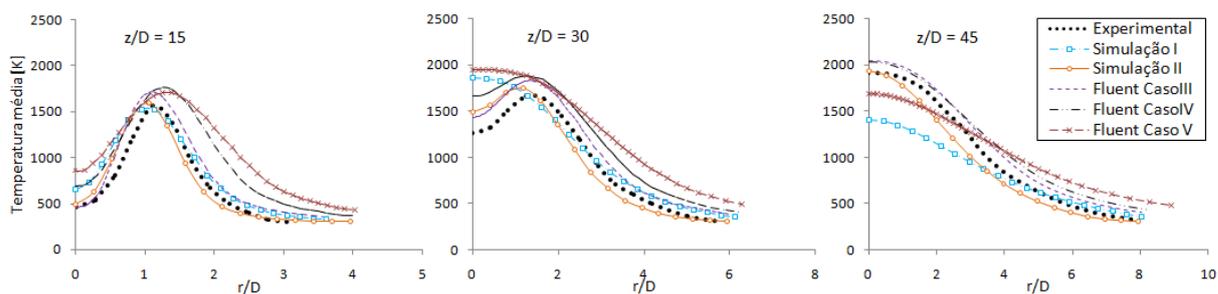


Figura 38: Perfis radiais de temperatura média das simulações corrigidas

Ao observar os resultados dos perfis de temperatura nas seções transversais a 15, 30 e 45 diâmetros de distância do bocal de injeção de mistura, nota-se que o modelo de equilíbrio químico proposto pelo programa ANSYS FLUENT superestimou o campo de temperaturas médias de forma mais acentuada que o modelo de folha de chama utilizado no código deste trabalho. Estas discrepâncias estão associadas com o modelo de combustão, tendo em vista que os perfis de fração de mistura apresentaram boa aproximação entre as simulações correlatas, como mostrado na Figura 35. No entanto, ao comparar os resultados da Figura 35 com os da Figura 38, observa-se forte relação entre os resultados da temperatura com os da fração de mistura. Assim, nota-se que apesar da dependência da variância da fração de mistura na determinação da temperatura, esta está fortemente correlacionada com a fração de mistura. A Figura 39 apresenta os perfis da temperatura média ao longo da linha de centro da chama para todos os casos simulados nesse trabalho para a Chama D. Nesta figura pode-se notar claramente que os valores das temperaturas obtidas com o programa ANSYS FLUENT superestimaram de forma ligeiramente mais acentuada os dados experimentais do que os obtidos com o código desenvolvido neste estudo. Nota-se claramente que os casos que tiveram o modelo de turbulência ajustado apresentaram resultados mais próximos dos dados experimentais, tanto os realizados na malha refinada, quanto os realizados na malha grosseira.

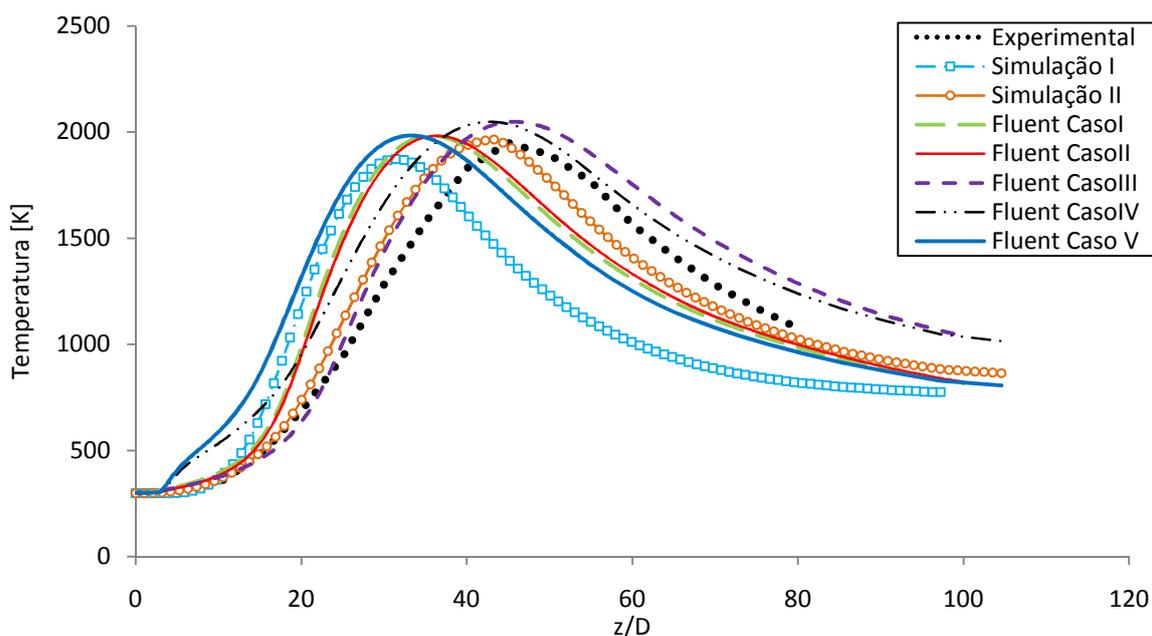


Figura 39: Perfis de temperatura média ao longo da linha de centro da chama

Ao analisar os resultados dos campos de temperatura, verifica-se que as influências do modelo de combustão nas simulações não foram tão impactantes como as alterações de malhas e modelo de turbulência. Assim, a modelagem da combustão não influenciou de forma considerável os resultados obtidos nas simulações apresentadas.

O programa comercial diferencia-se do código deste trabalho no cálculo das quantidades nas faces das células, sendo que no primeiro, por utilizar discretizações das equações baseados em métodos usados em cálculos com malhas não estruturadas, os valores das propriedades nas faces das células são calculados com interpolações de segunda ordem. No código desenvolvido neste trabalho os valores das quantidades nas faces das células não são interpolados na posição geométrica das faces, como feito diretamente em esquemas de discretização de malhas não estruturadas (Maliska, 2004). No caso do código em questão, foi utilizado o método CDS que atribui ao valor da quantidade na face de uma célula o resultado da interpolação desta quantidade no ponto médio definido entre os centros das células vizinhas, tendo em vista que foi utilizado o arranjo co-localizado e as variáveis são armazenadas no centro das células. Esta abordagem introduz a distorção da malha de cálculo

apresentada em Patankar (1980) para casos onde malhas que possuem regiões de refino. Porém, no desenvolvimento deste estudo admitiu-se que os erros devido a esta distorção não afetariam consideravelmente a solução. Ao observar os resultados apresentados nesta seção que se mostraram influenciados predominantemente pelo modelo de turbulência e pela malha de células, pode-se constatar que o pressuposto adotado para a distorção da malha de cálculo foi aceitável.

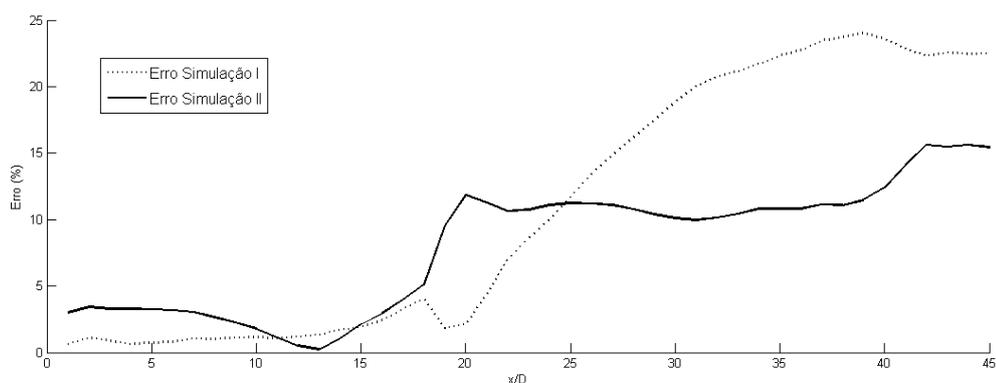


Figura 40: Análise do erro ao longo da linha de centro da chama para a componente axial de velocidade média

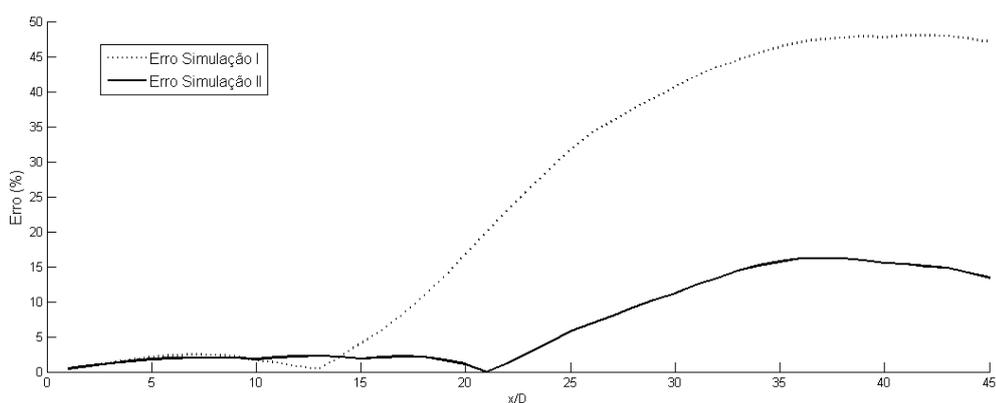


Figura 41: Análise do erro ao longo da linha de centro da chama para a fração de mistura média

Ao analisar os resultados apresentados na Figura 40 e na Figura 41 que apresentam análises do erro [calculado segundo a equação (134)] da “Simulação I” e da “Simulação II” para a componente axial da velocidade média, como também para a fração de mistura média, observa-se que os erros obtidos foram inferiores a aproximadamente 15% para a “Simulação II” em ambas as variáveis. Assim, os resultados da “Simulação II” atenderam o critério de validação definido nesse estudo, o que permite concluir que o código computacional desenvolvido neste trabalho foi validado. Nota-se, com esses resultados e com os demais apresentados nesta seção, que a modelagem da turbulência foi a principal responsável pelas discrepâncias observadas entre os resultados da “Simulação I” e os dados experimentais. A realização de simulações com o programa ANSYS FLUENT com uma malha de características semelhantes à utilizada no código deste trabalho tornou possível, também, certificar o funcionamento deste código.

Tendo em vista os potenciais responsáveis pelas discrepâncias observadas nos resultados das simulações, apesar da existência de certa difusão numérica introduzida pela falta de refinamento da malha, nota-se que os seus efeitos nos resultados foram muito menores que os associados à modelagem da turbulência. Dessa forma, nota-se que os efeitos da malha nas simulações não prejudicaram o procedimento de cálculo de forma significativa.

6.2 CHAMA DE SPRAY

A simulação de uma chama de spray turbulenta é o tema do presente trabalho.

Após a realização da validação do código computacional foi feito o estudo da chama turbulenta de spray de etanol. Os ajustes e correções estudados na parte de validação foram adotados nas simulações da chama de spray. Nesse sentido, a alteração do valor do parâmetro $C_{2\varepsilon}$ de 1,92 para 1,80 foi feita no código utilizado nas simulações da chama de spray.

Assim, nesta seção são apresentados os resultados obtidos com os modelos implementados para a modelagem da chama turbulenta de spray de etanol apresentada em Masri e Gounder (2010).

6.2.1 MALHA

Para a realização das simulações da chama de spray foi utilizada uma malha tridimensional, cartesiana, com elementos de tamanho uniforme na região de refino e com elementos com uma taxa de crescimento linear e uniforme nas demais regiões. A opção por este tipo de malha foi proveniente das análises realizadas na etapa de validação desse estudo. O número de elementos utilizados foi de 1.837.000, sendo 626.688 na região de refino com dimensões de $1/16D \times 1/16D$ (nesse caso D tem o valor de 10,5 mm) na seção transversal e altura variando de $1/16D$ até dimensões maiores devido a região de crescimento linear. A distribuição dos elementos na seção transversal é semelhante para as quatro laterais, sendo: 48 elementos na região de refino com lado de $1/16 D$ e 15 elementos em cada região de crescimento linear uniforme com uma razão de 1,3 e lado inicial de $1/16 D$. Na direção longitudinal, os primeiros 272 elementos possuem altura uniforme de $0,17 D$ e a região de crescimento linear uniforme tem uma razão de 1,12 com lado inicial de $0,17 D$. As dimensões do domínio computacional foram $37D \times 37D \times 97D$. A Figura 42 apresenta a vista de topo e lateral da malha utilizada.

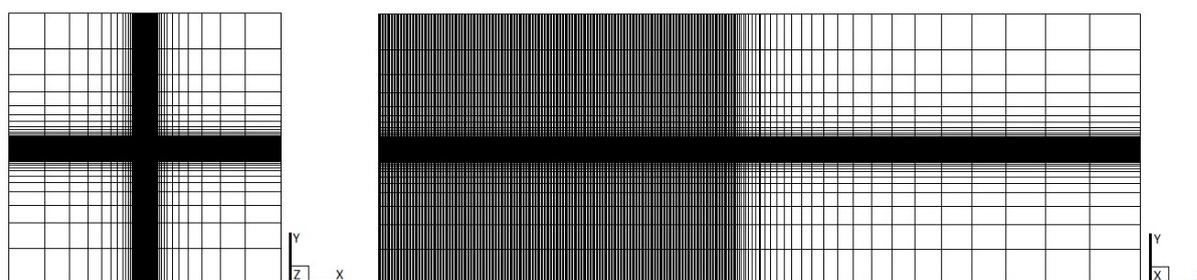


Figura 42: Malha utilizada para a simulação de sprays

6.2.2 CONDIÇÕES DE CONTORNO

Na região de entrada, as condições de contorno foram extraídas dos dados experimentais da chama de spray.

As velocidades na região de entrada foram interpoladas linearmente a partir dos perfis definidos pelos dados experimentais apresentados na Figura 43. É válido ressaltar que as condições de contorno para as velocidades apenas compreenderam o componente axial da velocidade média, tanto para a fase gasosa, quanto para a fase líquida. Sendo que os demais componentes de velocidade foram definidos com o valor nulo na região de entrada.

Os valores da energia cinética turbulenta foram calculados das flutuações de velocidade medidas experimentalmente (apresentadas na Figura 43) com a equação (135). A partir dos valores calculados para a energia cinética turbulenta desta chama de spray, a equação (136) foi utilizada para calcular ε .

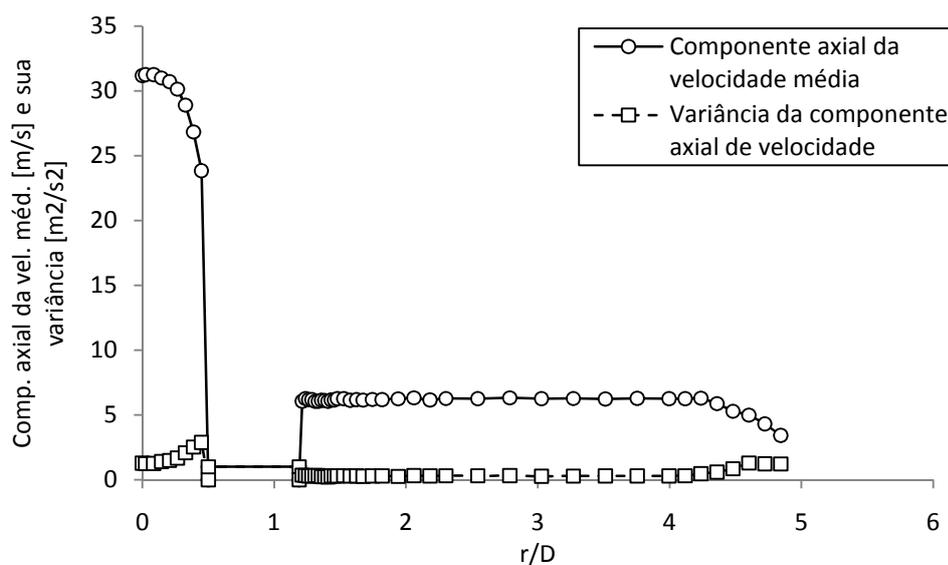


Figura 43: Perfil de velocidade média axial e de flutuação turbulenta axial de velocidade da chama turbulenta de spray de etanol. Adaptado de Masri (2009).

A fração de mistura teve como condição de contorno uma função do tipo “*top hat*” com valor de 0,12 na região do bocal de injeção do spray e valor nulo nas regiões da chama piloto e da entrada de ar auxiliar. O cálculo das condições de contorno para a variância da fração de mistura foi definido através da equação (138) devido à ausência de medições experimentais dessa quantidade.

$$\widetilde{f''^2} = f(1 - f). \quad (138)$$

A equação (138) corresponde ao valor limitante superior da variância da fração de mistura. Tendo em vista que a fração de mistura só não é nula na região do bocal, a sua variância também foi representada com uma função do tipo “*top hat*” na região de entrada do domínio com o valor de 0,10 na região do bocal. A condição de contorno para a pressão na região de entrada foi do tipo Neumann com valor nulo.

A injeção de gotículas no domínio de cálculo foi feita com o uso de um lançador aleatório. Esse lançador utilizou variáveis aleatórias de distribuição uniforme para definir a posição de lançamento e o diâmetro de cada uma das gotículas injetadas no domínio.

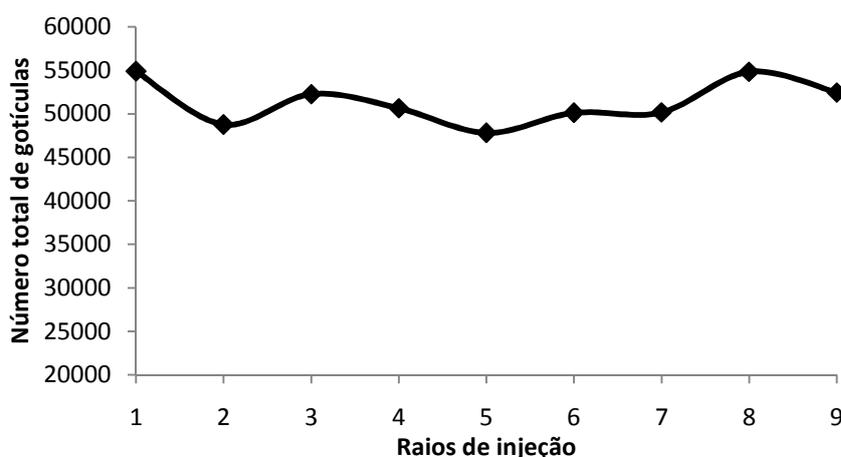


Figura 44: Distribuição de número de gotículas de cada uma das curvas de injeção apresentadas em Masri e Gounder (2010).

A posição de lançamento das gotículas é definida em coordenadas polares. O lançador seleciona um ângulo de lançamento e uma distância radial entre linha de centro do spray e a borda do bocal de injeção. O ângulo de lançamento é selecionado por uma variável aleatória (de distribuição uniforme) pertencente aos números naturais de 1 a 100, que seleciona arcos uniformemente espaçados. Assim, neste trabalho há 100 ângulos de lançamento de gotículas, os quais são uniformemente espaçados em $3,6^\circ$. Os raios de lançamento foram os mesmos definidos nas medições de distribuição de tamanhos de gotículas realizadas em Masri e Gounder (2010), cujos resultados são apresentados na Figura 7. Dessa forma, nove raios foram definidos para os lançamentos. Porém, para a seleção desses raios foi necessária a determinação do número de gotículas injetadas em cada uma das curvas de distribuição apresentadas na Figura 7. Essa necessidade foi encontrada para que o lançador possa reproduzir as mesmas distribuições de número de gotículas medidas experimentalmente. Assim, foi determinada a distribuição de número de gotículas apresentada na Figura 44.

Após a definição da posição de lançamento, o algoritmo determina o diâmetro e a velocidade da gotícula. A determinação do diâmetro foi feita aleatoriamente seguindo as curvas de distribuição de tamanhos, Figura 7, as quais são associadas aos raios de lançamento. Entretanto, apenas com as curvas de distribuição de tamanhos de gotículas não seria possível fazer a injeção aleatória seguindo essas próprias distribuições. Desse modo, foi necessária a definição de curvas da fração mássica de gotículas menores que um diâmetro definido (que pode ser chamada de fração mássica acumulada) em função deste próprio diâmetro, provenientes das distribuições apresentadas na Figura 7. As curvas de frações mássicas acumuladas são semelhantes às necessárias para a obtenção de funções de distribuição de Rosin-Rammler (Kuo, 1986). As curvas obtidas para o desenvolvimento do presente estudo são apresentadas na Figura 45 para cada uma das curvas de injeção apresentadas na Figura 7.

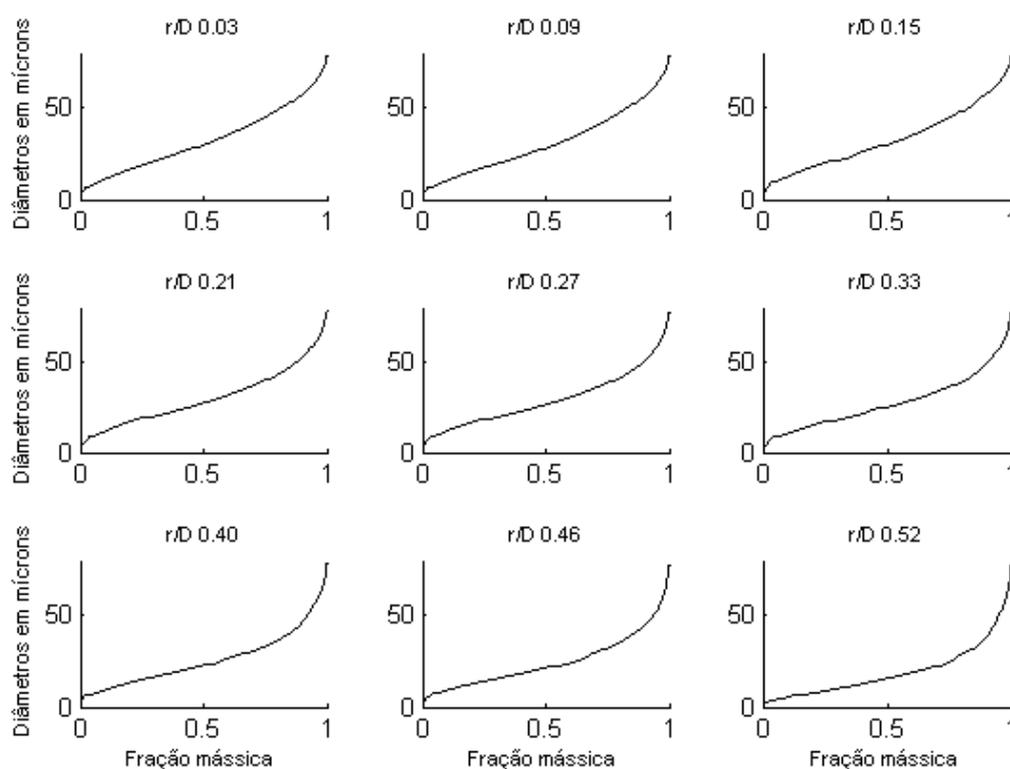


Figura 45: Relação entre os valores de diâmetros de gotículas e as suas frações mássicas.

Após a obtenção das curvas de fração mássica acumulada o algoritmo de lançamento utiliza uma variável aleatória uniformemente distribuída, com valores entre 0 e 1, para representar a fração mássica acumulada. Desse modo, com as curvas apresentadas na Figura 45, a fração mássica acumulada aleatória determina os diâmetros da gotícula a ser lançada obedecendo às curvas de distribuição obtidas experimentalmente. A Figura 46 apresenta uma comparação entre as distribuições de tamanhos de gotícula que resultaram deste procedimento de cálculo e as obtidas experimentalmente.

De acordo com o diâmetro e a posição de lançamento de cada gotícula foi apresentado em Masri e Gounder (2010) um valor do componente axial de velocidade média, como pode ser verificado na Figura 6 para a posição axial x/D 0,3. Este valor foi então atribuído como velocidade inicial da gotícula.

No algoritmo de lançamento, o número de gotículas lançadas em cada intervalo de tempo de cálculo da fase gasosa é o suficiente para que a massa líquida injetada corresponda à massa injetada experimentalmente neste mesmo intervalo de tempo. Assim, de acordo com os intervalos de tempo de cálculo utilizados nas simulações realizadas neste estudo, que serão apresentados na próxima seção, o número de gotículas lançadas em cada passo de tempo (próximos a $1,0 \times 10^{-5}$ s) foi de aproximadamente 500.

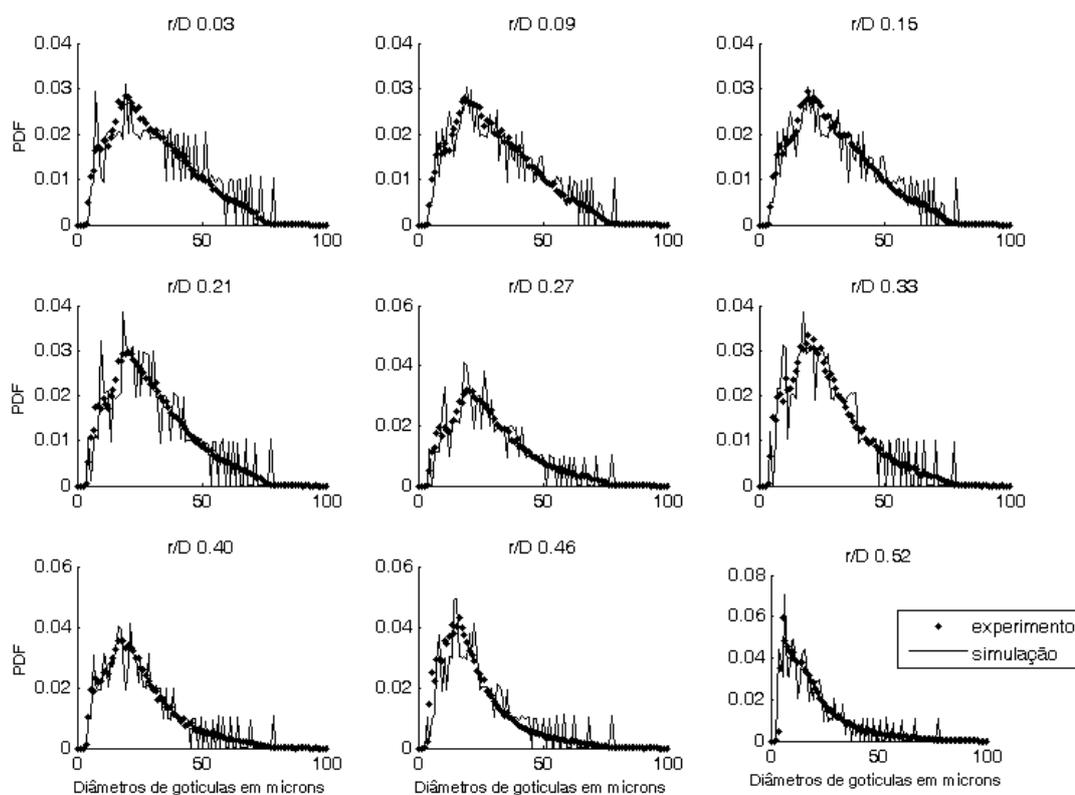


Figura 46: Distribuições de tamanho de gotículas injetadas no domínio de cálculo

A condição inicial de temperatura das gotículas foi de 298,15K, sendo que a distribuição dessa temperatura no interior da gotícula é uniforme no modelo adotado (item 4.4.2).

6.2.3 SIMULAÇÕES

Nesta seção os resultados das simulações da chama turbulenta de spray de etanol são apresentados e discutidos.

Os resultados da simulação foram coletados quando se admitiu a convergência, o que ocorreu próximo a 65.000 iterações. Como mencionado por Chrigui et al. (2010a), não há uma forma universal para se selecionar um critério de convergência em casos de acoplamento de métodos do tipo Euler-Lagrange. Comumente admite-se a convergência quando as propriedades da mistura não variam, consideravelmente, de uma iteração a outra. Portanto, neste estudo a convergência foi admitida quando a solução das quantidades variou menos de 0,05% e os resíduos de cálculo dos sistemas lineares foram inferiores a $1,0 \times 10^{-5}$ s. A forma de cálculo desses resíduos é a mesma que foi utilizada em Fukumasu (2010).

A solução da simulação despendeu aproximadamente 1000 horas de simulação em uma máquina SGI® Altix® XE320 com 16 processadores. Entretanto, é válido ressaltar que o aumento na velocidade de processamento conseguido como método de processamento paralelo OpenMP™ na simulação da chama de spray foi menor que 2 vezes. Pois, as rotinas associadas à fase dispersa não foram paralelizadas. Em média o passo de tempo de cálculo da simulação foi da ordem de $1,0 \times 10^{-5}$.

A Figura 47 apresenta a comparação dos resultados do componente axial de velocidade média de cinco faixas de diâmetros de gotículas da simulação com os dados experimentais em quatro seções transversais distanciadas do bocal de injeção do spray em $0,3D$, $10D$, $20D$ e $30D$. A partir dessa figura, nota-se que as maiores discrepâncias entre os resultados foram mostradas pelas gotículas de menor diâmetro.

Nas proximidades do bocal de injeção as gotículas de maiores diâmetros apresentam aproximação razoável dos dados experimentais. Entretanto, pode ser observado que as discrepâncias entre os resultados da simulação com os dados experimentais crescem conforme

a distância da seção transversal do bocal cresce. Nas seções transversais distantes a $0,3D$ e $10D$ do bocal verifica-se que as diferenças entre velocidade calculadas e as medidas aumentam quando as comparações são feitas a maiores distâncias da linha de centro da chama de spray. Esse comportamento é mais sutil na seção transversal distante em 20 diâmetros do bocal e não percebido na seção mais avançada na chama. Em especial nas comparações realizadas em $z/D = 10$, boa aproximação entre os resultados calculados em comparação com os dados medidos foi obtida nas proximidades da linha de centro da chama para todas faixas de diâmetros de gotículas.

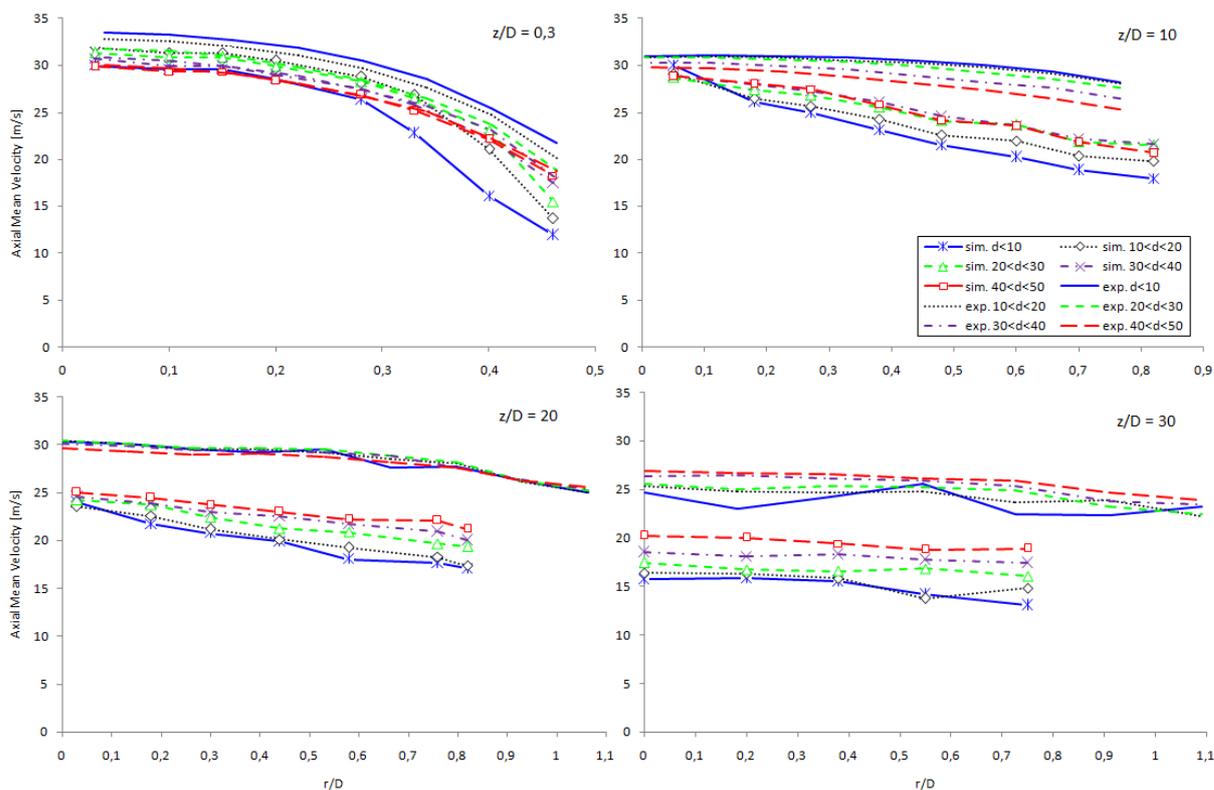


Figura 47: Comparação dos resultados do componente axial da velocidade média das gotículas obtidos na simulação com dados experimentais.

É importante observar que as gotículas de menor tamanho possuem menor tempo de relaxação que gotículas maiores, como apresentado na equação (58). O tempo de relaxação corresponde ao intervalo de tempo que a gotícula leva para que sua velocidade seja a mesma da fase

dispersante. Esse parâmetro mostra que as gotículas menores possuem menor inércia quando comparadas às maiores. Assim, gotículas menores tendem a ser mais influenciadas por forças dinâmicas do escoamento, e, portanto, acabam sendo carregadas pelo movimento da fase gasosa. Isso ocorre com as gotículas de diâmetro menor que $10\ \mu\text{m}$ neste caso, como mencionado por Masri e Gounder (2010). Dessa forma, avaliando apenas os dados experimentais da Figura 47, pode-se verificar que, em regiões próximas ao bocal, as velocidades da fase gasosa são maiores que as velocidades das gotículas. Esse comportamento se inverte a uma distância de $30D$ do bocal. Entretanto, o componente axial das velocidades médias de ambas as fases são quase iguais a uma distância de $20D$ do bocal. Essa distribuição de velocidades, observada experimentalmente, não é observada nas simulações. Na realidade, as gotículas de maior tamanho se mantêm com velocidades mais altas que as de menor tamanho durante todo o escoamento, como mostrado na Figura 47, com exceção a região localizada nas proximidades da linha de centro do spray na seção transversal de $z/D = 10$. Esse comportamento observado nos resultados das simulações mostra que as velocidades da fase gasosa foram subestimadas.

A singularidade observada na Figura 47, em que há uma aproximação dos resultados da simulação com os dados experimentais nas proximidades da linha de centro na seção transversal de $z/D = 10$, é explicada por deficiências do modelo de combustão utilizado nessas simulações. O modelo de folha de chama, conforme apresentado na seção 4.3.1, sempre considera a reação quando o valor da fração de mistura estequiométrica aparece no campo do escoamento. Com o tratamento estatístico das reações turbulentas os valores das quantidades provenientes do modelo de combustão são atenuados com a variância da fração de mistura através da função β -PDF. Entretanto, quando a fração de mistura estequiométrica é atingida no escoamento, valores elevados de temperatura são atingidos, o que pode ser visto na Figura 18 e na Figura 19, apesar de atenuados pela função β -PDF. Dessa forma, quando as gotículas

cruzam a região de temperaturas elevadas nas proximidades do bocal, conforme mostrado na Figura 48, elas têm alta taxa de evaporação. Conseqüentemente, com essa alta taxa de evaporação, muita massa de combustível é injetada na fase gasosa o que acaba por aumentar os valores do termo fonte associado à evaporação da equação de transporte de quantidade de movimento linear, equação (84). Como resultado, o aumento desse termo fonte acaba aumentando as velocidades nessa região, o que gera um núcleo de velocidades elevadas no centro inferior da chama, o qual pode ser observado na Figura 48.

Dessa forma, as velocidades elevadas da fase gasosa no núcleo observado na Figura 48 aumentaram as velocidades das gotículas nessa mesma região, o que pode ser visto na seção transversal $z/D = 10$ da Figura 47.

O aumento de temperaturas nas proximidades do bocal de injeção de combustível, que é observado na Figura 48 ocorre pelo fato de o valor estequiométrico da fração de mistura ser atingido nessa região. A injeção de fração de mistura pelo bocal é feita com valores inferiores ao estequiométrico para essa quantidade. Entretanto, conforme o spray se desenvolve, gotículas evaporam e a fração de mistura gradualmente aumenta até passar por seu valor estequiométrico, o que gera essa região de temperaturas elevadas, observada na Figura 48. Esse comportamento é uma das desvantagens apresentadas pelo modelo de folha de chama na modelagem da chama experimental que foi escolhida neste trabalho. Acredita-se que, na chama experimental, há uma zona de reação nessa mesma região proveniente da pré-mistura que ocorre entre o ar de arrasto e o vapor de combustível da evaporação de gotículas nos canais do injetor. Nesse sentido, a anomalia é apenas local, concentrando-se na proximidade do bocal, e devido à modelagem da combustão, enquanto que para o restante do escoamento a presença dessa zona de reação observada na simulação se assemelha a provável presença de uma zona de reação de pré-mistura da chama experimental.

Apesar das baixas velocidades verificadas nos resultados apresentados na Figura 47, os perfis radiais de temperatura média da fase gasosa mostraram boa aproximação com os dados

experimentais a pequenas distâncias do bocal de injeção. Ao observar os resultados apresentados na Figura 49, os dois primeiros perfis mostraram que os resultados da simulação tiveram boa aproximação das medições experimentais. No entanto, os resultados apresentaram difusão radial mais pronunciada que os dados das medições, o que é claramente observável com o decaimento suave dos perfis a partir do ponto de maior temperatura. O perfil radial de excesso de temperatura da seção transversal de $z/D = 30$ mostrou maiores discrepâncias que os outros dois perfis. Nesta região temperaturas mais elevadas foram atingidas nas simulações que nas medições experimentais.

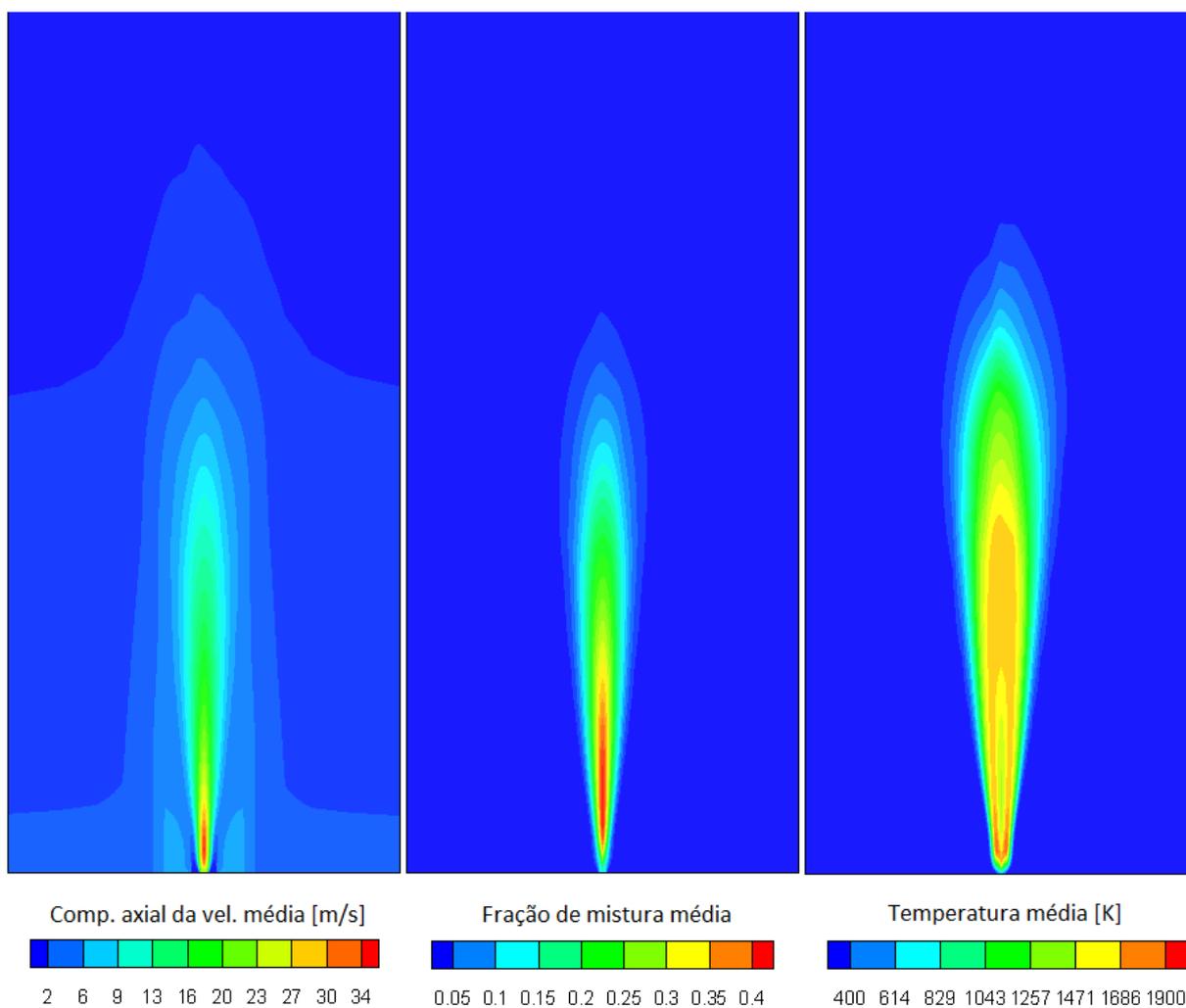


Figura 48: Campos das quantidades médias: componente axial de velocidade, fração de mistura e temperatura, no plano central do domínio de cálculo

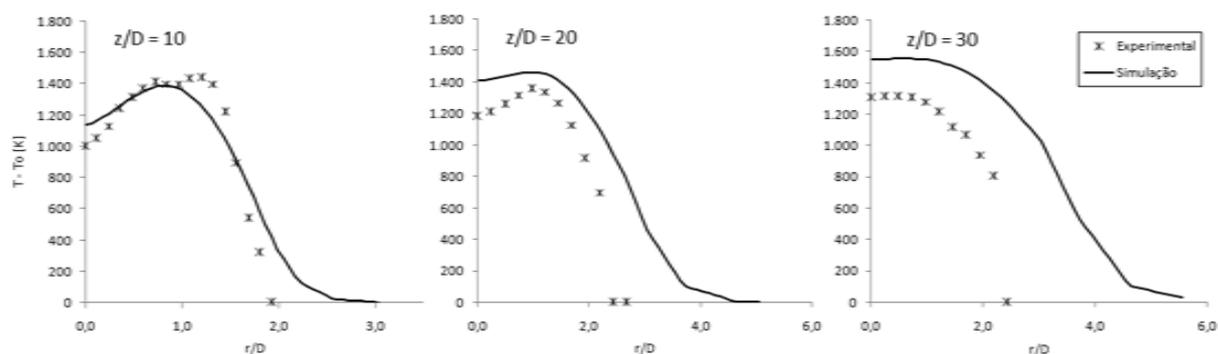


Figura 49: Perfis radiais do excesso de temperatura média da fase gasosa

Os valores superestimados dos perfis radiais do excesso de temperatura média são atribuídos ao modelo de combustão utilizado para a realização das simulações com o código desenvolvido neste trabalho. Como observado nos perfis radiais de temperatura da parte de validação, o modelo de folha de chama superestimou os valores da temperatura média. As boas aproximações para as duas primeiras seções transversais da Figura 49 podem ser atribuídas à modelagem do fenômeno de resfriamento evaporativo, considerando que o número de gotículas, e conseqüentemente a taxa de evaporação, é elevado em regiões mais próximas do bocal. No caso da seção transversal $z/D = 30$ há menos gotículas que nas regiões mais próximas do bocal, tendo em vista que um bom número delas já evaporou, ou mesmo se dispersou pelo escoamento. Dessa forma, os efeitos do resfriamento evaporativo são menos pronunciados nessa região mais distante, o que faz com que os valores de temperatura sejam maiores. A Figura 50 mostra o campo do termo fonte de massa no domínio de cálculo, o que corrobora o argumento dado às maiores temperaturas observada no perfil de $z/D = 30$. Como pode ser visto nessa figura, à distância de $30D$ do bocal pouca evaporação ocorre em relação aos outros dois planos, tendo em vista que os termos fonte de massa indicam a entrada de combustível proveniente da evaporação das gotículas.

Para avaliar a modelagem da evaporação de gotículas foi feita a comparação da distribuição de seus tamanhos calculados nas simulações com os dados medidos experimentalmente. Essas

comparações foram realizadas nas mesmas posições das distribuições de tamanhos de gotículas apresentadas no capítulo 3.

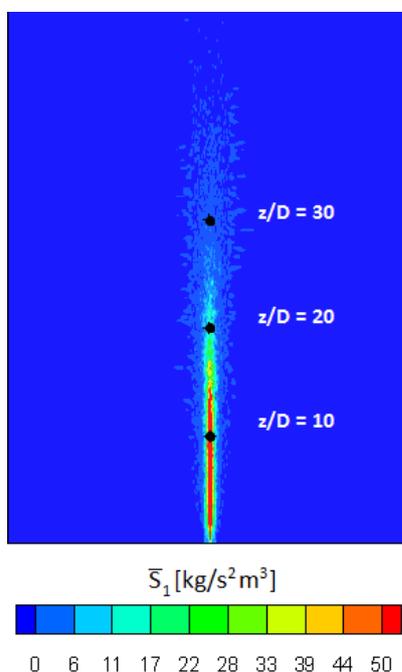


Figura 50: Pontos que indicam distâncias de coleta de resultados sobre o campo do termo fonte de massa

Ao observar as comparações apresentadas na Figura 51, nota-se que boa aproximação foi alcançada pelos resultados das simulações. Algumas discrepâncias são mostradas no ponto 10 z/D , r/D 0,05, em que a simulação apresentou maior concentração de gotículas de maior tamanho que o experimento. Isso foi atribuído ao fato de essas gotículas terem acabado de sair da região de elevadas temperaturas da região próxima ao bocal, onde a fração de mistura atingiu o seu valor estequiométrico. Os pontos 10 z/D , r/D 0,71 e 10 z/D , r/D 0,82 apresentaram um deslocamento em direção às gotículas de menor tamanho. Esse comportamento é justificado por deficiências na dispersão das gotículas. Tendo em vista que um modelo do tipo *random walk* foi utilizado para modelar a dispersão de gotículas, e esse depende da energia cinética turbulenta, pode-se admitir que, na região em questão, a dispersão foi levemente superestimada, resultado que tende a espalhar mais as gotículas que possuem

maior inércia (maior tamanho), dos que as que são carregadas pelo escoamento (menor tamanho). Dessa forma, uma maior concentração de gotículas maiores é encontrada numa distribuição.

Ao observar os resultados da Figura 51, nota-se que as discrepâncias observadas nas comparações entre o componente axial de velocidade média não interferiram significativamente no processo de evaporação. Sob este aspecto, ao analisar as equações utilizadas na modelagem da evaporação das gotículas, apresentadas no item 4.4.2, pode ser verificado que as influências da velocidade no modelo de evaporação se dão através da diferença de velocidades entre as fases para o cálculo do Re_e usado no cálculo do Sh na equação (68) e no cálculo do Nu nas equações (70) e (73). Ao observar novamente a Figura 47 nota-se que, apesar das diferenças entre as magnitudes das velocidades calculadas e medidas, as diferenças relacionados ao escorregamento são baixas. Dessa forma, pode-se concluir que as influências do campo de velocidades no processo de evaporação não foram muito impactantes, o que sugere que o processo de evaporação foi bem modelado.

Entretanto, o valor da velocidade da fase gasosa influencia o processo de dispersão das gotículas. Porém como observado na Figura 51 a dispersão foi razoavelmente bem prevista, tendo em vista que boa distribuição de tamanho de gotículas foi alcançada no domínio de cálculo.

A principal justificativa para as discrepâncias observadas nas comparações entre os perfis de velocidade média é atribuída à modelagem da turbulência. Claramente, os resultados apresentados na Figura 47 pelas gotículas de menores tamanhos mostram que a difusão da quantidade de movimento linear transportada foi superestimada. Com os resultados obtidos na parte de validação, nota-se que o refinamento da malha pode contribuir para a difusão superestimada, porém em proporções menores.

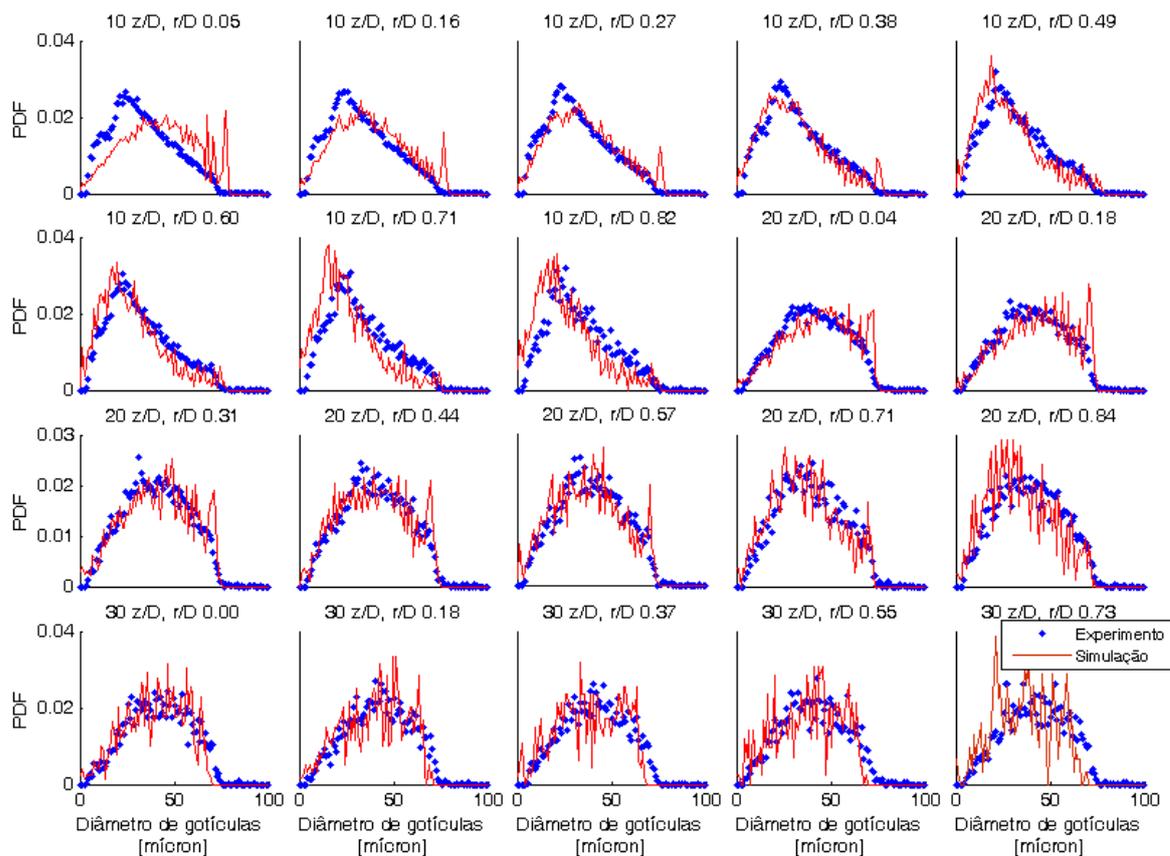


Figura 51: Comparação entre as distribuições de tamanho de gotículas. Legenda: “ α z/D , r/D β ” corresponde ao ponto localizado longitudinalmente a “ α ” diâmetros do bocal e a uma distância radial de “ β ” diâmetros da linha de centro da chama.

A modelagem de escoamentos bifásicos intensifica as dificuldades no cálculo da turbulência da fase dispersante devido ao o acoplamento interfásico desta quantidade. Em Chrighi (2005) foi apresentada uma revisão bibliográfica sobre os principais modelos de modulação de turbulência e, em seus estudos, foi encontrado que o modelo Padrão (que é utilizado neste trabalho) superestimou a turbulência. Assim, uma alternativa encontrada foi utilizar o modelo Termodinamicamente Consistente, apresentado nessa mesma referência para melhorar a modelagem da modulação.

Apesar dessa observação sobre a influência do modelo de turbulência, uma das dificuldades encontradas ao longo do desenvolvimento desse trabalho foi definir o parâmetro C_{3e} . Em Squires e Eaton (1994) foi feita a apresentação de uma relação entre esse parâmetro com o tempo de relaxação e a massa de partículas em um volume. No entanto, esses últimos autores

mencionaram que, considerando a existência de uma vasta faixa de valores para $C_{3\varepsilon}$, seu valor é normalmente obtido através de ajustes com dados experimentais de ensaios realizados em laboratório. Esses autores também observaram que o parâmetro $C_{2\varepsilon}$, também se altera de acordo com tempo de relaxação e a massa de partículas em um volume.

Portanto, tendo em vista essas constatações, nota-se que os parâmetros da equação de transporte da dissipação de energia cinética turbulenta tornam-se particulares para cada caso a ser simulado. Isso pode ser verificado com as observações apresentadas em Squires e Eaton (1994), que mostraram que a definição dos parâmetros da equação de transporte de ε dependem de características do escoamento, como a massa de partículas em um volume e a sua distribuição de tamanhos (o que altera a escala de tempo de relaxação das gotículas num dado volume).

Assim, ao observar o conjunto de resultados da seção da chama de spray pode-se notar que houve boa aproximação entre os resultados da simulação para o campo de temperaturas da fase gasosa e para a distribuição de gotículas no domínio da chama. Porém, discrepâncias puderam ser observadas nas comparações realizadas entre as velocidades das gotículas. Essas discrepâncias associam-se predominantemente por dificuldades na modelagem do acoplamento da turbulência. Acredita-se que alterações no modelo de modulação de turbulência, conforme proposto em Chrigui (2005) e nos parâmetros da equação de dissipação de energia cinética turbulenta devem melhorar os resultados encontrados neste trabalho para o cálculo de velocidade de gotículas. Essas alternativas para solucionar o problema das velocidades são indicadas para futuras análises, como continuidades deste trabalho.

7 CONCLUSÕES

O presente trabalho teve como objetivo a modelagem de chamas turbulentas de spray de etanol. Nele foi apresentada uma revisão da literatura sobre os principais estudos relacionados a experimentos e simulações de chamas turbulentas de spray de etanol. Os principais sub-modelos utilizados para o cálculo de chamas de spray também foram revisados o que possibilitou a escolha de modelos que permitiram a simulação de uma chama turbulenta de etanol.

Após o capítulo destinado à revisão da literatura foi feita uma apresentação detalhada da chama que foi adotada como base de comparação das simulações realizadas neste presente estudo. A descrição dessa chama foi necessária, pois juntamente com os estudos apresentados na revisão da literatura suas características influenciaram na escolha dos sub-modelos utilizados na composição do modelo final desse trabalho. Os sub-modelos selecionados para a composição desse modelo final, foram descritos, como também tiveram sua escolha justificada, na sequência.

Na descrição dos sub-modelos adotados neste estudo, todo o equacionamento e formulações utilizadas diretamente pelo código computacional desenvolvido neste trabalho foram descritos para servir de base para a descrição completa dos métodos numéricos que foram apresentados no capítulo seguinte. A escolha dos métodos numéricos foi também justificada no capítulo dedicado a sua apresentação e discussão.

A etapa de validação foi necessária para avaliar o funcionamento do código num caso intermediário à simulação da chama de spray. Foi feita a escolha da chama de difusão de metano Sandia/TUD D para esta etapa, por ser uma chama que apresenta grandes detalhes em seus dados experimentais e por ter sido analisada em vários estudos encontrados na literatura.

Ademais, a escolha de um escoamento reativo monofásico reativo possibilitou avaliar de forma paulatina o comportamento do código.

No início desta etapa de validação foram encontradas várias discrepâncias entre os resultados obtidos de uma primeira simulação e os dados experimentais. Para investigar as potenciais fontes que originaram essas discrepâncias foi feito um estudo paralelo com o programa comercial ANSYS FLUENT. Desse estudo paralelo foi possível concluir que o modelo adotado inicialmente nas simulações não considerou os efeitos da anomalia de jatos livres circulares discutidos em Pope (1978), que corresponde ao aumento da difusão turbulenta devido à deficiência do modelo $k-\varepsilon$ Padrão que não considera a dissipação de energia cinética turbulenta pelo estiramento de vórtices. Dessa forma, foi feito um ajuste *ad hoc* de um dos parâmetros da equação de transporte da dissipação de energia cinética turbulenta. Com o ajuste da equação de ε foram obtidas melhorias consideráveis nos resultados das simulações desenvolvidas com o código desenvolvido nesse trabalho.

Como pôde ser verificado a partir de comparações realizadas novamente com o programa comercial ANSYS FLUENT, simulações entre este programa e o código deste trabalho apresentaram resultados semelhantes quando malhas de mesmas características foram utilizadas. Com este resultado, o funcionamento do código pôde ser validado.

O modelo final gerado com o desenvolvimento desse trabalho teve o seu funcionamento avaliado na etapa da modelagem da chama de spray de etanol. Os resultados obtidos para os campos de temperatura média e distribuição do tamanho de gotículas apresentaram boa aproximação com os dados experimentais. Algumas discrepâncias apareceram para o campo de temperaturas a distâncias maiores do bocal de injeção do spray. Essas discrepâncias foram associadas a deficiências apresentadas na modelagem da combustão, que superestimou os valores de temperatura nessa região.

As comparações realizadas entre as velocidades de gotículas simuladas e calculadas mostraram que a simulação superestimou a difusão da fase gasosa. Essa difusão superestimada foi associada à modelagem da modulação de turbulência. A modulação de turbulência está relacionada ao acoplamento interfásico da turbulência. Como apresentado por Chrighui (2005) o modelo utilizado para o cálculo da modulação de turbulência utilizado neste trabalho superestima a turbulência. Outro potencial contribuinte para as deficiências da modelagem da modulação de turbulência foi o valor do parâmetro adicionado à equação de transporte de ε devido ao termo fonte de acoplamento interfásico. Durante a realização das simulações da chama de spray foram encontradas dificuldades em se ajustar o valor desse parâmetro.

A seção a seguir lista de forma resumida as principais sugestões de continuação dos estudos desenvolvidos neste presente trabalho.

7.1 SUGESTÕES PARA APERFEIÇOAMENTO E CONTINUAÇÃO DO PRESENTE TRABALHO

Duas grandes áreas do trabalho presente permaneceram com algumas deficiências após a sua conclusão. Uma relaciona-se aos algoritmos utilizados no procedimento de cálculo e a outra à modelagem da chama de spray.

Os algoritmos utilizados na programação do código mostraram-se lentos nas simulações. Para aperfeiçoar esses algoritmos sugerem-se as seguintes alternativas:

- melhor gerenciamento das variáveis utilizadas para cálculo, de forma que variáveis locais possam ser reutilizadas durante o processo de cálculo para livrar espaço na memória temporária do computador;
- melhor alocação dos tipos de variáveis, de forma a reduzir o desperdício do consumo de memória temporária devido ao exagero da quantidade de memória alocada para

uma variável que não necessita de todo o recurso disponibilizado para o seu tipo que foi previamente definido;

- melhoria do algoritmo de cálculo de sistemas lineares [métodos do tipo Gradiente Conjugado e Multigrid (Versteeg e Malalasekera, 2007)] e;
- método de cálculo paralelo com segmentação do domínio de cálculo (malha) e possibilidade de paralelização do cálculo Lagrangeano.

Duas alternativas que mudariam a concepção do código utilizado neste trabalho, porém poderiam solucionar a baixa velocidade de processamento são:

- construção de uma versão bidimensional do código (necessária para avaliar os modelos de interesse) e,
- uma versão para malhas não estruturadas, o que permitiria maior liberdade no refinamento das malhas.

Após as análises dos resultados das simulações da chama de spray algumas discrepâncias foram observadas. A fim de reduzir essas discrepâncias e aperfeiçoar o modelo que foi utilizado nessas simulações, as seguintes alternativas são sugeridas para trabalhos futuros:

- substituição do modelo de modulação de turbulência pelo modelo termodinamicamente consistente;
- novo ajuste do parâmetro do termo fonte associado ao acoplamento interfásico na equação de ε , considerando a implementação do novo modelo de modulação de turbulência e;
- substituição do modelo de combustão por um que considera-se as taxas de reações químicas o que possibilitaria a redução dos valores da temperatura da fase gasosa.

Os tópicos listados a seguir são sugestões de temas que dariam continuidade para o presente trabalho.

- Simulação de chamas turbulentas de spray utilizando o modelo de turbulência das grandes escalas;
- Análise de modelos de modulação de turbulência para a simulação de chamas turbulentas de spray de etanol e biocombustíveis;
- Estudo de modelos de combustão que melhor se adaptem a modelagem de chamas turbulentas de spray;
- Desenvolvimento de um modelo de chamas turbulentas de spray de biocombustíveis em ambientes de alta pressão, visando aplicação de motores de injeção direta e câmaras de combustão de turbinas a gás;
- Análise dos efeitos da transferência de calor por radiação em chamas de spray;
- Análise de modelos de atomização de gotículas.

8 REFERÊNCIAS

Abramzon, B., Sirignano, W. A., 1989, “Droplet vaporization model for spray combustion calculations”, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol.32, No.9, pp. 1606-1618.

Andrade, F. O., 2009, “Contribuição à Simulação das Grandes Escalas de uma Chama Turbulenta Pré-Misturada Estabilizada em um Escoamento a Alta Velocidade”, Tese de doutorado apresentada a Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, Brasil, 237p.

Annual Energy Review 2009 / U. S. Energy Information Administration. – Washington : 2010. 446 p.

Apte, S. V., Mahesh, K. and Moin, P., 2009, “Large-eddy simulation of a evaporating spray in a coaxial combustor”, *Proceedings of the Combustion Institute*, Vol.32, pp. 2247-2256.

Apte, S. V., Mahesh, K., Moin, P., Oefelein, J. C., 2003, “Large-eddy simulation of swirling particle-laden flows in a coaxial-jet combustor”, *International Journal of Multiphase Flows*, Vol.29, pp. 1311-1331.

Balanco Energético Nacional 2009: Ano base 2008 / Empresa de Pesquisa Energética. – Rio de Janeiro : EPE, 2009. 274 p.

Barlow, R., Hinz, A., “Piloted Methane / Air Jet Flames (Flame D,E,F) Comparisons”, em: *Proceedings of the Fourth International Workshop on Measurement and Computation of Turbulent Nonpremixed Flames*. Darmstadt, Alemanha, p. 221.

Cabra, R., Dibble, R. W., Chen, J.-Y., 2002, “Characterization of Liquid Fuel Evaporation of a Lifted Methanol Spray Flame in a Vitiated Coflow Burner”, NASA Contractor Report: NASA/CR-2002-212083, University of California, Berkeley, California, United States of America, 21p.

Chen, C. –S., Chang, K. –C., Chen, J. –Y, 1994, “Application of a Robust β -pdf Treatment to Analysis of Thermal NO Formation in Nonpremixed Hydrogen-Air Flame”, *Combustion and Flame*, Vol.98, pp. 375-390.

Chen, J. –Y., 1999, “Flames D, E, F”, em: *Proceedings of the Fourth International Workshop on Measurement and Computation of Turbulent Nonpremixed Flames*. Darmstadt, Alemanha, p. 221.

Chen, J. -Y., Yam, C., Armstrong, R., 1999, "Joint Scalar PDF Simulation of Turbulent Reacting Flows with Detailed Chemistry on a Parallel Cluster", em: Proceedings of the Fourth International Workshop on Measurement and Computation of Turbulent Nonpremixed Flames. Darmstadt, Alemanha, p. 221.

Chen, X.-Q., Pereira, J. C. F., 1996, "Computation of turbulent evaporating sprays with well-specified measurements: a sensitivity study on droplet properties", International Journal of Heat Mass Transfer, Vol.39, pp. 441-454.

Chrigui, M., J., Gounder, J., Dreizler, A., Sadiki, A., Janicka, A., Masri, A., 2010a, "Investigation of a Partially Premixed Acetone Spray Flame with decreasing Mass Loading", Proceedings of the Asia Pacific Conference on Combustion, Hyderabad, India.

Chrigui, M., Moesl, K., Ahmadi, W., Sadiki, A., Janicka, J., 2010b, "Partially premixed prevaporized kerosene spray combustion in turbulent flow", Experimental Thermal & Fluid Science, Vol.34, pp. 308-315

Chrigui, M., J., Hage, M., Dreizler, A., Sadiki, A., Janicka, A., 2009, "Experimental and Numerical Analysis of Spray Dispersion and Evaporation in a Combustion Chamber", Atomization and Sprays, Vol.19, pp. 929-955.

Chrigui, M., 2005, "Eulerian-Lagrangian Approach for Modeling and Simulations of Turbulent Reactive Multi-Phase Flows under Gas Turbine Combustor Conditions", Dr. -Ing. Thesis para a Universidade Técnica de Darmstadt, Darmstadt, Alemanha.

Chrigui, M., Ahmadi, G., Sadiki, A., "Study on Interaction in Spray between Evaporating Droplets and Turbulence Using Second Order Turbulence RANS Models and a Lagrangian Approach", Progress in Computational Fluid Dynamics, edição especial, 2004.

Coelho, P. J., Peters, N., 1999, "Numerical Simulation of a Piloted Methane / Air Jet Flame Using a Laminar Flamelet Model", em: Proceedings of the Fourth International Workshop on Measurement and Computation of Turbulent Nonpremixed Flames. Darmstadt, Alemanha, p. 221.

Colins, G. W., 2003, "Fundamental Numerical Methods and Data Analysis", NASA ADS 2003, Estados Unidos da América, 254 p.

Crowe, C. T., 2000, "On models for turbulence modulation in fluid-particle flows", International Journal of Multiphase Flow, Vol. 26, pp. 719-727.

Direto da Usina | A verdadeira imagem do setor. Disponível em: < <http://www.diretodausina.net/noticia2.aspx?Noticiald=1536>>. Acessado em: 07 de fevereiro de 2011.

Düwel, I., Ge, H.-W., Kronemayer, H., Dibble, R. Gutheil, E., Schulz, C., Wolfrum, J., 2007, “Experimental and numerical characterization of a turbulent spray flame”, Proceedings of the Combustion Institute, Vol.31, pp. 2247-2255.

Faeth, G. M., 1977, “Current status of droplet and liquid combustion”, Prog. Energy Combust. Sci., Vol.3, pp. 191-224.

Faeth, G. M., 1983, “Evaporation and combustion of sprays”, Prog. Energy Combust. Sci., Vol.9, pp. 1-76.

Faeth, G. M., 1987, “Mixing transport and combustion in sprays”, Prog. Energy Combust. Sci., Vol.13, pp. 293-345.

Fiorina, B., Gicquel, O., Veynante, D., 2009, “Turbulent flame simulation taking advantage of tabulated chemistry self-similar properties”, Proceedings of the Combustion Institute, Vol.32, pp. 1687-1694.

Flame D, 2010. Disponível em: < <http://www.sandia.gov/TNF/DataArch/FlameD.html>>. Acessado em: 04 de outubro de 2010.

Fluent, 2006, “User’s Guide”. User’s guide of the software Fluent version 6.3.26.

Fukumasu, N. K., 2010, “Modelagem de uma chama de difusão turbulenta pela simulação das grandes escalas”, Dissertação de mestrado apresentada a Escola Politécnica da Universidade de São Paulo, São Paulo, Brasil, 119p.

Ge, H.-W., Gutheil, E., 2008, “Joint PDF Modeling of Non-reacting and Reacting Turbulent Spray Flows”, Anais do 19th National & ISHMAT-ASME Heat and Mass Transfer Conference, paper UG-017, pp. 1-10.

Gounder, J. D., Starner, S. H., Masri, A. R., 2005, “Effects of Droplet Loading in Turbulent Spray Ethanol Flames”, Fourth Australian Conference on Laser Diagnostics in Fluid Mechanics and Combustion, pp. 49-52.

Haas, M. J., Scott, K. M., Alleman, T. L., McCormick, R. L., 2001, "Engine Performance of Biodiesel Fuel Prepared from Soybean Soapstock: A High Quality Renewable Fuel Produced from a Waste Feedstock", *Energy & Fuels*, Vol. 15, pp. 1207 – 1212.

Hinz, A., Hassel, E. P., Janicka, J., 1999a, "Numerical Simulation of a Piloted Methane / Air Flame (Flame D) using a Finite-Volume – Monte Carlo-PDF Code: Models and Boundary Conditions", em: *Proceedings of the Fourth International Workshop on Measurement and Computation of Turbulent Nonpremixed Flames*. Darmstadt, Alemanha, p. 221.

Hinz, A., Hassel, E. P., Janicka, J., 1999b, "Finite-Volume – Monte-Carlo-PDF Code", em: *Proceedings of the Fourth International Workshop on Measurement and Computation of Turbulent Nonpremixed Flames*. Darmstadt, Alemanha, p. 221.

Hollmann, C., Gutheil, E., 1998, "Flamelet-Modeling of Turbulent Spray Diffusion Flames Based on a Laminar Spray Flame Library", *Combustion Science and Technology*, Vol.135, pp. 175-192.

Hollmann, C., Gutheil, E., 1996, "Modeling of turbulent spray diffusion flames including detailed chemistry", *Twenty-Sixth Symposium (International) on Combustion/The Combustion Institute*, Vol.26, pp. 1731-1738.

Incropera, F. P., DeWitt, D. P., 2003, "Fundamentos de Transferência de Calor e de Massa", LTC – Livros Técnicos e Científicos Editora S. A., Rio de Janeiro-RJ, Brasil, 698p.

Janicka, J., Kollmann, W., 1978, "A two-variables formalism for the treatment of chemical reactions in turbulent H₂-air diffusion flames", *Symposium (International) on Combustion*, Vol. 17, pp. 421-430.

Jones, W. P., Lyra, S., Marquis, A. J., 2010, "Large Eddy simulation of a droplet laden turbulent mixing layer", *International Journal of Heat and Fluid Flow*, Vol. 31, pp. 93-100.

Jones, W. P., Lyra, S., Navarro-Martinez, S., 2011, "Large Eddy simulation of a swirl stabilized spray flame", *Proceedings of the Combustion Institute*, Vol. 33, pp. 2153-2160.

Jones, W. P. and Whitelaw, J. H., 1982, "Calculation of Turbulent Reacting Flows: A Review", *Combustion and Flame*, Vol. 48, pp. 1-26.

Kohse-Höinghaus, K., Jeffries, J. B., em: Kohse-Höinghaus, K., Jeffries, J. B., (Eds.), 2002, "Applied Combustion Diagnostics", Taylor and Francis, Londres.

Kuo, K. K., 1986, "Principles of Combustion", John Wiley & Sons, Inc., United States of America, 810p.

Lain, S., Sommerfeld, M., 2003, "Turbulence modulation in dispersed two-phase flow laden with solids from a Lagrangian perspective", International Journal of Heat and Fluid Flow, Vol. 24, pp. 616-625.

Li, G., Modest, M. F., 2001, "An Effective Particle Tracing Scheme on Structured/Unstructured Grids in Hybrid Finite Volume/PDF Monte Carlo Methods", Journal of Computational Physics, Vol.173, pp. 187-207.

Lohner, R., 1995, "Robust, Vectorized Search Algorithms for Interpolation on Unstructured Grids", Journal of Computational Physics, Vol.118, pp. 380-387.

Maliska, C. R., 2004, "Transferência de calor e mecânica dos fluidos computacional", Livros Técnicos Científicos Editora, Rio de Janeiro, Brasil, 453p.

Mando, M., Lightstone, M. F., Rosendahl, L., Yin, C., Sorensen, H., 2009, "Turbulence modulation in dilute particle-laden flow", International Journal of Heat and Fluid Flow, Vol. 30, pp. 331-338.

Marinov, N. M., 1999, "A Detailed Chemical Kinetics Mechanism for High Temperature Ethanol Oxidation", Journal of Chemical Kinetics, Vol.31, pp. 183-220.

Marley, S. K., Welle, E. J., Lyons, K. M., Roberts, W. L., 2004, "Effects of leading edge entrainment on the double flame structure in lifted ethanol spray flames", Experimental Thermal and Fluid Science, Vol. 29, pp. 23-31.

Masri, A. R., Gounder, J. D., 2010, "Turbulent Spray Flames of Acetone and Ethanol Approaching Extinction". Combustion Science and Technology, Vol. 182, pp. 702-715.

Mustata, R., Valiño, L., Jiménez, C., Jones, W. P., Bondi, S., 2006, "A probability density function Eulerian Monte Carlo field method for large eddy simulations: Application to a turbulent piloted methane/air diffusion flame (Sandia D)", Combustion and Flame, Vol.145, pp. 88-104.

Obliego, A., Gass, J., 1999, "Numerical Simulation of a Piloted Methane / Air Flame (Flame D) using a Finite-Volume – Monte Carlo-PDF Code", em: Proceedings of the Fourth International Workshop on Measurement and Computation of Turbulent Nonpremixed Flames. Darmstadt, Alemanha, p. 221.

Patankar, S. V., 1980, "Numerical Heat Transfer and Fluid Flow", Hemisphere Publishing Corporation, Estados Unidos da América, 198p.

Pope, S. B., 2000. "Turbulent Flows". Cambridge University Press, Nova Iorque, Estados Unidos da América.

Pope, S. B., 1978. "An Explanation of the Turbulent Round-Jet/Plane-Jet Anomaly", AIAA Journal, Vol. 16, No. 3, pp. 279-281.

Reid, R. C., Prausnitz, J. M., e Poling, B. E., The Properties of Gases and Liquids, 4ed., McGraw-Hill, New York, 1987.

RFA: Renewable Fuels Association. Disponível em:
<<http://www.ethanolrfa.org/pages/statistics/#E>>. Acessado em: 04 de outubro de 2010.

Rochaya, D., 2007, "Numerical Simulation of Spray Combustion using Bio-mass Derived Liquid Fuels", PhD. Thesis, Cranfield University, England, 292p.

Salari, K., Knupp, P., 2000, "Code verification by the method of manufactured solutions, Sandia report, SAND2000-1444. Sandia National Laboratories.

Scarborough, J. B., 1966, "Numerical mathematical analysis", Johns Hopkins Press, Baltimore, 600p.

Sirignano, W. A., 2010, "Fluid Dynamics and Transport of Droplets and Sprays", Cambridge University Press, New York, United States of America, 462p.

Squires, K. D., Eaton, J. K., 1994, "Effect of Selective Modification of Turbulence on Two-Equation Models for Particle-Laden Turbulent Flows", ASME Journal of Fluids Engineering Vol. 116, pp. 778-784.

Turns, S. R., 2000, "An introduction to combustion: concepts and applications", McGraw-Hill series in mechanical engineering, Singapore, 676p.

Vicentino, C., 2007, "História Geral: Ensino Médio", Editora Scipione, 544p.

Versteeg, H. K. and Malalasekera, W., 2007, "An Introduction to Computational Fluid Dynamics: The Finite Volume Method", Pearson Education Limited, Harlow, England, 503p.
Vicentino, C., 2007, "História Geral: Ensino Médio", Editora Scipione, 544p.

Yuen, M. C., Chen, L. W., 1976, "On Drag of Evaporating Liquid Droplets", *Combustion Science and Technology*, Vol.14, pp. 147-154.

Zhou, Q., Yao, C., 1992, "Group modeling of impacting spray dynamics", *International Journal of Heat Mass Transfer*, Vol.35, pp. 121-129.