MARCELO LAURENTYS AIROLDI

SIMULAÇÃO DE UMA CHAMA TURBULENTA DE ETANOL COM ELEMENTOS DE CHAMA LAMINAR E MODELO DAS TENSÕES DE REYNOLDS

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

São Paulo
2013

MARCELO LAURENTYS AIROLDI

SIMULAÇÃO DE UMA CHAMA TURBULENTA DE ETANOL COM ELEMENTOS DE CHAMA LAMINAR E MODELO DAS TENSÕES DE REYNOLDS

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
2013

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

São Paulo, de outubro de 2013.

Assinatura do autor _____

Assinatura do orientador _____

FICHA CATALOGRÁFICA

Airoldi, Marcelo Laurentys
Simulação de uma chama turbulenta de spray de etanol com modelo de elementos de chama / M.L. Airoldi. -- versão corr. -- São Paulo, 2013.
173 p.

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

1.Etanol 2.Simulação 3.Combustão 4.Turbulência 5.Escoamento I.Universidade de São Paulo. Escola Politécnica. Departamento de Engenharia Mecânica II.t.

A Edison Airoldi e Cássia Maria Laurentys Coelho Airoldi,

meus amados pais

AGRADECIMENTOS

A Edison Airoldi e a Cássia Maria Laurentys Coelho Airoldi, meus pais, pelo apoio, força e amor sem os quais não conseguiria atingir todos os meus sonhos e objetivos.

A Fernanda Laurentys Airoldi, minha irmã, pelo carinho e companheirismo desde os tempos de infância e pela ajuda na minha formação como pessoa.

A Paulo Lakatos, meu cunhado, a quem considero como um irmão mais velho.

Ao meu orientador, Prof. Dr. Guenther Carlos Krieger Filho, pela orientação durante a realização dessa dissertação (especialmente nas dificuldades) e pela amizade.

Aos amigos, Caio César Nunes Oliveira, Carlos Eduardo Keutenedjian Mady, Tiago Siequeroli, Cássio Scartezini Feliciano, Eduardo Rocha Tavares, Breno Licursi, Felipe Faraco, Raphael H. Machado Moreira, Mariana Sak Moran, Olivia Saa, Melissa Hukai, Aline Suzuki, Marcos Augusto Lancha, Patrícia Laureano, Gustavo Aguiar, Henrique Martins, Ricardo Nobuo, Daniel Toledo, Thiago Santoro, Guilherme Santos, Camila Moret, Marcio Pellegrino, Rogério Massato Inoue, Fernanda Martins, André Bergel, Flavio Dias, Renata Nohra e Franck Turkovics pelas conversas, ajudas e bons momentos que vivenciamos.

Aos companheiros de LETE – Laboratório de Engenharia Térmica e Ambiental, pelas agradáveis conversas e discussões que tivemos durante o desenvolvimento deste trabalho.

A Fernando Sacomano pela ajuda vital para a realização dessa dissertação.

A Newton Fukumasu pelas conversas que me ajudaram a guiar esse trabalho juntamente com o Prof. Guenther e pela cooperação, as quais continuarão por muito tempo.

Aos companheiros de trabalho da MWM International, Sygma Motors, GM e PSA Peugeot Citröen, pela troca de informações e pelas inúmeras contribuições técnicas que tiveram em minha formação acadêmica e profissional.

A todos que de alguma forma contribuíram para o desenvolvimento desse trabalho e me motivaram na sua realização.

RESUMO

AIROLDI, M. L. **Simulação de uma chama turbulenta de etanol com elementos de chama laminar e modelo das tensões de Reynolds.** 2013. 141p. Dissertação (Mestrado) – Escola Politécnica, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2013.

A busca por uma nova matriz energética intensificou significativamente o desenvolvimento de fontes renováveis de energia. Dentre essas, o álcool teve grande destaque, dado que sua utilização industrial já é intensa no Brasil. Em concordância com a tendência industrial, o comportamento do álcool em vários fenômenos físico-químicos tornou-se foco de intensa pesquisa e desenvolvimento, o que levou a parcerias entre faculdades e empresas. O presente trabalho objetiva ao desenvolvimento de simulações numéricas que consigam descrever com exatidão o comportamento de chamas de sprays turbulentos de etanol. Para a verificação da aderência da simulação a processos reais, serão utilizados dados experimentais. Esses dados serviram como base comparativa de validação do modelo numérico. A descrição do spray segue a abordagem Euler-Lagrange, na qual a fase líquida segue uma abordagem lagrangeana e a fase gasosa uma abordagem euleriana. Foi considerado o acoplamento completo entre as duas fases, considerando o impacto da fase líquida no regime turbulento da fase gasosa. A turbulência da fase gasosa é descrita pelo modelo RSM (*Reynolds Stress Model*), baseado na média temporal e decomposição da turbulência, enquanto o escoamento interno da fase líquida é negligenciado. A chama do spray caracterizada pelo modelo *flamelet*, o qual utilizará um mecanismo de cinética química reduzido da oxidação do etanol.

Palavras-chaves: Combustão. Turbulência. Etanol. Sprays. Simulação Numérica. Dinâmica dos Fluidos Computacional (CFD).

ABSTRACT

AIROLDI, M. L. **Simulation of a turbulent ethanol flame using flamelet and Reynolds stress models.** 2013. 141p. Dissertação (Mestrado) – Escola Politécnica, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2013.

The research for a new energy source to substitute fossil fuels intensified the development of renewable energy sources. Among all, ethanol has been given great attention, once it has been widely used in many Brazilian industrial branches. In agreement with industrial trends, the behavior of ethanol became the center of innumerous researches and developments, which led to partnerships between academic and private companies. This thesis aims the development of numerical simulations that describe with accurately the behavior of ethanol turbulent spray flames. To verify correlation between model results and real process behavior, experimental data will be used for validation of the numerical model. The spray physical description is made through the use of the Euler- Lagrange approach, in which the liquid phase is described by the lagrangean approach and the gaseous phase is described by the eulerian approach. There is full coupling between both phases. The turbulent flow of the gaseous phase is modeled through the use of the Reynolds Stress Model (RSM), based on Reynolds decomposition and time averaging process. The liquid phase has no internal flow, the droplets behave as a solid sphere translating through the domain (gaseous phase). The spray flame is modeled by the flamelet model which will use a simplified chemical mechanism.

Keywords: Combustion. Turbulence. Ethanol. Sprays. Numerical Simulation. Computational Fluid Dynamics (CFD).

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1 – Sinal Turbulento da variável u (Versteeg e Malalasekera, 2007) 29
Figura 2 – Fluxograma de Cálculo do DDM (Adaptado de Faeth (1977)) 44
Figura 3 – Distribuição da Temperatura em função da posição Radial (Li et Zhou, 2012) 53
Figura 4 – Regimes de chamas turbulentas (adaptado de Poinsot e Veynante, 2000) 71
Figura 5 – Fluxograma operacional do modelo *flamelet* (adaptado de Poinsot e Veynante, 2000) 72
Figura 6 – Resultados experimentais e numéricos para chamas laminares de fluxos opostos (Demétrio, 2013) 77
Figura 7 – Classificação do spray (Sacomano (2011), adaptado de Chrigui (2005)) 84
Figura 8 – Domínio de cálculo 102
Figura 9 – *Swirler* desenvolvido para a configuração experimental 103
Figura 10 – Desenho da parte interna do tubo da configuração experimental 104
Figura 11 – Região localizada a jusante da seção de descarga do *swirler* 104
Figura 12 – Cotas para desenvolvimento das malhas na direção axial 106
Figura 13 – Cotas para desenvolvimento das malhas na direção radial 107
Figura 14 – Núcleo hexaédrico das malhas 1, 2 e 3 108
Figura 15 – Bloco hexaédrico de uma das passagens do *swirler* 109
Figura 16 – Cotas utilizadas para discretização na direção axial 110
Figura 17 – Cotas utilizadas para discretização na direção radial e no núcleo hexaédrico 110
Figura 18 – Distribuição de velocidade: (a) radial; (b) axial; (c) tangencial. 113
Figura 19 – Distribuição da componente axial da velocidade em plano horizontal distante 7 mm do *swirler* 115
Figura 20 – Distribuição da componente tangencial da velocidade em plano horizontal distante 5 mm do *swirler* 115
Figura 21 – Distribuição da componente axial da velocidade sobre a linha de centro do domínio 116
Figura 22 – Resultados numéricos e experimentais para a componente axial da velocidade (y=5 mm) 117
Figura 23 – Resultados numéricos e experimentais para a componente tangencial da velocidade (y=5 mm) 118

Figura 24 – Resultados numéricos e experimentais para a componente axial da velocidade sobre a linha de centro (r/R=0) 118
Figura 25 – Comparação entre os métodos de discretização com base na componente axial da velocidade (y=5 mm) 120
Figura 26 – Comparação entre os métodos de discretização com base na componente axial da velocidade (plano a 90 mm do *swirler*) 120
Figura 27 – Comparação entre os métodos de discretização com base na componente tangencial da velocidade (plano a 5 mm do *swirler*) 121
Figura 28 – Comparação entre os métodos de discretização com base na componente tangencial da velocidade (y=90 mm) 122
Figura 29 – Comparação entre os métodos de discretização com base na componente axial da velocidade (sobre a linha de centro) 122
Figura 30 – Resultados da componente axial da velocidade em um plano horizontal distante: (a) 5 mm do *swirler* (b) 10 mm do *swirler* (c) 20 mm do *swirler* (d) 40 mm do *swirler* 124
Figura 31 – Resultados da componente tangencial da velocidade em um plano horizontal distante: (a) 5 mm do *swirler* (b) 10 mm do *swirler* (c) 20 mm do *swirler* (d) 40 mm do *swirler* 125
Figura 32 – Avaliação da sensibilidade dos resultados à condição de contorno de vazão 126
Figura 33 – Avaliação da sensibilidade dos resultados à condição de contorno de intensidade turbulenta 127
Figura 34 – Distribuição da componente axial da velocidade em plano horizontal distante 10 mm do *swirler* 128
Figura 35 – Distribuição da componente tangencial da velocidade em plano horizontal distante 10 mm do *swirler* 129
Figura 36 – Distribuição da componente axial da velocidade sobre a linha de centro do domínio 129
Figura 37 – Distribuição da componente axial da velocidade em plano horizontal distante 40 mm do *swirler* 130
Figura 38 – Distribuição da componente axial da velocidade em plano horizontal distante 80 mm do *swirler* 132
Figura 39 – Distribuição da componente axial da velocidade em plano horizontal distante 120 mm do *swirler* 132
Figura 40 – Distribuição da componente axial da velocidade sobre a linha de centro do domínio 132

Figura 41 – Distribuição da componente tangencial da velocidade em plano horizontal distante 40 mm do *swirler* 133
Figura 42 – Distribuição da componente tangencial da velocidade em plano horizontal distante 80 mm do *swirler* 133
Figura 43 – Distribuição da componente tangencial da velocidade em plano horizontal distante 120 mm do *swirler* 133
Figura 44 – Taxa de dissipação da energia cinética turbulenta (y = 10 mm) 134
Figura 45 – Viscosidade Turbulenta (y = 10 mm) 135
Figura 46 – Tensão de Reynolds (y = 10 mm) 135
Figura 47 – Taxa de dissipação da energia cinética turbulenta (y = 40 mm) 136
Figura 48 – Viscosidade Turbulenta (y = 40 mm) 136
Figura 49 – Tensão de Reynolds (y = 40 mm) 136
Figura 50 – Distribuição das velocidades das gotas em plano horizontal distante 2 mm do *swirler* 138
Figura 51 – Distribuição do diâmetro médio de Sauter (SMD) das gotas em plano horizontal distante 2 mm do *swirler* 139
Figura 52 – Representação gráfica das superfícies (primeiro método) – Unidades em mm .. 140
Figura 53 – Representação gráfica das superfícies (segundo método) – Unidades em mm .. 140
Figura 54 – Resultados de fração mássica de OH para (a) método LIF-OH, (b) primeiro método numérico e (c) segundo método numérico 142
Figura 55 – Distribuições de: (a) temperatura; (b) fração de mistura 143
Figura 56 – Distribuição de taxa de dissipação sobre a zona de reação para: (a) primeiro método; (b) segundo método 144
Figura 57 – Transferência de calor da fase líquida para a fase gasosa 144
Figura 58 – Distribuição de temperatura sobre a zona de reação para: (a) primeiro método; (b) segundo método 145
Figura 59 – Distribuição do diâmetro de gotas sobre a linha de centro 145
Figura 60 – Distribuição da componente axial da velocidade das gotas sobre a linha de centro 146
Figura 61 – Distribuição de (a) componente axial da velocidade, (b) diâmetro médio das gotas 148
Figura 62 – Distribuição de (a) componente axial da velocidade, (b) diâmetro médio das gotas 148

Figura 63 – Esquema da configuração experimental de Chamas Opostas (adaptado de Peters, 2000) 167

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Características das malhas 105
Tabela 2 – Características axiais das malhas 1, 2 e 3 105
Tabela 3 – Características tangenciais das malhas 1, 2 e 3 106
Tabela 4 – Características radiais das malhas 1, 2 e 3 107
Tabela 5 – Características do núcleo das malhas 1, 2 e 3 108
Tabela 6 – Características do *swirler* das malhas 1, 2 e 3 109
Tabela 7 – Características das malhas sem *swirler* 111
Tabela 8 – Condições de Contorno de Admissão 111
Tabela 9 – Condições de contorno de pressão 113
Tabela 10 – Vazões para análise paramétrica 126
Tabela 11 – Condições de contorno das superfícies de injeção (primeiro método) 140
Tabela 12 – Condições de contorno das superfícies de injeção (segundo método) 141

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

CDM - *Continuous Droplet Model*

CDS - *Central Differencing Scheme*

CFD - *Computational Fluid Dynamics*

CFM - *Continuous-Formulation Model*

DDM - *Discrete Droplet Model*

DNS -*Direct Numerical Simulation*

DRW - *Discrete Random Walk*

FANS - *Favre Averaged Navier-Stokes*

LES - *Large Eddy Simulation*

LHF - *Locally Homogeneous Flow*

MVF - *Método dos Volumes Finitos*

PISO - *Pressure Implicit with Splitting of Operators*

PRESTO - *PREssure STaggering Option scheme*

Proconve – PROgrama de CONtrole de poluição do ar por VEículos automotores

PSIC - *Particle -Source-In-Cell*

QUICK - *Quadratic Upstream Interpolation for Convective Kinetics*

RANS - *Reynolds Averaged Navies-Stokes*

RSM - *Reynolds Stress Model*

SIMPLE - *Semi Implicit Method for Pressure-Linked Equations*

SIMPLEC - *Semi Implicit Method for Pressure-Linked Equations - Consistent*

SF - *Separated Flow*

SMD - *Sauter Mean Diameter*

SOM –*Second-Order Moment*

SSF - *Stochastic Separated Flow*

UDS - *Upwind Differencing Scheme*

VLES - *Very Large Eddy Simulation*

LISTA DE SÍMBOLOS

Caracteres latinos minúsculos

a – Constante genérica/Termo do modelo β-PDF

b – Termo do modelo β-PDF

c_p – Calor específico à pressão constante

d_p – Diâmetro da partícula

f – fração de mistura/Variável genérica do escoamento

f'' - Flutuação de Favre da fração de mistura

g – Aceleração da Gravidade/Variável genérica do escoamento

h – Entalpia específica da mistura

k – Energia cinética turbulenta

k_P – Energia cinética turbulenta no elemento adjacente à parede

m_p – Massa da partícula

n – Vetor normal a uma face

n_i – Componente do vetor normal

p – Pressão

q – Variável genérica instantânea da fase gasosa

$\dot{q}$ – Fluxo de calor através da parede

s – Razão estequiométrica mássica de oxidante/combustível

t – Instante de tempo

t_p – Intervalo de tempo de iteração da fase líquida

u – Velocidade da fase gasosa

u_i – Componente da velocidade da fase gasosa

u_p – Velocidade da partícula (Gota)

x_p – Vetor posição da partícula

x_i – Coordenada do sistema cartesiano/Comprimento da discretização da malha

y^* - Distância adimensionalisada entre o baricentro do elemento adjacente e a parede

y_P – Distância entre o baricentro do elemento adjacente e a parede

Caracteres latinos maiúsculos

A_P - Coeficiente do método dos volumes finitos

C_D– Coeficiente de arrasto da gota

C_d – Parâmetro de ajuste da equação de transporte da variância da fração de mistura

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

C_μ – Constante de ajuste do modelo k-ε

$C_{1,\varepsilon}$ – Coeficiente da equação taxa de dissipação da energia cinética turbulenta

$C_{2,\varepsilon}$ – Coeficiente da equação taxa de dissipação da energia cinética turbulenta

$C_{3,\varepsilon}$ – Coeficiente de modulação da turbulência (acoplamento interfásico)

E – Constante empírica da lei logarítmica

MW – Massa molar de determinada espécie

N – Número de experimentos

P – Função Densidade de Probabilidade (PDF)

Pe – Número de Peclet

Pr – Número de Prandtl (adimensional)

Re_e – Número de Reynolds de escorregamento da gota (adimensional)

S – Área das faces do volume de controle

S_{ij} – Tensor de segunda ordem de deformação

S_f – Termo fonte da equação de transporte da fração de mistura

$S_{f''2}$ – Termo fonte da equação de transporte da variância da fração de mistura

S_h – Termo fonte da equação de conservação da energia

S_k – Termo fonte da equação da energia cinética turbulenta

S_m – Termo fonte da equação da continuidade

S_{ui} – Termo fonte da equação de quantidade de movimento proveniente do acoplamento interfásico

S_ε – Termo fonte da equação de dissipação da energia cinética turbulenta (acoplamento interfásico)

S_ψ – Termo fonte da variável genérica ψ

$S_{\psi,p,v}$ – Termo fonte da variável genérica ψ para escoamentos de sprays (efeitos evaporativos)

Sc – Número de Schmidt (adimensional)

St – Número de Stokes (adimensional)

T – Temperatura

T_t – Escala de tempo da turbulência

U^* - Velocidade adimensionalisada

U_P – Velocidade no elemento adjacente

V – Volume de um elemento da malha

We – Número de Weber (adimensional)

Y_k – Fração mássica da espécie química k

Caracteres gregos minúsculos

α – Número de gotas dentro de um elemento da malha

α_p – Fração volumétrica da fase líquida

δ_{ij} – Operador delta de Kronecker

μ – Viscosidade dinâmica do Fluido

μ_t – Viscosidade turbulenta

ρ – Massa específica do fluido

ρ_l – Massa específica da fase líquida/dispersa (Gota)

ρ_g – Massa específica do fase gasosa

ε – Taxa de dissipação da Energia Cinética Turbulenta

σ_f – Número de Prandtl para a variância da fração de mistura

σ_{ts} – Tensão superficial

σ_k – Número de Prandtl para a energia cinética turbulenta

σ_ε – Número de Prandtl para a taxa de dissipação da energia cinética turbulenta

σ_t – Número de Prandtl da e

τ_{ij} – Tensor das tensões de Reynolds/Tensor das tensões

τ_p – Escala e tempo das partículas/gotas

τ_w – Tensão na parede

χ – Taxa de dissipação do modelo *flamelet*

ψ – Variável transportada genérica

φ – Relação entre as frações mássicas de combustível e de oxidante/Variável independente do Modelo β-PDF

ω_k – Taxa de produção da espécie química k

Caracteres gregos maiúsculos

Γ – Difusividade

Γ_ψ – Difusividade da variável transportada ψ

Γ_f – Difusividade da fração de mistura

Φ – Razão de equivalência da mistura

Operadores

Δ – Diferença

$\frac{d}{dy}$ – Derivada total em relação à variável y

$\frac{\partial}{\partial y}$ – Derivada parcial em relação à variável y

Σ – Somatório

$\int$ – Integral

$|(\cdot)|$ – Módulo

$\widetilde{(\cdot)}$ – Média de Favre

$\overline{(\cdot)}$ – Média de Reynolds

$\overrightarrow{(\cdot)}$ – Vetor

$(\cdot)''$ – Flutuação turbulenta (decomposição de Favre)

$(\cdot)'$ – Flutuação turbulenta (decomposição de Reynolds)

$(\cdot)''^2$ – Variância (decomposição de Favre)

$(\cdot)'^2$ – Variância (decomposição de Reynolds)

Índices Subscritos

$(\cdot)_0$– Quantidade calculada na região de mínima concentração de combustível (mistura pobre)

$(\cdot)_1$– Quantidade calculada na região de máxima concentração de combustível (mistura rica)

$(\cdot)_f$– Variável relativa ao combustível

$(\cdot)_k$– Variável da espécie química k

$(\cdot)_l$– Variável relativa à fase líquida (dispersante)

$(\cdot)_{ox}$– Variável relativa ao oxidante

$(\cdot)_p$– Variável da partícula (fase dispersante)

$(\cdot)_{st}$– Quantidade calculada na proporção estequiométrica

SUMÁRIO

1. Introdução 23
1.1. Objetivos 26
1.2. Estrutura do texto 26
2. Revisão bibliográfica 28
2.1. Modelagem da turbulência 28
2.1.1. Escoamentos helicoidais 33
2.2. Modelagem da combustão 35
2.2.1. Hipóteses para modelagem da combustão de spray 37
2.2.2. Modelagem da combustão de sprays turbulentos 38
2.3. Modelagem de sprays 40
2.3.1. O modelo de homogeneidade local (LHF) 41
2.3.2. Aproximação por escoamentos separados 42
2.4. Chamas turbulentas de spray de etanol 47
2.4.1. Trabalho desenvolvido por Düwel et al (2007) 48
2.4.2. Trabalho desenvolvido por Sacomano (2011) 49
2.4.3. Trabalho desenvolvido por Li et Zhou (2012) 51
2.4.4. Outros trabalhos 53
3. Modelagem de chamas turbulentas de sprays 55
3.1. Modelagem da turbulência 55
3.1.1. Tratamento matemático da região próxima à parede 60
3.2. Modelagem dos processos de combustão 64
3.2.1. Modelos de combustão baseados no transporte da fração de mistura 64
3.2.2. Fração de mistura e sua variância 66
3.2.3. Modelo dos elementos de chamas laminares 70
3.2.3.1. Conceituação básica do modelo dos elementos de chamas laminares 70
3.2.3.2. Equações de conservação no espaço da fração de mistura: equações do modelo de elementos de chamas laminares 72
3.2.3.3. Mecanismo de cinética química 76
3.2.4. Modelo para a descrição de escoamentos reativos turbulentos 78

3.3. Descrição da fase dispersa (fase líquida) 81
3.3.1. Classificação de sprays 82
3.3.2. Análise cinemática das gotas 84
3.3.3. Modelo de evaporação da fase líquida 85
3.3.4. Número de Weber: parâmetro de avaliação da integridade das gotas 92
3.3.5. Acoplamento entre as fases 93
3.3.6. Descrição do acoplamento da turbulência 96
3.3.6.1. Dispersão turbulenta 97
3.3.6.2. Modulação da turbulência 99
4. Resultados e discussão 101
4.1. Escoamento isotérmico 101
4.1.1. Domínio de cálculo 102
4.1.1.1. Malhas de cálculo 104
4.1.2. Condições de contorno 111
4.1.2.1. Condições de contorno para simulações com representação do *swirler* ... 111
4.1.2.2. Condições de Contorno para simulações sem representação do *swirler* ... 113
4.1.3. Resultados para o domínio completo 114
4.1.3.1. Estudo de independência de malha 114
4.1.3.2. Validação dos resultados numéricos 116
4.1.3.3. Estudo da difusividade numérica 119
4.1.3.4. Estudo do modelo de turbulência 123
4.1.3.5. Estudo da condição de contorno de admissão 125
4.1.4. Resultados para o domínio simplificado 127
4.1.4.1. Estudo de independência de Malha 128
4.1.4.2. Estudo da Difusividade numérica 130
4.1.4.3. Avaliação dos parâmetros de turbulência 134
4.2. Escoamento reativo 137
4.2.1. Condições de contorno 137
4.2.2. Resultados 141
5. Conclusões 150
5.1. Sugestões de continuação deste trabalho 151

6. Referências 153
APÊNDICE A – Descrição da fase contínua: equações de conservação 160
APÊNDICE B – Decomposições de Reynolds e de Favre e equações de transporte médias 164
APÊNDICE C – Equações de chamas de jatos opostos 167

1. Introdução

A descoberta do fogo na pré-história é tida com um dos pontos marcantes da humanidade, pois, nesse momento, foi descoberta a primeira fonte de energia. A combustão ainda é a principal fonte de energia mundial, e dentro desta área, a queima de combustível fóssil ainda é a matriz energética predominante. Chrigui (2005) inicia sua tese afirmando que 80% da energia consumida em todo mundo é oriunda de combustíveis fósseis, salientando que ainda há a predominância dessa fonte. Entretanto, dois fatores significativos levaram a uma intensa pesquisa na área de combustão ao longo do século XX, principalmente durante a segunda metade dele: as duas crises do petróleo e o aumento da consciência social sobre o impacto ambiental dos poluentes formados durante o processo de combustão.

A conscientização sobre os impactos ambientais levou a um intenso estudo dos processos de combustão, consequentemente houve grande melhora na eficiência dos processos reativos. Essa melhora teve impactos significativos na emissão de poluentes, o que pode ser exemplificado pela evolução das normas de emissões veiculares. O Proconve (PROgrama de CONtrole de poluição do ar por VEículos automotores) está em sua sexta etapa e vem constantemente baixando os limites de emissões de poluentes por veículos automotores, o que mostra claramente a evolução constante dos processos de combustão em motores alternativos.

As crises do petróleo de 1973 e 1979, nas quais os países árabes diminuíram a produção e aumentaram o preço desestabilizando a economia mundial (Piletti e Piletti, 1997), explicitaram a dependência mundial dos combustíveis fósseis e a escassez dessa fonte energética. O efeito imediato foi o mesmo da conscientização social, a intensificação na eficiência dos processos visando à diminuição do consumo. Entretanto, a escassez ainda era evidente e, portanto, iniciou-se a pesquisa de novas fontes energéticas.

Dentro desse contexto, foram desenvolvidos novos combustíveis como o etanol, o biodiesel e o hidrogênio, os quais eram obtidos de diferentes fontes. O biodiesel, por exemplo, pode ser obtido de sobras de processos de fabricação de sabão (Hass et al (2001)). A promoção do uso do etanol em larga escala em veículos automotores teve um grande impulso no Brasil durante o programa Proálcool, o qual se iniciou em 1975 como consequência direta da crise do petróleo de 1973. Essas novas fontes energéticas também apresentam outros benefícios, além do aspecto econômico. Por exemplo, há a diminuição da emissão de gases poluentes (Hass et al, 2001), cuja diminuição é ainda maior caso seja considerado o processo de fixação do carbono durante a fotossíntese.

Apesar do avanço técnico obtido durante o século XX, a combustão ainda não é um processo completamente descrito pelas teorias e estudos realizados até hoje. Dentre os tópicos abordados em pesquisas de combustão, destacam-se a interação entre os fenômenos turbulentos e os fenômenos reativos, os mecanismos de cinética química e os modelos de combustão.

A maioria das aplicações industriais de câmaras de combustão ocorre em regime turbulento, o que destaca a necessidade da compreensão dos fenômenos físicos da turbulência e sua modelagem. Até hoje, a descrição da turbulência e sua modelagem são tópicos em que ainda há espaço para grande discussão, dado que a sua descrição completa ainda não foi atingida (Pope, 2000). Adicionalmente, a interação entre turbulência e combustão aumenta a complexidade dos fenômenos envolvidos em processos de combustão e os desafios para uma teoria que consiga descrever a interação dos fenômenos corretamente. Apesar da dificuldade em modelar e descrever chamas turbulentas, elas têm aspectos vantajosos, como a intensificação do processo de mistura entre oxidante e combustível em chamas turbulentas difusivas e a diminuição do tamanho das câmaras de combustão, devido às menores escalas de comprimento em escoamentos turbulentos.

Chamas turbulentas difusivas são amplamente estudadas, o que pode ser observado pela grande quantidade de trabalhos desenvolvidos tanto com combustíveis gasosos (Chen et al, 1994 e Fiorina et al, 2009) quanto líquidos (Apte et al, 2003, Apte et al, 2009 e Jones et al, 2011). Entretanto, há uma grande dificuldade em estudar esse tipo de chama, tanto numérica quanto experimentalmente. Em um experimento completo de chamas turbulentas difusivas, faz-se necessária a medição da temperatura, das espécies químicas e do campo de velocidades do escoamento, com resolução temporal e espacial. Em uma simulação numérica, são necessários modelos para descrever todos os fenômenos físicos que ocorrem simultaneamente em um processo reativo, o que pode ser observado nos trabalhos de Jones e Whitelaw (1982), Faeth, (1977), Faeth, (1983), Faeth (1987), Düwel et al (2007), Fukumasu (2010) e Sacomano (2011). Ao introduzir um combustível líquido, a dificuldade é ainda maior, pois há a necessidade de modelar a interação entre as fases líquida e gasosa. Em um experimento de escoamentos reativos de combustíveis líquidos, seria necessária a descrição da fase líquida através de métodos como o PDPA (*Phase Doppler Particle Anemometry*), que permite a obtenção do diâmetro das gotas e sua respectiva velocidade dentro da fase gasosa. Enquanto em uma simulação, novos modelos devem ser introduzidos para descrever a fase líquida, conforme descrito por Faeth (1977), Faeth, (1983) e Faeth (1987) e apresentado nos trabalhos de Chrigui (2005), Düwel et al (2007), Rochaya (2007), Sacomano (2011) e Li e Zhou (2012).

O estudo da combustão do etanol tem se intensificado nas últimas três décadas, decorrência direta da maior produção e utilização do etanol em escala mundial. Entretanto, ainda há uma falta de trabalhos que estudem escoamentos reativos de spray de etanol. A maioria dos trabalhos nessa área foi desenvolvida nos últimos dez anos, dentre os quais se destacam os trabalhos numéricos de Düwel et al (2007), Sacomano (2011), Fukumasu (2010) e Li e Zhou (2012), e os trabalhos experimentais de Masri e Gounder (2009), Fukumasu et al. (2013) e Villanueva (2013).

Uma grande dificuldade da combustão turbulenta é o acoplamento entre a cinética química e os fenômenos turbulentos da dinâmica dos fluidos. O mecanismo de cinética química define as principais reações químicas durante o processo de oxidação de um determinado combustível. Os trabalhos de Marinov (1999), Leplat et al (2011) e Demétrio (2013) demonstram que são necessários estudos de mecanismos de cinética química para melhor descrever o processo de combustão de cada combustível e verificar a aplicabilidade de cada mecanismo. Marinov (1999) explicita a necessidade da definição de mecanismos para novos combustíveis ao salientar que a compreensão do processo reativo do etanol aumentaria a eficiência dos sistemas de combustão que utilizam esse combustível e diminuiria a emissão de poluentes.

Dentro deste cenário, este trabalho avança no estudo dos fenômenos envolvidos na combustão de sprays de etanol, utilizando-se de métodos numéricos. Sacomano (2011) desenvolveu uma pesquisa semelhante ao presente trabalho com código próprio utilizando o modelo de combustão de difusão *flamesheet* (ou modelo de folha de chama), o qual simplifica a cinética química a um problema de mistura entre o oxidante e combustível. O autor concluiu que as dificuldades na representação da chama de etanol estudada foram consequência direta dos modelos de turbulência e de combustão utilizados. O modelo de combustão não era capaz de descrever chamas com características parcialmente pré-misturadas, apenas difusivas. Entretanto, a chama experimental de Masri e Gounder (2009) tem essas características, o que não permitiu a descrição precisa da estrutura da chama. Em seu trabalho, Sacomano (2011) obteve boa correlação para a distribuição de diâmetro das partículas da fase líquida. Entretanto, a temperatura da fase gasosa próxima ao bocal estava elevada em comparação ao experimento, o que eleva a taxa de evaporação da fase líquida e consequentemente interfere na distribuição do diâmetro das gotas. Portanto, é possível verificar certa dificuldade e imprecisão na representação da estrutura de chama.

No presente trabalho, descreve-se a chama turbulenta de spray de etanol com o modelo de combustão de elementos de chamas laminares (doravante referido como *flamelet*, denominação do modelo na língua inglesa), utilizando o mecanismo reduzido desenvolvido por Demétrio (2013). Este modelo utiliza um modelo de cinética química mais complexo do que o modelo *flamesheet* usado em Sacomano (2011), que considera apenas uma única reação global irreversível de oxidação do etanol. Além disso, o modelo *flamelet* se afasta de uma das principais hipóteses do modelo *flamesheet*, a cinética química infinitamente rápida.

O escoamento da fase gasosa é caracterizado como helicoidal, uma vez que a chama a ser descrita é estabilizada por um *swirler*. A dificuldade do modelo k-ε em caracterizar escoamentos com movimentos helicoidais (Versteeg e Malalasekera, 2007) e escoamentos com alta anisotropia fez com que fosse escolhido o *Reynolds Stress Model* (RSM) para o desenvolvimento deste trabalho. O trabalho de Sacomano (2011) utilizou o modelo k-*ε*, pois as características do escoamento permitiam.

1.1. Objetivos

O objetivo deste trabalho, em uma visão mais ampla, é a descrição numérica de chamas de sprays turbulentos de etanol, através do método dos volumes finitos. A validação dos modelos é realizada pela comparação com trabalhos experimentais desenvolvidos no próprio LETE - Laboratório de Engenharia Térmica e Ambiental, por Fukumasu et al.(2013).

O objetivo específico deste trabalho é melhorar a descrição da combustão turbulenta do etanol em comparação ao trabalho de Sacomano (2011). Visando a este objetivo, foi simulado o escoamento de uma chama de spray de etanol utilizando o modelo de combustão *flamelet* com o mecanismo de cinética química desenvolvido por Demétrio (2013). Para atingir esse objetivo, foi utilizado o código comercial ANSYS FLUENT®, utilizando as ferramentas proporcionadas por esse código.

1.2. Estrutura do texto

A primeira seção deste texto apresenta a motivação do estudo, introduzindo alguns aspectos do cenário mundial de matrizes energéticas e pesquisas relacionadas ao desenvolvimento do estudo da combustão do etanol e definindo os objetivos que pretendem ser atingidos com a presente dissertação.

A seção 2 apresenta uma revisão bibliográfica do estado da arte de simulações numéricas de sprays turbulentos reativos. A revisão bibliográfica tem dois objetivos principais: a discussão dos modelos disponíveis e apresentação dos trabalhos que serviram como base para o desenvolvimento do presente trabalho. As referências citadas delinearam as vantagens e desvantagens de cada modelo, permitindo comparações entre as principais opções de modelagem disponíveis. Todos os principais tópicos envolvidos na modelagem deste fenômeno são discutidos sem grande aprofundamento matemático, apenas introduzindo um panorama geral das pesquisas desenvolvidas na área e os modelos utilizados.

A seção 3 define os modelos utilizados no desenvolvimento deste estudo e discute as hipóteses e limitações intrínsecas a cada modelo, ou seja, apresenta a modelagem física e matemática envolvida em cada um dos modelos. Esses modelos já foram apresentados brevemente na seção 2, porém apenas qualitativamente. Neste ponto, há o aprofundamento dos modelos escolhidos para o desenvolvimento do estudo. Primeiro, é apresentado o modelo de turbulência. Em seguida é apresentado o modelo matemático da fase líquida e seu acoplamento com a fase gasosa. O último tópico abordado é o modelo de combustão para escoamentos turbulentos.

A seção 4 apresenta os resultados experimentais disponíveis, utilizados para validação dos resultados numéricos, e os resultados numéricos obtidos pela simulação do escoamento. A discussão dos resultados é feita com base na avaliação dos modelos e sua capacidade de descrever os fenômenos observados nos resultados experimentais.

A seção 5 expõe as conclusões extraídas dos resultados previamente discutidos na seção 4, definindo os pontos principais da discussão e realizando um balanço da modelagem utilizada. Além disso, são propostas continuações do presente trabalho, destacando os modelos que podem sobrepujar as deficiências dos resultados do presente trabalho.

2. Revisão bibliográfica

Escoamentos turbulentos ainda não são completamente descritos pelos modelos físicos e matemáticos atuais. Entretanto, as características do regime turbulento são bem definidas e, apesar das deficiências dos modelos, esses possibilitam avaliações dos escoamentos estudados através de simulações numéricas. A descrição de fenômenos reativos também apresenta grandes desafios como a descrição completa de mecanismos de cinética química e a influência das propriedades do escoamento sobre a progressão do processo reativo. Portanto, ao se discutir escoamentos reativos turbulentos, as dificuldades se acoplam e os modelos de combustão e turbulência interagem, aumentando o grau de dificuldade da formulação matemática.

Este trabalho estuda chamas de sprays o que dificulta ainda mais a modelagem, pois a introdução de uma segunda fase, líquida, imersa em um meio gasoso implica em um acoplamento entre as fases. A presença das partículas altera o regime turbulento da fase gasosa, assim como é observada, por exemplo, a perturbação do campo de velocidades do escoamento devido à presença das partículas.

O primeiro passo deste trabalho é discutir os modelos atualmente desenvolvidos e empregados nas três principais áreas de estudos de chamas de sprays turbulentos: modelagem da turbulência, modelagem da fase discreta e modelagem da combustão. Desta forma, é apresentado o estado da arte nesses três tópicos, o que permite situar este trabalho em relação ao grau de evolução das modelagens presentes. Dentro dessa discussão também é realizada uma discussão dos presentes trabalhos mais atuais de chamas de sprays de etanol.

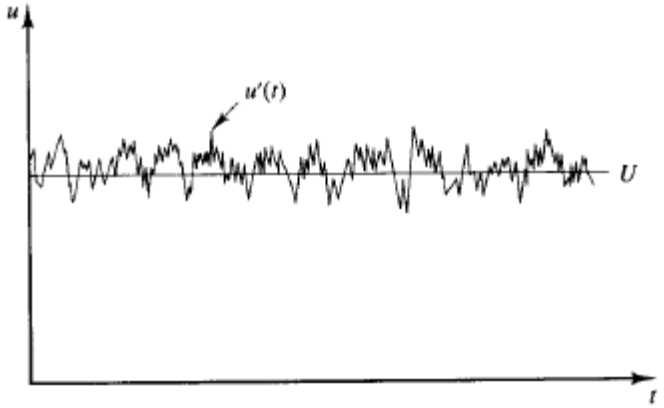
2.1. Modelagem da turbulência

A turbulência é caracterizada como o último grande problema em aberto da mecânica dos fluidos (Pope, 2000). Essa descrição mostra o grande desafio que os pesquisadores enfrentam para caracterizar a turbulência. Tennekes e Lumley (1972) apresentam a turbulência como um fenômeno físico sem definição, mas com uma séria de características peculiares, dentre as quais pode se destacar a variação aleatória de propriedades do escoamento.

Exemplificando essa característica da turbulência, tem-se a Figura 1, a qual descreve o sinal da variável u em função do tempo. Trata-se de um regime estatisticamente estacionário, pois a média temporal do sinal u não se altera. Entretanto, observam-se oscilações u’(t) em torno dessa média. A turbulência é um fenômeno aleatório, conforme pode ser inferido ao analisar o

sinal da Figura 1. Porém, o valor médio da variável (U) é constante, o que permite a conclusão de que se trata de um escoamento estatisticamente estacionário. O caráter transiente da turbulência é inerente ao fenômeno físico, independente do comportamento médio do escoamento (transiente ou regime permanente).

Figura 1 – Sinal Turbulento da variável u (Versteeg e Malalasekera, 2007)



Uma das principais características da turbulência é a aleatoriedade. Todavia, é importante ressaltar o caráter determinístico da turbulência, uma vez que há equações que descrevem matematicamente as variáveis do escoamento (equações de conservação, exemplos: Continuidade e Quantidade de Movimento). Nesta dissertação, serão discutidas algumas formulações matemáticas, sendo que muitos aspectos físicos e características fenomenológicas físicos da turbulência não serão abordados.

A modelagem da turbulência representa um tópico importante na simulação de escoamentos turbulentos reativos. A turbulência intensifica o processo de mistura, intensificando-o. O aumento da taxa de mistura tem aspectos significativos em chamas turbulentas tanto pré-misturadas quanto difusivas. Em regime turbulento, a velocidade da frente de chama é muito maior do que a frente de chama laminar, o que permite ignorar a contribuição laminar em casos turbulentos (Turns, 2000). Já em chamas difusivas, as chamas turbulentas têm uma zona de reação mais espessa, consequência direta do aumento da taxa de mistura e dos coeficientes de difusão turbulentos, entretanto as demais dimensões das chamas difusivas turbulentas são menores do que as laminares para um mesmo fluxo mássico de oxidante e combustível.

Destacada a importância da modelagem para processos de combustão turbulentos, passa-se à descrição da turbulência. Wilcox (1993) atém-se à formulação matemática da turbulência visando a sua aplicabilidade na solução numérica de escoamentos (CFD). O principal foco é na apresentação de modelos RANS (Reynolds-Averaged Navier-Stokes), entretanto o autor

apresenta o modelo LES (*Large Eddy Simulation* – Simulação das Grandes Escalas) e a simulação DNS (Direct Numerical Simulation).

Os modelos RANS baseiam-se na modelagem das equações médias de transporte, as quais são obtidas a partir da decomposição de Reynolds e subsequente aplicação do operador de média estatística. A equação média de transporte da quantidade de movimento apresenta um termo de segunda ordem desconhecido, o qual precisa ser modelado.

Existem várias possibilidades de modelos RANS que podem ser empregados. Aqui serão discutidos os modelos k-ε padrão (modelo de duas equações baseado na energia cinética e na equação da dissipação turbulenta) e algumas de suas variações, e o modelo RSM (Reynolds Stress Model), o qual define equações modeladas de transporte para os momentos de segunda ordem.

O modelo k-ε padrão é o modelo de turbulência mais utilizado e validado dentre os modelos RANS e obteve resultados representativos para vários escoamentos com recirculações e finas camadas de cisalhamento sem a necessidade de ajustes das constantes (Versteeg e Malalasekera, 2007). Apesar da boa aderência deste modelo para escoamentos confinados, o mesmo desempenho não é observado para escoamentos livres. A predição do escoamento de jatos livres não é bem representada, pois o modelo tem dificuldade em descrever camadas cisalhantes de baixa intensidade, principal característica de escoamentos livres. Essa dificuldade é atribuída ao fato de que esses escoamentos apresentam baixa produção de energia cinética turbulenta e alta taxa de dissipação. Entretanto, é possível obter melhores resultados realizando ajustes nas constantes do modelo (Versteeg e Malalasekera, 2007 e Sacomano, 2011). Vários trabalhos foram desenvolvidos nesse sentido, Sacomano (2011) discutiu que melhores resultados para escoamentos de chamas turbulentas de spray foram obtidos ajustando uma constante da equação de transporte da taxa de dissipação da energia cinética turbulenta, $C_{2,\varepsilon}$, a qual multiplica o termo de dissipação dessa variável. Fiorina et al (2009) propõem valor semelhante ao utilizado por Sacomano (2011) para aumentar a precisão do modelo para jatos axissimétricos. Pope (1978) salienta que essa equação tem de ser ajustada para cada caso e há grandes variações do comportamento da equação para cada escoamento e Versteeg e Malalasekera (2007) atribui a maioria das deficiências do modelo k-ε padrão em escoamentos com altas taxas de deformação à formulação da equação de ε.

O modelo k-ε padrão tem outra característica importante: a isotropia da viscosidade turbulenta definida pela hipótese de Boussinesq. A hipótese de Boussinesq determina que as tensões de Reynolds podem ser modeladas de modo análogo ao modelo das tensões cisalhantes. Esta hipótese define a viscosidade turbulenta ou *eddy viscosity*, a qual é a fonte da isotropia do

modelo k-ε. A viscosidade é calculada a partir da energia cinética turbulenta e sua dissipação. Essas variáveis, para um determinado elemento do domínio, não variam com a direção, sendo iguais em todas as direções, caracterizando a viscosidade como isotrópica.

Essa isotropia implica na deficiência do modelo em descrever escoamentos helicoidais (*swirling flows*) e com grandes taxas de deformação.

Voltando o foco para o emprego do modelo k-ε em simulações de chamas de sprays turbulentos, Hollman e Gutheil (1998) não conseguiram descrever as recirculações encontradas experimentalmente, o que evidencia a incapacidade do modelo em descrever escoamentos livres e com altas taxas de deformação. Em Ge e Gutheil (2008a), a utilização de parâmetros padrões do modelo k-ε diminui a precisão dos resultados evidenciando possíveis problemas na descrição da turbulência. Os trabalhos de Chrigui et al (2009) e Mando et al (2009) utilizaram também o modelo k-ε para descrever o regime turbulento da fase gasosa em simulações de escoamentos de sprays.

Baseado nas deficiências do modelo k-ε padrão, outros modelos foram desenvolvidos e avaliados. A dificuldade em representar escoamentos turbulentos com baixo número de Reynolds levou ao desenvolvimento do modelo k-ε de duas camadas, no qual tratamento matemático especial é empregado na região próxima parede. O modelo k-ε ReNormalization Group (RNG) altera a equação de transporte da taxa de dissipação da energia cinética turbulenta e as equações de Navier-Stokes. O modelo adiciona k-ε RNG se baseia em técnicas estatísticas rigorosas aplicadas a teoria das pequenas escalas de Kolmogorov. Essa técnica leva a alteração do termo de produção da dissipação da energia cinética turbulenta e a introdução de uma nova equação para a viscosidade turbulenta. Essas modificações removem as menores escalas do escoamento das equações de transporte e as representam através das maiores escalas e da viscosidade turbulenta modificada. A dificuldade em representar gradientes adversos de pressão produziu os modelos k-ω (Wilcox, 1993) e o modelo k-ω de Menter, os quais tem boa aplicabilidade para escoamentos externos, principalmente para análises de aerodinâmica (Versteeg e Malalasekera, 2007). Nesses modelos, introduz-se a frequência da turbulência, ω, a qual é empregada como segunda variável em detrimento de ε.

Modelos k-ε não lineares afastam-se da hipótese de Boussinesq e conseguem caracterizar com maior precisão escoamentos anisotrópicos. Dentre esses, destaca-se o modelo com tensores cúbicos dos gradientes de velocidade que apresentam resultados semelhantes aos do modelo RSM.

O RSM se apresenta como a melhor alternativa de modelos RANS, pois sua aplicabilidade, sem ajustes das constantes do modelo é maior em comparação ao modelo k-ε padrão e os

demais modelos baseados nessa equação. Entretanto o modelo RSM apresenta a mesma dificuldade do modelo k-ε para representar escoamentos livres com recirculações e jatos axissimétricos. As limitações do modelo RSM são associadas à modelagem da taxa de dissipação das tensões de Reynolds, a qual é descrita pela mesma equação de transporte do modelo k-ε padrão (Versteeg e Malalasekera, 2007).

Entretanto sua sensibilidade a escoamentos com altos gradientes de velocidade e movimentos helicoidais (s*wirling flows*) aumentam a aplicabilidade do modelo a uma gama maior de escoamentos (Versteeg e Malalasekera, 2007 e Rochaya, 2007). Esses avanços são diretamente relacionados à formulação matemática do modelo que considera a anisotropia das tensões de Reynolds. Assim como observado para o modelo k-ε, várias tentativas de aperfeiçoamento do modelo foram empregadas, como modelos para baixos números de Reynolds (para melhorar o tratamento matemático do modelo próximo à parede nesses escoamentos) e a utilização da equação de ω em detrimento da taxa de dissipação da energia cinética turbulenta.

Uma comparação do modelo RSM com os modelos k-ε mostra que a capacidade descritiva do primeiro é maior (Versteeg e Malalasekera, 2007), exatamente por representar diretamente as tensões de Reynolds, porém claramente seu tempo de processamento é bem maior, uma vez que são resolvidas sete equações, em contraste com os modelos k-ε, que se baseiam em apenas duas equações.

Os resultados obtidos por Chen e Pereira (1996) mostram que a aplicação do modelo RSM adiciona anisotropia aos modelos de escoamentos separados estocásticos (*Stochastic Separated Flows*), melhorando a representatividade dos resultados obtidos para escoamentos de sprays turbulentos. O RSM também foi aplicado por Lain e Sommerfeld (2003) e Rochaya (2007) com esse propósito.

Uma alternativa ao RANS, os modelos LES (*Large Eddy Simulation* ou Simulação das grandes escalas) ainda tem um alto custo computacional, inviabilizando sua utilização em larga escala na indústria. A abordagem do LES consiste em calcular os valores instantâneos das variáveis para as maiores escalas e modelar as menores escalas. Desta forma, aplica-se um filtro espacial, cujo valor de referência é a dimensão característica dos elementos da malha. A contribuição das menores escalas é estimada através de modelos como o de Smagorinsky (Fukumasu, 2010).

A abordagem LES obtém bons resultados numéricos, porém esses resultados são obtidos através de elevado tempo de processamento e alta alocação de recursos computacionais. Em parte, a necessidade de grande capacidade de processamento é consequência do processo de

filtragem computacional, o qual exige malhas refinadas para a obtenção de resultados satisfatórios. O número de publicações de chamas de spray utilizando o modelo LES está aumentando nos últimos anos, devido ao aumento da capacidade de processamento, isso é especificado pelos recentes trabalhos de Jones et al. (2011), Chrigui et al (2012). Além desses trabalhos, observam-se trabalhos investigativos da interação turbulenta entre as fases (Jones et al, 2010 e Apte et al 2003) e trabalhos investigativos de escoamentos de sprays evaporativos (Apte et al, 2009).

A utilização da DNS (*Direct Numerical Simulation*) ainda está restrita a casos em que o número de Reynolds é baixo. No caso, não há modelos e a simulação descreve as propriedades instantâneas do escoamento, porém os elementos da malha tem que ser menores do que a escala de comprimento de Kolmogorov (Pope, 2000), a qual é determinada pelo número de Reynolds do escoamento. A abordagem DNS implica em custos computacionais ainda maiores que os envolvidos na abordagem LES. Esse ponto acaba impossibilitando seu uso em estudos de chamas e câmaras de combustão para o estágio atual de desenvolvimento tecnológico da computação.

2.1.1. Escoamentos helicoidais

Escoamentos helicoidais são escoamentos complexos, caracterizados por altas taxas de deformação e pela anisotropia, conforme descrito em Muntean et al. (2005a) e Mutean et al. (2005b). Este tipo de escoamento tem vasta aplicação industrial dos quais podem ser citados injetores do tipo *swirler*, separadores, difusores de câmaras de conforto térmico em cabines de aeronaves e câmaras de combustão com chama estabilizada pelo escoamento helicoidal. A aplicação em vários seguimentos mostra a importância do estudo desse tipo de escoamento.

Neste trabalho, a chama é estabilizada por um *swirler* e, portanto, a revisão bibliográfica deste tipo de escoamento deve ser levantada para verificar o modelo de turbulência mais adequado. Muntean et al. (2005a) descrevem escoamentos helicoidais invíscidos confinados com baixo número de *swirl*, utilizando o software comercial ANSYS FLUENT®. Apesar de desconsiderarem a viscosidade, os autores realizam um estudo importante dos métodos de discretização e dos métodos de acoplamento entre as equações de quantidade de movimento e de conservação de massa. Ao analisar os resultados numéricos com resultados experimentais, os autores concluíram que modelos desenvolvidos com métodos de segunda ordem tem melhor aderência aos resultados experimentais do que os modelos desenvolvidos com métodos de discretização de primeira ordem. Em relação ao método de interpolação da

pressão, 4 diferentes métodos foram avaliados pelos autores. Dos modelos estudados, concluiu-se que o método PRESTO (*PREssure STaggering Option scheme*) apresentou melhores resultados e sua utilização foi aconselhada pelos autores. O último parâmetro estudado foi o método de acoplamento pressão-velocidade. Muntean et al. (2005a) desenvolveram simulações utilizando os métodos SIMPLE, SIMPLEC e PISO e compararam os resultados com dados experimentais. A comparação permitiu concluir que o método PISO permitiu uma melhor descrição da velocidade axial na linha de centro em comparação aos demais métodos. Em suma, os autores avaliaram o impacto dos diversos métodos numéricos sobre a descrição de escoamentos helicoidais para escoamentos invíscidos. Dessa forma, os autores excluíram os erros introduzidos por possíveis deficiências de modelos físicos.

Muntean et al. (2005b) continuam o estudo desenvolvido pelos mesmos autores em Muntean et al. (2005a), descrevendo um escoamento helicoidal confinado turbulento com baixo número de número de *swirl*. Neste artigo, os autores procuram comparar o desempenho do código FENFLOSS, desenvolvido na Universidade de Stuttgart com modelo e baseado na simulação das granes escalas, e o com o desempenho do modelo RSM implantado no software ANSYS FLUENT®. Os resultados do código FENFLOSS apresentaram discrepâncias em relação aos resultados experimentais. A componente tangencial da velocidade foi subestimada, enquanto a componente axial teve comportamentos diferentes para os diferentes modelos de submalha propostos. O método VLES (*Very Large Eddy Simulation*) subestimou a componente axial, já o método Kim-Chen subestimou a componente axial. Ambos os modelos tiveram as maiores diferenças em relação aos dados experimentais na região da linha de centro do tubo. O autor atribuiu a deficiência dos resultados ao tamanho da malha considerado muito grosseira e à isotropia dos modelos utilizados. Os resultados com o modelo RSM de turbulência tiveram melhor aderência do que os obtidos pelo código FENFLOSS. Estes foram comparados com os resultados experimentais e os resultados do modelo invíscido obtido por Muntean et al. (2005a). O modelo RSM, assim como o invíscido, superestimou a componente axial da velocidade, entretanto apresentou maior discrepância em relação ao experimento, especialmente na região da linha de centro. A componente tangencial da velocidade foi subestimada pelo modelo RSM e teve pior aderência aos resultados experimentais do que o caso invíscido. Apesar das deficiências, este modelo teve melhores resultados do que os modelos implantados no código FENFLOSS, porém a falta de um desenvolvimento de malhas mais refinadas para os modelos LES não permite concluir que de fato este modelo tem maiorias deficiências em relação ao RSM.

Shamami e Birouk (2008) avaliaram diversos modelos de turbulência em combustores com escoamentos helicoidais. Assim como Muntean et al. (2005b), os métodos numéricos de discretização e acoplamento das equações de quantidade de movimento e conservação foram fixados. Desta forma, é possível analisar apenas os erros introduzidos pelos modelos de turbulência. Primeiramente, foram avaliados os modelos de turbulência RANS dentre os quais o autor estudou os modelos k-ε padrão, k-ε realizável, k-ε RNG e RSM, tanto com método linear quanto quadrático para o termo de interação entre pressão e deformação. Os autores observam que todos os modelos foram capazes de descrever a recirculação na linha de centro para escoamento com alto número de *swirl*, porém, para baixos números de *swirl*, apenas o modelo RSM conseguiu prever a recirculação. Desta forma, fica clara a melhor adequação do modelo RSM para escoamentos com *swirl*. Os autores salientaram que mesmo o modelo RSM teve dificuldade em caracterizar as tensões turbulentas, apesar de apresentarem resultados muito mais precisos do que os modelos de duas equações.

Em suma, o modelo de turbulência RSM é o mais adequado dentre os modelos RANS para escoamentos helicoidais. Entretanto, conforme salientado Shamami e Birouk (2008), este modelo também apresenta deficiências em relação à descrição do regime turbulento, o que é descrito pelas diferenças entre as tensões turbulentas obtidas experimental e numericamente.

2.2. Modelagem da combustão

Uma análise superficial da matriz energética mundial já permite concluir que grande parcela da energia produzida e utilizada é proveniente de processos de combustão. O avanço da modelagem da combustão é fundamental para maior compreensão dos fenômenos envolvidos, diminuição da emissão de poluentes e aumento da eficiência dos processos reativos.

Um bom modelo de combustão procura descrever com precisão as reações químicas presentes no escoamento e seu impacto sobre as propriedades e variáveis do escoamento. A combustão libera energia e altera a fração mássica das espécies químicas, esses efeitos são contabilizados nas equações de transporte da entalpia e espécies químicas através de termos fontes, os quais afetaram significativamente as propriedades do escoamento.

A maioria dos sistemas de combustão trabalha sobre regime turbulento (Jones e Whitelaw, 1982), portanto o foco principal é a discussão de modelos de combustão e sua interação com a turbulência. A descrição de modelos de combustão turbulentos passa por três pontos chaves: a consideração de um mecanismo de reação, o tratamento estatístico do modelo de combustão

(o qual depende da modelagem turbulenta) e a introdução dos mecanismos e modelos de combustão nas equações de transporte.

O mecanismo de cinética química define o conjunto de reações químicas que procuram descrever todo o processo de reação. O estudo de Demétrio (2013) mostra claramente a profundidade envolvida na proposição de um mecanismo e de um mecanismo simplificado. Marinov (1999) propôs um mecanismo bastante extenso para a combustão do etanol, entretanto sua aplicabilidade a sistemas industriais é reduzida exatamente por ser extenso, pois modelos baseados nesse mecanismo teriam que resolver equações de transporte para cada uma das espécies do mecanismo. Baseado em seu trabalho e no trabalho de Leplat et al (2011), Demétrio (2013) propôs mecanismos de reação, eliminado reações e espécies químicas com papel secundário no processo oxidativo, ou seja, que não tem grande influência no desenvolvimento da oxidação do etanol. A validação foi feita através da comparação dos resultados das simulações de chamas simples com solução algébrica, como as chamas de fluxos opostos (ou *opposed flames*), com resultados experimentais e os resultados de Leplat (2011). O estudo do mecanismo de reação é a base para o desenvolvimento de modelos de combustão com melhor representatividade dos fenômenos físicos envolvidos. Existem modelos que propõem a consideração apenas da reação global irreversível de oxidação, como o modelo *flamesheet*, utilizado por Sacomano (2011).

A utilização desses mecanismos é independente do regime do escoamento, entretanto escoamentos turbulentos dificultam a aplicação direta dos mecanismos de reação, pois a simulação direta das escalas de tempo e comprimento de escoamentos reativos turbulentos ainda não é viável. Assim, há a necessidade de modelar a turbulência através da decomposição das variáveis do escoamento e aplicação da média (Jones e Whitelaw, 1982) (modelos RANS/FANS) ou da filtragem espacial para simulação direta das grandes escalas e modelagem das menores escalas (modelos LES).

Entretanto, o modelo matemático das reações químicas representa a taxa instantânea de formação das espécies químicas, o que introduz a necessidade de um tratamento estatístico para ligar as diferenças entre as formulações da modelagem da turbulência e da combustão. Normalmente, são utilizadas funções densidade de probabilidade (*Probability Density Functions* – PDF) para obter o valor médio das variáveis do escoamento a partir das variáveis instantâneas definidas pelo modelo de combustão.

O mecanismo de reação independe da classificação da chama em pré-misturada, difusiva ou parcialmente pré-misturada, porém diferentes modelos de combustão foram desenvolvidos

para cada uma dessas classificações, o que torna a classificação da estrutura da chama um ponto importante para escolha do modelo correto de combustão.

Essas classificações foram desenvolvidas para chamas monofásicas e não para chamas de sprays. Logo, esse conceito precisa ser expandido para a caracterização de chamas de sprays.

2.2.1. Hipóteses para modelagem da combustão de spray

A chama de sprays tem características de chama de difusão, entretanto Chrigui (2005) salienta que é difícil observar chamas puramente de difusão e chamas puramente pré-misturadas. Normalmente são observados os dois fenômenos nos processos de combustão reais.

A análise de uma única gota é descrita pela difusão do vapor do combustível na fase gasosa, porém a análise de um spray composto por várias partículas é mais complexa e não deve ser considerado um problema puramente de difusão. Faeth (1977) define que uma analogia é possível entre chamas monofásicas e chamas de sprays, verificando se a nebulização das gotas ocorre diretamente no domínio onde ocorrerá a combustão ou se a injeção é feita em uma pré-câmara com ar e posterior carregamento das gotículas até o local da chama. A primeira é classificada como chama de spray difusiva, enquanto a segunda, como pré-misturada. Porém, há a possibilidade de chamas de sprays apresentarem características de estruturas de chamas pré-misturadas e de chamas difusivas. Um exemplo são os resultados experimentais de chamas de spray de acetona e etanol obtidos por Masri e Gounder (2009), os quais demonstram que as chamas apresentam características de chamas difusivas e chamas pré-misturadas, evidenciando o caráter de chama parcialmente pré-misturada. Ao analisar a estrutura do injetor utilizado no experimento, observa-se que é esperado certo grau de pré-mistura, o que é demonstrado pelos resultados. Este exemplo define que a chama de sprays pode apresentar características de diferentes estruturas de chamas conforme a configuração dos componentes. Assim, como a classificação da estrutura das chamas, a maioria dos modelos utilizados foi desenvolvida para chamas monofásicas e sua extensão para sprays também não é trivial.

Normalmente, assume-se que as reações ocorrem de chamas de sprays ocorrem analogamente ao que é observado para chamas monofásicas, ignorando a possibilidade de chamas-envelope (Faeth, 1983).

Discutida a aplicabilidade dos modelos, passa-se à apresentação de trabalhos utilizando os vários modelos de combustão utilizados em sprays.

2.2.2. Modelagem da combustão de sprays turbulentos

Chrigui (2005) apresenta os modelos de difusão *flamesheet* (modelo folha de chama), modelo de equilíbrio, modelo *flamelet*, todos baseados na solução da equação de transporte da fração de mistura e da variância da fração de mistura. Sobre estes modelos, comumente são aplicadas as β-PDF's para tratamento estatístico das variáveis do modelo de combustão.

Sacomano (2011) descreveu a combustão de sprays de etanol através do modelo β-PDF de *flamesheet* não adiabático, considerando o efeito do resfriamento adiabático sobre a equação de energia. Conforme discutido na introdução, seus resultados da distribuição do diâmetro de gotas foram satisfatórios, entretanto as temperaturas da fase gasosa próximas ao bocal do injetor eram elevadas. As temperaturas elevadas intensificam a evaporação das gotas, alterando a distribuição de diâmetro das gotas e consequentemente deveriam levar a menores diâmetros de gotas do que os experimentais, o que não foi observado. O autor atribuiu as diferenças ao modelo de combustão desenvolvido no seu código. A chama que o autor buscava representar numericamente tinha características de chamas parcialmente pré-misturadas (Masri e Gounder, 2009) e o modelo *flamesheet* modela chamas difusivas. Assim, as dificuldades na descrição da chama foram atribuídas às limitações do modelo de combustão. Uma característica marcante do modelo *flamesheet* é a redução do mecanismo de reação química a reação global irreversível de oxidação do combustível.

O modelo empregado por Rochaya (2007) para chamas de spray de diesel e etanol foi modelo adiabático β-PDF de *flamelets*. O modelo *flamelet*, assim como o *flamesheet*, se baseia na fração de mistura para descrever a estrutura da chama, porém o modelo considera um mecanismo de cinética química mais complexo. Definido o mecanismo, resolvem-se as equações de transporte de chamas com soluções analíticas, normalmente as chamas opostas (*opposed flames*, Peters, 2000) previamente ao cálculo. A partir dos resultados, são definidas tabelas de referência, que serão utilizadas durante o cálculo. Conceitualmente, o modelo *flamelet* para escoamentos turbulentos assume que um pequeno e instantâneo elemento de chama dentro das estruturas turbulentas tem a mesma estrutura de uma chama laminar (Poinsot e Veynante, 2000). Conforme será discutido na seção 3, essa hipótese é válida até o ponto que a espessura da zona de reação é menor do que as menores escalas turbulentas do escoamento. Uma diferença significativa entre os trabalhos de Sacomano (2011) e Rochaya (2007) é a consideração do fenômeno resfriamento evaporativo. Enquanto o primeiro definiu *flamesheets* não adiabáticas para considerar esse fenômeno, o segundo utilizou *flamelets* adiabáticos e, portanto, não considerou o resfriamento evaporativo das partículas. Düwel et al

(2007) e Hollmann e Gutheil (1998) utilizaram uma variação do modelo β-PDF *flamelets* laminares, na qual é considerado o resfriamento evaporativo das gotículas, denominado modelo elementos de chamas laminares de sprays. Hollmann e Gutheil (1998) destacam a necessidade da utilização desse modelo para representar o efeito do resfriamento evaporativo sobre a estrutura da chama com maior precisão. Ge e Gutheil (2008a) utilizaram o modelo joint β-PDF *flamelet* não adiabático, porém utilizando três métodos diferentes de tratamento estatístico: a β-PDF padrão, uma β-PDF modificada e o método das PDF's transportadas como tratamento estatístico das variáveis, conforme descrito por Jones e Whitelaw (1982) para chamas monofásicas. Os resultados permitem concluir que de fato o método das PDF's transportadas é mais preciso que o método β-PDF e o método β-PDF modificado. Porém, o método β-PDF modificado conseguiu reproduzir com boa precisão os resultados obtidos pelo método das PDF's transportadas, sendo uma melhor opção, devido ao menor custo computacional. Ge et al. (2012) utilizaram o método das PDF's transportadas com duas funções delta de Dirac: uma para a velocidade da fase gasosa e outra para a fração de mistura. Esta é uma abordagem não convencional, pois normalmente as PDF's se baseiam na fração de mistura e na entalpia da fase gasosa, conforme Ge e Gutheil (2008a) e Ge e Gutheil (2008b).

Até aqui foram descritos apenas trabalhos envolvendo modelos RANS/FANS de turbulência, entretanto os modelos LES impõem filtros espaciais e modelam as flutuações das menores escalas e, portanto, também são necessários tratamentos estatísticos para descrever os valores instantâneos dos modelos de combustão e o modelo de turbulência.

Jones et al (2011) definiram PDF's dentro do contexto dos modelos de turbulência LES, uma vez que as flutuações das menores escalas têm de ser consideradas no modelo de combustão. Os autores assumiram que a PDF dos filtros é representada pelo conjunto de vários campos estocásticos, os quais são transportados pelo domínio, semelhante ao conceito das PDF's transportadas. Finalmente é importante salientar que os autores utilizaram diretamente um mecanismo reduzido de sete espécies e quatro reações para descrever a reação de oxidação do querosene.

Chrigui et al (2012) emprega o *Flamelet Generated Manifold* (FGM) para descrever chamas turbulentas de acetona parcialmente pré-misturadas. Em contraste com os modelos *flamelet* padrão e *flamesheet*, o FGM tem a capacidade de descrever chamas parcialmente pré-misturadas através da introdução de uma variável de progresso. O FGM define as mesmas equações do modelo *flamelet*, entretanto a adição da variável de progresso permite a geração de tabelas de referência baseadas na fração de mistura e na variável de progresso, eliminando

a taxa de dissipação escalar. O tratamento estatístico do modelo de combustão é realizado pela *joint* PDF da fração de mistura e da variável de progresso.

2.3. Modelagem de sprays

A modelagem matemática de sprays é uma tarefa extremamente complexa e exige que uma série de hipóteses seja empregada. As hipóteses definem o modelo e consequentemente a profundidade com a qual o modelo tentará reproduzir o escoamento experimental. Por exemplo, análises preliminares não necessitam de modelos complexos e que descrevam com grande precisão os fenômenos envolvidos na caracterização numérica do spray.

Faeth (1977) apresenta os modelos de correlação empírica, de balística, unidimensionais e de reatores misturados, os quais são capazes de diminuir significativamente a complexidade e consequentemente o tempo de simulação, obtendo precisão para determinados tipos de escoamentos de sprays.

As correlações empíricas permitem uma descrição simples para determinados tipos de escoamento de sprays, sem que se tenha grande conhecimento do escoamento. Essas correlações conseguem embasar tomadas de decisões em fases iniciais de projeto. Faeth (1977) explicita que essas correlações são específicas para cada tipo de experimento e tecnologia. Alguns exemplos são as correlações para injetores de motor diesel, que correlacionam a taxa de injeção à taxa de liberação de calor, e as correlações do processo de pré-vaporização de combustível em correntes de ar, que resultam em correlações da porcentagem de combustível vaporizada em função da pressão, temperatura e velocidade do ar, características do injetor e distância do injetor. A utilização dessas correlações deve ser feita com cautela, uma vez que são apropriadas para determinados tipos de escoamento e não se baseiam nas leis de conservação.

O modelo de balística de partículas apresenta uma evolução na modelagem, pois objetiva a descrição das características do spray através dos processos individuais das gotas. Este modelo desconsidera qualquer tipo de impacto das partículas sobre a fase gasosa, o que limita sua utilidade. Os modelos unidimensionais são um avanço em comparação aos modelos de balística, pois permitem que as interações entre as fases sejam consideradas, sem discutir a dispersão de partículas em um jato turbulento, ou seja, sem entrar na questão da modelagem da turbulência em escoamentos turbulentos de spray. Os modelos de reatores misturados consistem e descrever a chama ou a câmara de combustão como um sistema de reatores perfeitamente misturados ou reatores *plug-flow* (reatores de escoamento pistonado).

Os modelos de balística, unidimensionais e de reatores misturados, assim como os modelos empíricos, são uma primeira avaliação do spray e servem apenas para definições nas fases iniciais do projeto de um sistema de combustão.

Dois modelos serão discutidos com maior profundidade: o modelo de homogeneidade local (*Local Homogeneous Flow* - LHF, Faeth.1977 e Faeth,1983) e o modelo de escoamentos separados: (*Separated Flows* - SF, Faeth, 1983). O modelo de homogeneidade local assume que não há escorregamento entre as fases, ou seja, há equilíbrio dinâmico entre as fases, e assume-se que também é verificado equilíbrio termodinâmico. Já o SF considera que há escorregamento e taxas de transferência finitas, caracterizando com maior precisão os fenômenos dinâmicos e termodinâmicos nas partículas do spray.

2.3.1. O modelo de homogeneidade local (LHF)

A principal premissa do LHF é a de que as taxas de transporte entre as fases líquida e gasosa são muito mais rápida do que as taxas de desenvolvimento do campo de escoamento da fase gasosa (Faeth, 1983). Isso equivale a dizer que as taxas de transporte interfásicas são muito maiores do que as taxas de difusão da fase gasosa e que o processo é controlado pela difusão na fase gasosa. Esta hipótese só é válida se há equilíbrio dinâmico e termodinâmico entre as fases, isto é, as duas fases tem a mesma velocidade e temperatura. Assim, o spray é equivalente a um jato com as mesmas propriedades de momento e estequiométricas do escoamento do spray (Faeth, 1977).

O LHF apresenta resultados precisos e coerentes com os experimentais apenas para alguns tipos específicos de escoamentos. Faeth (1983) afirma que apenas escoamentos de sprays com gotas infinitesimais são bem representados, o que também é exposto por Faeth (1977). Ao diminuir o diâmetro das gotas, as características do escoamento se aproximam as características de um escoamento de jato, até que no caso limite de gota infinitesimal, a gota se comporta exatamente como um jato monofásico. Chamas monofásicas e sprays tem aparência similar, o que leva à suposição de que os mecanismos reativos são semelhantes até certo ponto. A comparação entre a combustão de jatos reativos e de sprays utilizando LHF mostra que, para valores em que as maiores densidades de número de gotas estão entre 10 e 20 μm, são obtidos bons resultados (Faeth, 1983).

Além de escoamentos com gotas infinitesimais, Faeth (1977) afirma que o processo evaporativo de sprays líquidos sob condições supercríticas da fase gasosa é muito bem representado, pois as propriedades dos líquidos e gases nessas condições são similares.

Entretanto, a utilização do LHF para a descrição de escoamentos de sprays reativos é limitada, pois apenas sprays bem atomizados são bem representados. Estudos com gotas maiores mostram a deficiência do modelo nessa situação (Faeth, 1977 e Faeth, 1983), uma vez que a inércia da gota aumenta e as hipóteses de equilíbrio dinâmico e termodinâmico não podem ser mais verificadas. Mao et al (1980) (in Faeth, 1983), Shearer et al. (1979) (in: Faeth, 1983), Khalil e Whitelaw (1977) (in: Faeth, 1983) realizaram simulações com gotas maiores de 20 μm. Esses autores observaram que a aplicação deste modelo superestima as taxas de transporte entre as fases, consequência direta da hipótese de taxas infinitamente rápidas, e subestima o comprimento das chamas.

O modelo LHF apresenta uma grande vantagem em comparação ao modelo SF, que é o tratamento das condições de contorno da fase dispersa. Enquanto o SF é extremamente dependente de condições de contorno provenientes das características do injetor, o LHF especifica apenas a fração mássica.

Este modelo não é adequado para a maioria dos escoamentos de sprays, entretanto suas características e deficiências são as bases para os avanços obtidos pelo SF, o qual procura aumentar a capacidade descritiva do modelo.

2.3.2. Aproximação por escoamentos separados

O modelo de escoamentos separados (*Separated Flows* - SF) é definido para dois tipos diferentes de sprays: sprays diluídos e sprays densos (Faeth, 1987). Entretanto apenas as formulações de sprays diluídos serão descritas, dado que se emprega a hipótese de que as distâncias entre partículas são muito maiores que seu diâmetro, o que implica em desconsiderar a interação entre partículas e a colisão entre as mesmas.

Faeth (1987) caracteriza o método SF com o potencial de descrever uma grande variedade de escoamentos de sprays diluídos, pois se afasta da principal hipótese do LHF, a de equilíbrio dinâmico e termodinâmico, e considera taxas de transporte finitas entre as fases. Entretanto, o avanço computacional ainda não permite que sejam modeladas estruturas de ordem menor do que a da fase dispersa, o que normalmente leva a desconsiderar os fluxos internos da gota e a assumir valores médios para a gota (Sirignano, 2010 e Faeth, 1987). Essa hipótese resulta na utilização de modelos independentes para descrever as taxas de transporte entre as fases, normalmente usam-se modelos empíricos. Sirignano (2010) apresenta vários modelos em que são considerados escoamentos internos da gota, entretanto o atual desenvolvimento tecnológico computacional ainda faz com que esse tipo de simulação tenha tempo de

processamento extremamente elevado. Esses modelos são discutidos com maior aprofundamento na seção 3.3.3.

A modelagem da fase dispersante comumente segue a abordagem euleriana, enquanto a modelagem da fase dispersa pode empregar tanto a abordagem lagrangeana quanto a euleriana (Faeth, 1987 e Chrigui, 2005).

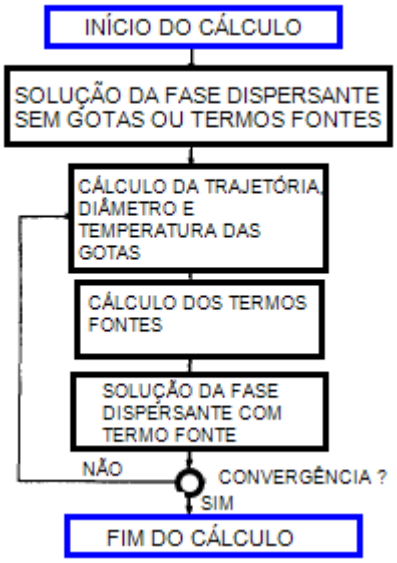
Duas modelagens da abordagem euleriana serão discutidas: o *Continuous Droplet Model* (CDM) e o *Continuous Formulation Model* (CFM) (Faeth, 1983). O CDM descreve as propriedades da fase dispersa através da solução da equação de transporte de uma função de distribuição estatística. Esta função é definida em um espaço multidimensional de diâmetro, posição, tempo, concentração, velocidade e temperatura das gotas, isto é ela é descrita em função dessas propriedades do spray. Portanto, ao determinar o valor da função estatística, definem-se as características do spray nesse ponto. A interação entre as fases é feita através de termos fontes, assim como é observado para as abordagens lagrangeanas. A aplicação do CDM é aconselhável principalmente para casos em que apenas alguns fenômenos precisam ser levados em consideração, como escoamento monodisperso de partículas não evaporativas. Casos em que vários fenômenos são considerados implicam em funções de distribuição estatísticas baseadas em espaços multidimensionais com um excessivo número de variáveis, o que torna o custo computacional elevado.

O modelo CFM define equações de transporte para as duas fases, o que caracteriza que ambas as fases são meios contínuos interpenetrantes (Faeth, 1983). Desta forma, ambas as fases são descritas com equações semelhantes, o que facilita a implementação numérica em códigos computacionais. Entretanto, assim como o CDM, a formulação é inadequada para escoamentos com grandes variações de diâmetro de partículas e efeitos de aquecimento da fase dispersa. Outro ponto negativo desse modelo é a descrição da turbulência, uma vez que há dificuldade em definir as tensões turbulentas e o transporte dessas tensões ao considerar uma fase dispersa como contínua.

Em suma, os modelos CDM e CFM podem ser utilizados em uma gama reduzida de aplicações, sendo que sprays reativos não são uma delas, pois há grande dificuldade na representação da evaporação, fenômeno importante em processos de combustão.

A abordagem lagrangeana deu origem ao DDM (*Discrete Droplet Model*), também referido como PSIC (*Particle-Source-In-Cell model*) (Faeth, 1977). Um exemplo de fluxograma de cálculo do modelo DDM é apresentado na Figura 2. Esta imagem permite exemplificar como a interação entre as fases dispersa e dispersante ocorre em um algoritmo numérico.

Figura 2 – Fluxograma de Cálculo do DDM (Adaptado de Faeth,1977)



O DDM divide o spray em classes de amostras representativas de gotas cujas propriedades são calculadas pelo rastreamento no meio dispersante, através da abordagem lagrangeana, similarmente ao cálculo realizado para a descrição de uma única gota. Conforme destacado na Figura 2, as taxas de troca entre as fases são consideradas na fase dispersante com termos fontes. A fase gasosa é caracterizada de forma semelhante ao LHF, porém é exatamente a diferença do método no cálculo dos termos fontes que diferencia os modelos e permite que taxas finitas de transporte sejam modeladas.

A representação das taxas finitas de transporte permite uma descrição mais apropriada dos fenômenos envolvidos em um processo de combustão de um spray. Além disso, um baixo número de classes de partículas caracteriza satisfatoriamente o escoamento, resultando em um baixo custo computacional em comparação com os demais métodos descritos.

Dentro dos métodos de SF que utilizam a abordagem lagrangeana, podem ser definidas duas formulações: a formulação *Deterministic Separated Flows* (DSF ou DDM/DSF) e a formulação *Stochastic Separated Flows* (SSF ou DDM/SSF). Conforme descrito anteriormente, ambas possibilitam taxas finitas de transporte entre as fases, porém elas se diferenciam na abordagem em relação à turbulência e o impacto da presença das gotas no regime turbulento. O modelo DSF desconsidera o impacto da fase dispersa sobre o regime turbulento, enquanto o modelo SSF tenta modelar o regime turbulento do escoamento alterado pela presença da fase dispersa. O SSF foi desenvolvido exatamente para suplantar as deficiências e limitações do DSF e do LHF.

O DSF é caracterizado por desconsiderar a alteração do regime turbulento devido à presença da fase dispersa. Ao utilizar o DSF, apenas são consideradas as propriedades do escoamento médio (ou filtrado, caso seja utilizado um modelo filtrado como o LES) para o cálculo da trajetória da fase dispersa ou, de outro ponto de vista, as partículas interagem apenas com o escoamento médio. Essa hipótese implica em desconsiderar as flutuações, que caracterizam o caráter aleatório do regime turbulento. Sabe-se que a influência das flutuações causam alterações na trajetória que uma partícula segue e, ao considerar as flutuações no cálculo da trajetória, partículas de mesmo diâmetro com velocidades iniciais semelhantes partindo do mesmo ponto tem trajetórias diferentes devido à interação com o regime turbulento. Entretanto, o modelo DSF não modela as flutuações através de um modelo estocástico e, portanto, as partículas experimentam trajetórias determinísticas, as quais serão sempre as mesmas. Desta característica, introduziu-se o termo *deterministic* para denominar esse tipo específico de escoamento separado. Outra consequência do modelo DSF aparece na fase dispersante. Os termos fontes de quantidade de movimento e das quantidades transportadas do modelo de turbulência possuem termos baseados na velocidade instantânea da partícula e, portanto, a utilização de um modelo de dispersão turbulenta influencia diretamente no cálculo desses termos.

O SSF objetiva à modelagem da interação entre turbulência e a fase dispersa, a qual, de acordo com Faeth (1987), tem três pontos cruciais: a dispersão da fase turbulenta, a modulação turbulenta (definida como a alteração das propriedades turbulentas da fase dispersante devido ao transporte proveniente da fase dispersa) e a modificação das propriedades das taxas de transporte da interface devido às flutuações da fase dispersante. A dispersão turbulenta define o modelo estocástico para descrever a flutuação da velocidade da fase gasosa, a qual será utilizada nos modelos da fase líquida. A modulação da turbulência procura descrever matematicamente o efeito da presença da fase líquida no regime turbulento da fase gasosa.

A dispersão turbulenta descreve o processo de influência da turbulência sobre a trajetória das partículas. Sacomano (2011) utilizou o modelo *random-walk*, apresentado em Faeth (1983) e Faeth (1987), com algumas modificações para introduzir anisotropia ao modelo que se baseava nas características do modelo de turbulência k-ε padrão caracterizado por sua isotropia. O modelo *random-walk* tem sua fundamentação na hipótese de que uma única partícula interage com vários turbilhões, mas sucessivamente e não simultaneamente e que cada turbilhão tem propriedades constantes, mas características de cada turbilhão. Esta hipótese não é totalmente representativa do fenômeno observado, pois uma partícula sofre a

influência de vários turbilhões de diferentes escalas de tamanho simultaneamente e não sucessivamente.

Outro método de dispersão turbulenta é o modelo de sequência de Markov, utilizado por Chrigui (2005) e Chrigui et al (2009). A tentativa de determinar a velocidade instantânea por esse modelo se baseia em dois fatores de correlação: o fator de correção lagrangeano e o fator de correção euleriano. O fator lagrangeano computa a flutuação dos elementos fluidos ao longo da linha de corrente, enquanto o fator euleriano descreve a flutuação local do elemento fluido.

Jones et al (2010) isolaram o efeito da turbulência sobre a trajetória avaliando e simulando partículas isotérmicas sem troca de massa ou calor. Nesse modelo, a dispersão turbulenta seguiu o modelo estocástico de Markov, desenvolvido para modelos de turbulência LES. Os autores concluíram que bons resultados podem ser atingidos, porém há uma relativa sensibilidade à constante do modelo estocástico de Markov, o que dificulta a aplicação direta do modelo sem ajustes nesta constante. O mesmo modelo foi utilizado por Jones et al (2011), para simulada uma chama de spray com movimentos helicoidais e, portanto, o efeito da turbulência estava acoplado ao processo de troca de massa e calor entre as fases.

A modulação da turbulência é representada por um termo fonte nas equações do modelo de turbulência da fase dispersante. Para modelos RANS/FANS, os termos fontes dos momentos de segunda ordem, assim como os de primeira ordem, são diretamente obtidos (Faeth, 1983), entretanto o termo fonte da equação da taxa de dissipação da energia cinética tem de ser modelado e introduz uma nova constante $C_{3\varepsilon}$. A determinação dessa constante é empírica (Faeth, 1983) e o valor varia de acordo com cada caso. Chrigui (2005) testou modelos diferentes de modulação da turbulência durante o desenvolvimento de seu estudo. Primeiramente utilizou o modelo padrão apresentado em Faeth (1983), em seguida, empregou o modelo proposto por Crowe (2000) baseado no balanço da energia cinética do escoamento e o modelo termodinamicamente consistente, no qual um termo é adicionado com base na segunda lei da termodinâmica. Lain e Sommerfeld (2003) basearam-se nas modulações padrões e de Crowe (2000) e formularam uma modulação denominada consistente, a qual os autores caracterizam como uma tradução da formulação euleriana de Crowe (2000) para uma formulação lagrangeana. Mando et al (2009) propuseram um novo modelo baseado em estudos de Simulação Numérica Direta (*Direct Numerical Simulation* - DNS). Esses estudos indicaram que a modulação turbulenta pode ser correlacionada à dissipação de energia turbulenta pela interação entre os turbilhões e as partículas e também indicaram que há a

redistribuição da energia cinética turbulenta devido à maior uniformidade do perfil de velocidade médio das partículas em relação à fase dispersante.

Em modelos filtrados, a modulação da turbulência é obtida com a introdução do termo fonte na equação de transporte da quantidade de movimento filtrada (Jones et al, 2010). Entretanto, para sprays diluídos, é comum considerar esse termo fonte nulo e os autores não apresentaram formalmente um modelo. Apte et al (2003) simularam partículas carregadas pela fase dispersa sem considerar o efeito direto das flutuações das escalas filtradas, todavia os autores utilizaram uma modulação turbulenta em função da taxa de variação local da velocidade da partícula.

A modificação das propriedades das taxas de transporte da interface devido às flutuações da fase dispersante geralmente é negligenciada, caso a escala integral seja maior do que o diâmetro das gotas (Birouk e Gökalp, 2006). Entretanto, os autores defendem que o fenômeno da turbulência é caracterizado pela cascata de Kolmogorov (Pope, 2000), que define várias estruturas turbulentas, desde as menores até as maiores escalas. Portanto, as modificações taxas de transporte pelo efeito da turbulência não podem ser negligenciadas e devem ser consideradas, pois as menores escalas são menores do que o diâmetro das gotas. Apesar da posição dos autores, é comum utilizar a hipótese de que as taxas de transporte na interface independem das flutuações, conforme pode ser verificado em Chrigui (2005), Sacomano (2011), Rochaya (2007), Chrigui et al (2009), Düwel et al (2007), Chen e Pereira (1996), Ge e Gutheil (2008a) Ge e Gutheil (2008b). Apte et al (2009) consideraram o impacto da turbulência através de β-PDF's para ponderar o valor de fração mássica a ser introduzido na fase gasosa.

Uma rápida análise dos modelos permite observar que o modelo SSF é muito mais completo em sua capacidade de descrição do fenômeno físico, em comparação ao modelo DSF. Entretanto sua aplicação em um código é mais complexa e seu custo computacional é maior, sendo que introduz funções estatísticas, que podem ser fontes de possíveis problemas de convergência e de erro de predição do spray.

2.4. Chamas turbulentas de spray de etanol

Os trabalhos apresentados nessa seção objetivam apresentar os estudos recentes na área de chamas de spray de etanol. O trabalho de Düwel et al (2007) e Sacomano (2011) apresentam a comparação entre dados experimentais e resultados numéricos, o que permite validar os modelos utilizados. O último também permite uma primeira avaliação do estágio de evolução

dos trabalhos realizados no Brasil. O trabalho de Li e Zhou (2012) mostra um trabalho com modelos mais complexos, discutindo as simulações numéricas de chamas de spray de etanol empregando modelos de filtragem espacial.

Os demais trabalhos constituem exemplos de trabalhos experimentais de sprays de etanol, os quais mostram o estágio das configurações experimentais das chamas e os métodos experimentais empregados em chamas de spray de etanol.

2.4.1. Trabalho desenvolvido por Düwel et al (2007)

Assim como Rochaya (2007), Düwel et al (2007) estudaram uma chama turbulenta de spray de etanol e tentaram reproduzi-la numericamente através dos modelos disponíveis.

A chama estudada tem características favoráveis ao estudo, pois não utiliza corpos rombudos ou chamas pilotos para estabilização, o que facilita o tratamento numérico. Entretanto houve necessidade de aquecimento do etanol até 45ºC para atingir a estabilização da chama.

O autor utilizou um injetor localizado no entro da chama e que produz um spray de cone oco (*hollow-cone spray*). Há um fluxo de ar uniforme em volta do injetor. A homogeneização do fluxo e da turbulência é obtida por um prato com vários furos, em forma de uma colmeia.

O emprego simultâneo de medições de LIF e *Mie-scattering* possibilitou a medição do diâmetro médio de Sauter (*Sauter Mean Diameter, SMD*), o qual define que o diâmetro médio das gotas pode ser dado pela relação entre a superfície das gotas obtida pelo método *Mie-scattering* e o volume das gotas obtido pelo método LIF.

Os métodos *Mie-Scattering* e LIF foram utilizados para o escoamento reativo. Também foram feitos ensaios em escoamentos não reativos com a utilização de anemômetros baseados no efeito Doppler (*PDA - Phase Doppler Anemometry*), os quais permitiram o levantamento das velocidades das gotas e novos dados do diâmetro médio das gotas (SMD). Ao comparar os resultados, observou-se que poucas diferenças foram obtidas entre os resultados no diâmetro médio das gotas até uma altura de 10 mm acima do injetor.

As temperaturas das gotas e da fase gasosa também foram medidas através do método de Termometria LIF de duas cores (*2-color LIF thermometry*) e do método de Termometria NO-LIF multilinhas (*multi-line NO-LIF thermometry*).

As simulações numéricas foram desenvolvidas com o emprego do modelo de turbulência k-ε padrão, considerando a interação entre as fases líquida e gasosa. A modelagem da fase líquida segue a abordagem lagrangeana, assim como observado em Chrigui (2005) e Sacomano (2011), e utiliza um modelo DDM/SSF (*Discrete Droplet Model e Stochastic Separated*

Flow). Durante a modelagem da fase líquida, foi assumido que não há colisões e coalescência de gotas, não há interação entre as gotas (pois o spray é diluído) e não há *break-up* das gotas. Além disso, foi considerado que a gota tinha condutividade infinita, o que leva a gota a ter temperatura uniforme em todos os pontos e a taxa de evaporação é descrita pelo modelo de filme de Abramzon e Sirignano (1989).

A formulação da fase gasosa segue a formulação apresentada por Versteeg e Malalasekera (2007), com a adição dos termos fontes para levar em conta o acoplamento entre as fases. O acoplamento entre as equações de quantidade de movimento e de conservação da massa foram modeladas pelo algoritmo SIMPLE.

O modelo de combustão *flamelet*, apresentado por Peters (2000), foi utilizado e foi desenvolvido considerando um mecanismo de cinética química de 38 espécies considerando 337 reações químicas.

Assim como neste trabalho, os resultados obtidos por PDA foram utilizados como condições de contorno para a fase líquida. A condição de contorno da temperatura da fase gasosa foi estimada pelos resultados do método LIF, já as condições de contorno de velocidade foram estimadas pela vazão total do *coflow*.

A partir dos resultados experimentais e numéricos, os autores concluíram que houve uma superestimação sistemática da velocidade das gotas em até 30% nos resultados numéricos, o que leva a uma maior taxa de evaporação, que, por sua vez, explica os menores diâmetros das gotas nas simulações (gotas até 10% menores). As diferenças entre os resultados numérico e experimental foram atribuídas aos seguintes fatores: desconhecimento das condições iniciais de escoamento da fase gasosa, incertezas na medição da fase líquida e aproximações imprecisas da velocidade radial das gotas. A comparação entre os resultados para o campo de temperaturas novamente apresentou discrepâncias, especialmente, pois o modelo numérico não consegue reproduzir parte da estrutura da chama.

Uma conclusão geral deste trabalho é que as simulações numéricas são muito sensíveis às condições de contorno da fase líquida, bem como das condições de gasosa. Além desses pontos, atribui-se as diferenças entre resultados experimentais e numéricos a falta de modelos de quebra de filme, fenômeno observado experimentalmente próximo ao injetor.

2.4.2. Trabalho desenvolvido por Sacomano (2011)

Seguindo as linhas de modelagem numérica traçadas pelo trabalho de Rochaya (2007) e pelo trabalho de Düwel et al (2007), Sacomano (2011) adaptou o código desenvolvido por

Fukumasu (2010) para descrever numericamente a chama descrita experimentalmente por Masri e Gounder (2009). Masri e Gounder (2009) publicaram um artigo descrevendo chamas de acetona e de etanol, através de resultados obtidos pelos métodos *Mie-scattering*, *Laser-Induced Fluorescence of the OH radical* (LIF-OH) e *Laser Doppler Velocimetry-Phase Doppler Anemometry* (LDV-PDA). O método LIF-OH possibilitou delinear a região de alta temperatura do escoamento, enquanto as imagens de Mie-scattering permitem que seja caracterizada a região das gotas. O método LDV-PDA permitiu que fossem medidas as distribuições radiais da velocidade do escoamento, o diâmetro médio das gotas, a intensidade da turbulência e o número de densidade das gotas. No caso, foram definidos quatro planos horizontais de medição.

Em seu trabalho, Masri e Gounder (2009) afirmam que o aumento da velocidade das gotas não alterou significativamente o campo de velocidades do escoamento de velocidade e a distribuição de diâmetro das gotas, porém houve alteração no campo de temperatura, o que implica em um caráter competitivo entre os regimes de chama pré-misturadas e difusivas.

Nas simulações desenvolvidas por Sacomano (2011), o autor seguiu a abordagem Euleriana-Lagrangeana, na qual a fase gasosa é descrita pela formulação baseado nos conceitos de Euler, enquanto a fase dispersa, ou fase líquida, fundamentou-se nos princípios definidos por Lagrange. A modelagem do spray fundamentou-se na formulação DDM/SSF (*Discrete Droplet Model – Stochastic Separated Flow*), mostrando avanço em comparação ao trabalho desenvolvido por Rochaya (2007), uma vez que o último utilizou o DDM/DSF (*Discrete Droplet Model – Deterministic Separated Flow*). A grande diferença dos modelos é a modelagem da influência da turbulência na trajetória de cada uma das partículas, conforme apresentado na seção 2.3.2. A modelagem da turbulência foi feita pelo modelo k-ε padrão, um modelo mais simples, porém um modelo que possibilita um código com processamento mais rápido. A modelagem da combustão foi baseada no modelo para chamas de difusão *flamesheet* (modelo folha de chama), no qual são utilizadas as hipóteses de cinética química da reação global infinitamente rápida e irreversível. O modelo *flamesheet* não considera um modelo de mecanismo de cinética química e tem fortes hipóteses simplificadoras, as quais levam a considerar que oxidante e combustível reagem imediatamente ao se misturarem. O tratamento estatístico da turbulência foi feito utilizando uma *joint* β-PDF para considerar o efeito do resfriamento evaporativo das gotas e seu impacto na fase gasosa. Mais especificamente utilizou-se uma função delta de Dirac para descrever a PDF relacionada à entalpia da fase gasosa.

Um ponto interessante a ressaltar é a escolha do modelo de combustão. Masri e Gounder (2009) afirmam que há uma competição entre características de chamas de pré-mistura e difusivas, o que caracteriza uma chama parcialmente pré-misturada. Entretanto, por simplicidade e por ser um modelo de processamento muito mais rápido, Sacomano (2011) optou por utilizar o modelo *flamesheet*.

A validação do modelo de combustão para a fase gasosa foi feita utilizando a Chama D (Fiorina et al, 2009 e Flame D, 2013), chama experimental monofásica de mistura metano-ar. As diferenças entre os resultados experimentais e os resultados numéricos obtidos por Sacomano (2011) foram atribuídos à modelagem da turbulência utilizada, descartando a introdução de difusividade numérica pelos métodos numéricos utilizados. Porém, alterando uma das constantes do modelo k-ε padrão, os resultados foram melhorados mostrando a deficiência desse modelo. Entretanto, mesmo com a maior aderência entre os resultados numéricos e os resultados experimentais, foi observado um descompasso entre os resultados de fração de mistura e quantidade de movimento linear. O autor afirma que alterações no número de Prandtl turbulento da fração de mistura e alteração do modelo de combustão teriam impactos significativos nos resultados.

A simulação de chamas turbulentas de spray de etanol, principal objetivo do trabalho, apresentou discrepâncias em relação ao trabalho experimental de Masri e Gounder (2009). A diferença entre a velocidade média axial das gotas é atribuída à modelagem da turbulência que fez uma superestimação da difusão da fase gasosa e o modelo de combustão empregado, o qual descreve chamas difusivas. O autor também atribuiu as diferenças observadas entre resultados experimentais e numéricos ao modelo de combustão *flamesheet*, o qual não foi desenvolvido para caracterizar chamas parcialmente pré-misturadas, que foram observadas no experimento de Masri e Gounder (2009).

2.4.3. Trabalho desenvolvido por Li et Zhou (2012)

Li e Zhou (2012) iniciam sua discussão afirmando que os resultados recentes mostraram que modelos LES são capazes de representar com maior precisão do que os modelos RANS a estrutura de escoamentos e a estrutura de chamas de sprays turbulentos. Partindo desse pressuposto, os autores discutiram o efeito das condições iniciais do spray, ou seja, a distribuição inicial do diâmetro das partículas, ângulo de cone do spray e espessura do ângulo de cone do spray, sobre a estrutura da chama.

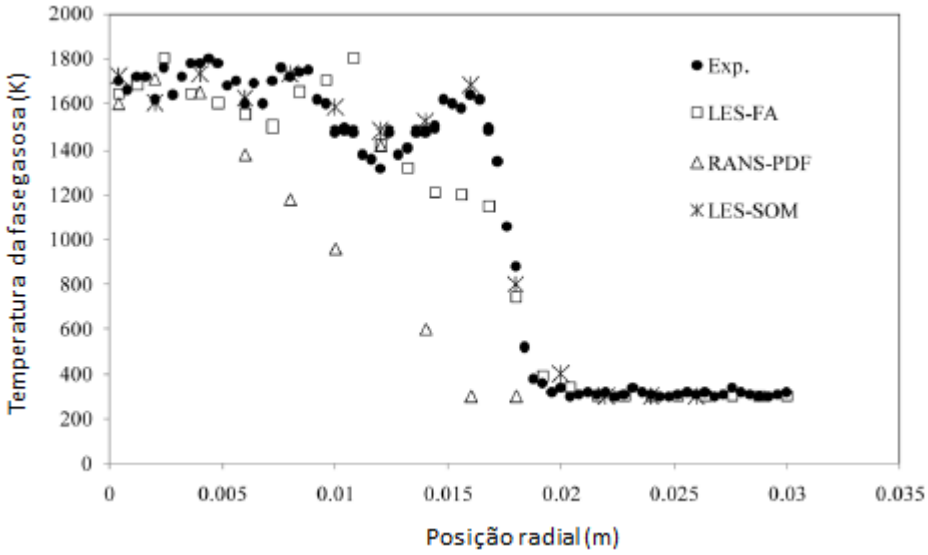
Visando descrever os efeitos das condições de contorno sobre os resultados da simulação, os autores modelaram as menores escalas de acordo com o modelo *Sub-Grid Scale Stress* (Wilcox, 1993), o qual tem formulação matemática semelhante à do modelo k-ε, porém dentro do contexto de modelos filtrados. Em relação à modelagem da combustão, os autores usaram duas abordagens diferentes, uma na qual a combustão nas escalas menores do que a malha era ignorada e outra em que a combustão era modelada para todas as escalas do escoamento. O primeiro assume que a taxa da reação ocorre exatamente conforme descrito pela expressão de Arrhenius e apenas nas escalas com dimensões maiores do que a malha, já o segundo modelo proposto, denominado *Second-Order Moment* (SOM), define que a taxa de reação pode ser separada em duas parcelas, uma devido à taxa da reação que ocorre nas grandes escalas e outra devido à taxa de reação que ocorre nas escalas filtradas pela malha. A parcela correspondente às grandes escalas é formulada de acordo com o modelo de Arrhenius, enquanto a parcela relativa às escalas filtradas é uma correção da taxa de reação das grandes escalas, considerando os efeitos das flutuações da temperatura e das frações das espécies químicas sobre a taxa de reação. Os dois modelos de combustão baseiam-se na reação global do etanol e, portanto, não consideram cinética química detalhada, o que limita a aplicabilidade dos modelos em relação aos modelos *flamelet*.

A grande deficiência desse trabalho é a falta de dados experimentais, enfraquecendo a validação dos modelos. Apenas resultados experimentais da distribuição temperaturas das fases líquida e gasosa estavam disponíveis. Para a fase gasosa, dados em apenas um plano estavam disponíveis, enquanto para a fase líquida estavam disponíveis dados em dois planos. Os autores compararam resultados estatísticos da simulação com resultados da mesma configuração experimental de Düwel et al (2007). Os resultados para a temperatura da fase gasosa (Figura 3) mostra que o modelo SOM (representado no gráfico pela sigla LES-SOM) consegue representar os dados experimentais com maior precisão do que o modelo LES simplificado (LES-FA), no qual a combustão nas pequenas escalas não é considerada, e o modelo RANS, utilizando o método *flamelet* de combustão e o modelo de turbulência k-ε padrão. O modelo RANS-PDF não consegue representar a tendência do experimento suavizando a curva e não conseguindo representar os gradientes radiais de temperatura. Já o modelo LES-FA consegue representar melhor os gradientes radiais de temperatura, entretanto, ao comparar com os resultados obtidos pelo modelo LES-SOM, observa-se que o segundo representa todos os gradientes observados experimentalmente com maior precisão. Essa comparação entre os métodos numéricos permite concluir que os efeitos das escalas filtradas

têm um papel importante na representação da turbulência e de seu efeito na combustão, o que já havia sido defendido por Jones et al (2011).

Apesar do trabalho carecer de dados experimentais para maiores comparações, os resultados da modelagem numérica representam bem o escoamento, conforme observado na Figura 3. Entretanto, o modelo de combustão poderia ser mais sofisticado, uma vez que já foram feitos trabalhos com o FGM em simulações LES (Chrigui et al, 2012).

Figura 3 – Distribuição da Temperatura em função da posição Radial (Li et Zhou, 2012)



2.4.4. Outros trabalhos

Gounder et al (2006) conduziram experimentos para descrever o efeito da "carga de gotas" em chamas turbulentas de etanol. O principal objetivo era avaliar como ocorre o processo reativo das gotas, se elas se comportam como nuvens de gotas ou apenas gotas isoladas. A hipótese de nuvem de gotas implica que a frente de chama atinge simultaneamente uma nuvem de chama, já a hipótese da combustão de uma gota isolada implica que uma gota por vez é envolvida pela zona de reação. Essas hipóteses podem ser comparadas com o conceito de combustão por grupos, no qual as chamas de sprays podem ser classificadas em quatro grupos diferentes: combustão de uma única gota, combustão externa em grupo, na qual a chama de spray é caracterizada analogamente a uma chama difusiva, combustão interna em grupo, na qual se observa combustão dentro da nuvem de gotas e *external sheath combustion*, na qual o as gotas estão mais próximas e a zona de reação mais longe do que a combustão externa em grupo, assim tendo certo grau de pré-mistura.

Assim como Düwel et al (2007) imagens simultâneas de LIF-OH e Mie-Scattering permitem que sejam observadas na mesma figura a zona de reação e a distribuição de gotas, além de permitir análise da interação entre a fase líquida, a combustão e a turbulência.

Gounder et al (2006) afirmaram que a estabilidade da chama, no seu experimento, é controlada principalmente pela vazão do jato de ar e que o limite de *blow-off* (extinção da chama) aumenta com o aumento da vazão de combustível. Assim como observado por Masri e Gounder (2009), há certo grau de pré-mistura devido às características do nebulizador, o que pode caracterizar essa chama como parcialmente pré-misturada. Todas as chamas tem um cone parcialmente pré-misturados, os quais são envoltos por chamas de difusão. Para planos axiais próximos do injetor, a combustão interna por grupo foi observada, enquanto, em planos mais afastados, foi verificada a combustão externa do grupo. Desta forma, conclui-se que, em uma mesma chama, podem ser observados diferentes tipos de combustão por grupos.

Villanueva (2013) apresentou um trabalho experimental extremamente completo, no qual caracterizou a combustão de um spray de etanol através de técnicas de diagnóstico laser. O escoamento é uma chama aberta com a presença de um obstáculo (*bluff-body*) para produzir uma zona de recirculação que intensifica os processos de mistura e evaporação. O autor utilizou quatro técnicas de diagnóstico laser: o PIV (*Particle Image Velocimetry*, ou Velocimetria por imagem de partículas), o *Shadowgraphy*, o PLIF-OH (*Planar Laser-Induced Fluorescence of the hydroxyl radical* ou fluorescência induzida por plano laser do radical hidroxila) e o Mie-scattering. O PIV foi utilizado para determinar o campo de velocidades da fase gasosa a jusante do corpo rombudo e descrever o campo de velocidades das gotas do spray. O Shadowgraphy determinou o diâmetro e velocidade das partículas. Enquanto o PLIF-OH tinha foco na descrição da combustão, em oposição ao PIV e o *Shadowgraphy* que objetivam descrever o escoamento das fases gasosa e líquida.

O trabalho caracterizou a influência do regime turbulento das fases líquidas e gasosas sobre a combustão. O incremento da velocidade do ar alterou a distribuição de diâmetro de gotas e a velocidade das gotas, o que teve impactos nas zonas de reação e sua localização dentro do domínio de estudo. A chama caracterizou-se por três regiões reativas: uma zona de reação intermitente, uma zona de quimiluminescência azul e uma zona de fuligem; sendo que apenas a última sofre interferência com a variação da vazão de combustível. A técnica mie-scattering mostrou que, para baixas vazões de etanol, o ar não altera o formato do spray, o que é consequência do grande diâmetro das gotas. O trabalho de Villanueva (2013) pode servir para o desenvolvimento de trabalhos numéricos de sprays turbulentos de etanol, pois fornece dados de velocidade e diâmetro das gotas, essenciais para estudos numéricos com o modelo SF.

3. Modelagem de chamas turbulentas de sprays

Na revisão bibliográfica, foram apresentadas as possíveis abordagens para descrição de escoamentos de sprays. A fase gasosa é sempre representada pelo método euleriano de descrição do escoamento. A fase líquida pode ser apresentada tanto por métodos eulerianos quanto por métodos lagrangeanos

A principal diferença entre as abordagens reside no método de análise do problema. O método proposto por Euler procura caracterizar as variações do campo de escoamento, enquanto o lagrangeano objetiva descrever os fenômenos físicos que acontecem com uma determinada partícula do escoamento.

Utilizando o método euleriano, a descrição da fase gasosa é feita através de equações diferenciais parciais conservativas, definidas para um sistema de coordenada fixo. A fase líquida é descrita por equações diferenciais ordinárias, caracterizando a aplicação do método lagrangeano.

Esta seção define os modelos aplicados para a descrição da chama. Todos os modelos são baseados naqueles implantados no software comercial ANSYS FLUENT®.

No primeiro subitem deste capítulo, é apresentado o modelo de turbulência *Reynolds Stress Model*, considerado mais adequado o escoamento estudado. Em um segundo subitem, é apresentada a modelagem matemática da combustão. O modelo *flamelet* de combustão é apresentado, discutindo as hipóteses envolvidas e a formulação matemática de escoamentos reativos turbulentos. Finalmente, é apresentada a modelagem matemática da fase líquida. Este subitem define o método de acoplamento entre as fases. Há a definição dos termos fonte introduzidos nas equações de transporte definidas para escoamentos monofásicos para descrever a influência das partículas sobre a fase gasosa.

3.1. Modelagem da turbulência

Os modelos de turbulência procuram definir equações de transporte, cujo objetivo final é modelar para o problema de fechamento da turbulência, apresentado no APÊNDICE B. Neste estudo, é utilizado o *Reynolds Stress Model* (RSM). As vantagens e desvantagens do modelo estão elencadas a seguir, de acordo com Versteeg e Malalasekera (2007):

- Vantagens:
    - Potencialmente o mais genérico dos modelos RANS

- Cálculo preciso das propriedades médias do escoamento e do tensor das tensões de Reynolds para escoamentos simples e complexos como jatos confinados, canais assimétricos e dutos não circulares e escoamentos com curvaturas;

- Desvantagens:
  - Maior custo computacional (sete Equações Diferenciais Parciais a mais são resolvidas)
  - Não é validado para tantos problemas quanto os modelos de *mixing lenght* e *k-ε padrão*;
  - Apresenta as mesmas dificuldades do modelo k-ε padrão em alguns escoamentos, consequência direta da utilização da mesma modelagem para a equação da taxa de dissipação turbulenta (ε), como escoamentos com recirculação não confinada e jatos axissimétricos.

Versteeg e Malalasekera (2007) destaca que o RSM tem o potencial, dentre os modelos RANS, para descrever todas as propriedades do escoamento e as tensões de Reynolds sem ajustes para cada estudo, devido à anisotropia característica do modelo. Essa característica foi o fator preponderante na escolha do modelo para o desenvolvimento deste trabalho. Wilcox (1993) salienta que o RSM potencialmente descreve melhor escoamentos com descolamento da camada limite, escoamentos com curvaturas significativas das linhas de corrente e escoamento com súbitas variações na taxa de deformação média.

Outro fator de grande peso foi o baixo custo computacional do RSM relativamente aos modelos filtrados. Versteeg e Malalasekera (2007) explicita que é necessário, no melhor caso, o dobro dos recursos computacionais para uma simulação LES.

Tanto o RSM quanto os modelos de duas equações fundamentam-se em dois fatores: a decomposição das variáveis instantâneas em duas parcelas e a aplicação da média temporal sobre as equações de transporte. No tratamento matemático da turbulência, duas decomposições são destacadas: a decomposição de Reynolds e a decomposição de Favre, as quais são apresentadas no APÊNDICE B.

O modelo k-ε padrão baseia-se na modelagem do tensor de Reynolds de acordo com a hipótese de Boussinesq, também apresentado no APÊNDICE B. Portanto, é necessária a modelagem das equações de transporte da energia cinética turbulenta (k) e da taxa de dissipação de energia cinética turbulenta (ε).

O modelo RSM modela equações de transporte para cada uma das tensões de Reynolds e uma para a taxa de dissipação de energia cinética turbulenta. Entretanto, a viscosidade turbulenta

introduzida pela hipótese de Boussinesq é utilizada em outras equações de transporte, conforme demonstrado no APÊNDICE B. Por isso, a definição dessa propriedade do escoamento faz-se necessária mesmo que o modelo k-ε padrão não seja utilizado.

A equação de transporte das tensões de Reynolds original é apresentada na equação (1), conforme apresentada por Wilcox (1993), Pope (2000) e Versteeg e Malalasekera (2007).

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\bar{\rho}\widetilde{u''_\iota u''_\jmath}\right) + \frac{\partial}{\partial x_k}\left(\bar{\rho}\widetilde{u_k}\widetilde{u''_\iota u''_\jmath}\right) = \frac{\partial}{\partial x_k}\left(\mu\frac{\partial\widetilde{u''_\iota u''_\jmath}}{\partial x_k} - \bar{\rho}\widetilde{u''_k u''_\jmath}u''_\iota - \widetilde{p'u''_\iota}\delta_{jk} - \widetilde{p'u''_\jmath}\delta_{ik}\right) -$$
$$-\bar{\rho}\left(\widetilde{u''_\iota u''_k}\frac{\partial\widetilde{u_\jmath}}{\partial x_k} + \widetilde{u''_\jmath u''_k}\frac{\partial\widetilde{u_\iota}}{\partial x_k}\right) + p'\left(\frac{\partial\widetilde{u''_\iota}}{\partial x_\jmath} + \frac{\partial u''_\jmath}{\partial x_\iota}\right) - 2\mu\frac{\partial\widetilde{u''_\iota}}{\partial x_k}\frac{\partial\widetilde{u''_\jmath}}{\partial x_k} + \frac{\overline{\rho' u''_\jmath}}{\bar{\rho}}\frac{\partial\bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\overline{\rho' u''_\iota}}{\bar{\rho}}\frac{\partial\bar{p}}{\partial x_j}. \quad (1)$$

O primeiro termo do lado esquerdo representa a variação local da tensão de Reynolds, o segundo termo determina o fluxo líquido da tensão de Reynolds pelo transporte advectivo. O primeiro termo do lado direito da equação define o termo de transporte difusivo das tensões de Reynolds, o segundo termo definem a taxa de produção das tensões de Reynolds, o terceiro termo é o termo de interação entre a pressão e a deformação da partícula fluida e o penúltimo termo representa a taxa de dissipação das tensões de Reynolds.

O último termo surge do processo de média e da decomposição de Favre. Este termo está vinculado apenas a escoamentos reativos e descreve a correlação entre as flutuações da velocidade e da densidade. Jones e Whitelaw (1982) afirmam que esse termo está associado ao processo de contra difusão das tensões de Reynolds. Baseando-se nessa interpretação, define-se que esse termo é modelado por

$$\overline{\rho' u''_\iota} = -\frac{1}{4{,}3}\frac{k}{\varepsilon}\,\widetilde{u''_\iota u''_k}\frac{\partial\bar{\rho}}{\partial x_k}, \quad (2)$$

Os termos de taxa de produção, de transporte advectivo e de derivada local são calculados exatamente como definidos na equação (1). Entretanto, observam-se três termos que precisam ser modelados: o termo de difusão, o termo de dissipação e o termo de interação entre pressão e deformação.

O termo de dissipação das tensões turbulentas assume isotropia das menores escalas dissipativas, considerando que as dissipações afetam exclusivamente as tensões turbulentas normais (Versteeg e Malalasekera, 2007). Wilcox (1993) discute que essa modelagem se fundamenta no fato de que o processo de dissipação ocorre apenas nas pequenas escalas do escoamento. Tais escalas, de acordo com a hipótese de Kolmogorov, são consideradas

localmente isotrópicas. Tendo como base essas afirmações, o termo de dissipação das tensões turbulentas é modelado por

$$\varepsilon_{ij} = 2\upsilon \frac{\partial \widetilde{u''_i \frac{\partial u''_j}{\partial x_k}}}{\partial x_k} = \frac{2}{3}\, \varepsilon\, \delta_{ij}. \tag{3}$$

A equação de transporte da taxa de dissipação da energia cinética turbulenta é a mesma desenvolvida para o modelo k-ε padrão.

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\varepsilon)}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho}\varepsilon\widetilde{u_j})}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon}\frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j}\right) + C_{1\varepsilon}\frac{\varepsilon}{k}2\mu_t\widetilde{S_{ij}}\cdot\widetilde{S_{ij}} - C_{2\varepsilon}\bar{\rho}\frac{\varepsilon^2}{k}, \tag{4}$$

na qual σ_ε, $C_{1,\varepsilon}$ e $C_{2,\varepsilon}$ são constantes do modelo e cujos valores são 1,00; 1,44 e 1,92 respectivamente.

Essa hipótese de modelagem implica em algumas das mesmas deficiências do modelo k-ε padrão. Versteeg e Malalasekera (2007) citam que jatos axissimétricos e escoamentos não confinados com recirculações podem não ser bem representados como consequência direta dessa modelagem.

O termo de difusão das tensões de Reynolds apresenta uma primeira parcela vinculada à difusão molecular da tensão de Reynolds, calculado exatamente como na equação (1). Os demais termos definem o transporte turbulento das tensões de Reynolds. A modelagem desses termos define que a taxa desse transporte é proporcional ao gradiente das tensões de Reynolds. Assim como nas demais equações de transporte turbulentas, os termos de transporte turbulentos são descritos através de uma analogia com o termo da difusão molecular, utilizando a viscosidade turbulenta definida pela hipótese de Boussinesq. Desta forma, o termo difusivo é simplificado para

$$\frac{\partial}{\partial x_k}\left(-\bar{\rho}u''_k\widetilde{u''_j u''_i} - \widetilde{p''u''_i}\delta_{jk} - \widetilde{p''u''_j}\delta_{ik}\right) = \frac{\partial}{\partial x_m}\left(\frac{\mu_t}{\sigma_k}\frac{\partial \widetilde{u''_i u''_j}}{\partial x_m}\right), \tag{5}$$

no qual σ_k é uma constante do modelo e é igual a 0,82.

O termo de interação entre a pressão e a deformação é o termo mais complexo do ponto de vista da modelagem. Este termo tem o efeito de diminuir a anisotropia entre as tensões de Reynolds, redistribuindo a energia. Wilcox (1993), Pope (2000) e Versteeg e Malalasekera (2007) explicitam dois processos que diminuem a anisotropia do processo. O primeiro é um

processo lento no qual o decréscimo da anisotropia não envolve a velocidade média do escoamento, apenas as escalas turbulentas, enquanto o segundo é um processo rápido em que o decréscimo da anisotropia é diretamente ligado às taxas de deformação do escoamento médio. Wilcox (1993) afirma que os termos rápido e lento não devem ser considerados literalmente, mas sim relacionados à presença ou à ausência da taxa de deformação média. Há a introdução de um terceiro termo para considerar o efeito da proximidade da parede no regime turbulento. Nessa região, há um aumento da anisotropia devido ao efeito de amortecimento da parede (Versteeg e Malalasekera, 2007) e, portanto, esse termo, ao contrário dos demais termos, aumenta a anisotropia do modelo.

A modelagem desse termo, baseado na descrição física desses processos, é dada por

$$\frac{p''}{\rho}\left(\widetilde{\frac{\partial u''_i}{\partial x_j}+\frac{\partial u''_j}{\partial x_i}}\right)=\phi_{ij,1}+\phi_{ij,2}+\phi_{ij,w}, \tag{6}$$

onde $\phi_{ij,1}$ corresponde ao termo de processo lento da interação entre pressão e deformação, $\phi_{ij,2}$ corresponde ao termo de processo rápido e $\phi_{ij,w}$ corresponde aos termos associados ao aumento da anisotropia pela proximidade na parede, e são modelados por

$$\phi_{ij,1}=-C_1\bar{\rho}\frac{\varepsilon}{k}\left(\widetilde{u''_i u''_j}-\frac{2}{3}\delta_{ij}k\right), \tag{7}$$

$$\phi_{ij,2}-C_2\left[\left(P_{ij}-C_{ij}\right)-\frac{1}{3}\delta_{ij}(P_{kk}-C_{kk})\right], \tag{8}$$

$$\begin{aligned}\phi_{ij,w}=C'_1\frac{\varepsilon}{k}\left(\widetilde{u''_k u''_m}n_k n_m\delta_{ij}-\frac{3}{2}\widetilde{u''_i u''_k}n_j n_k-\frac{3}{2}\widetilde{u''_i u''_k}n_i n_k\right)\frac{k^{\frac{3}{2}}}{C_l\varepsilon d}+\\ +C'_2\frac{\varepsilon}{k}\left(\phi_{km,2}n_k n_m\delta_{ij}-\frac{3}{2}\phi_{ik,2}n_j n_k-\frac{3}{2}\phi_{jk,2}n_i n_k\right)\frac{k^{\frac{3}{2}}}{C_l\varepsilon d},\end{aligned} \tag{9}$$

nas quais

$$P_{ij}=-\widetilde{u''_i u''_m}\frac{\partial\widetilde{u_j}}{\partial x_m}+\widetilde{u''_j u''_m}\frac{\partial\widetilde{u_i}}{\partial x_m} \tag{10}$$

corresponde ao termo de produção das tensões de Reynolds e

$$C_{ij} = \frac{\partial}{\partial x_k}\left(\widetilde{u_k}\widetilde{u''_i u''_j}\right) \tag{11}$$

corresponde ao termo de convecção, n_i, n_j, n_k, n_m, são as componentes do vetor normal unitário nas direções i, j, k, m provenientes da notação indicial; C_1, C_2, C'_1, C'_2, são constantes do modelo e recebem os valores 1,8; 0,6; 0,5 e 0,3 respectivamente, d é a distância do elemento até a parede e C_l é a constante do modelo definida por

$$C_l = \frac{C_\mu^{3/4}}{\kappa}, \tag{12}$$

na qual κ é a constante de Von Karmann e é igual a 0,4187.

Apesar de não ser utilizada diretamente nas equações de transporte do modelo RSM, a energia cinética turbulenta também é utilizada neste modelo e é dada por

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}k) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\bar{\rho}k\widetilde{u_i}) = \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\frac{\mu_t}{\sigma_k}\frac{\partial k}{\partial x_j}\right) + 2\mu_t\tilde{S}_{ij}\tilde{S}_{ij} - \bar{\rho}\varepsilon. \tag{13}$$

Conforme apresentado na seção 3.1.1, esta propriedade do escoamento é utilizada para a definição do escoamento próximo à parede e para definição das condições de contorno das equações de transporte das tensões de Reynolds na mesma região. Portanto, a modelagem da energia cinética turbulenta faz parte do modelo de turbulência RSM, mesmo que não seja utilizada diretamente nas equações de transporte.

3.1.1. Tratamento matemático da região próxima à parede

A região de fluxo próxima à parede aumenta a complexidade do problema e o custo computacional para o cálculo de escoamentos turbulentos (Pope, 2000). Os efeitos da presença da parede requerem modificações ou adendos aos modelos, pois estes são válidos para núcleos turbulentos em que esses efeitos podem ser negligenciados. Logo, os modelos de turbulência não são capazes de descrever corretamente a interação entre regime turbulento e parede. Para descrever corretamente essa interação, são utilizadas leis de parede para descrever as propriedades do escoamento nos elementos adjacentes às paredes do domínio de cálculo.

A região próxima à parede pode ser caracterizada por três regiões diferentes: a subcamada viscosa, na qual o escoamento tem características semelhantes ao laminar; a camada externa, na qual predominam as características turbulentas, e uma camada intermediária em que há características de escoamentos turbulentos e laminares.

Dentre as opções, neste estudo, foi utilizada a lei de parede padrão, que caracteriza a região próxima à parede pela equação da subcamada viscosa ou pela lei logarítmica, que descreve a camada externa. O uso de uma das equações em detrimento da outra depende da intensidade do regime turbulento observado na região.

A velocidade próxima à parede é descrita por duas equações diferentes. Para a região da subcamada viscosa é utilizada a equação (Launder e Spalding, 1974)

$$U^* = y^*, \tag{14}$$

na qual y^* é a distância adimensionalisada entre o baricentro do elemento adjacente e a parede, dada por

$$y^* = \frac{\bar{\rho} C_\mu^{1/4} k_P^{1/2} y_p}{\mu}, \tag{15}$$

onde k_P é a energia cinética turbulenta no elemento adjacente à parede e y_P é a distância entre o baricentro do elemento adjacente e a parede, e U^* é a velocidade adimensionalisada definida como

$$U^* = \frac{U_P C_\mu^{1/4} k_P^{1/2}}{\tau_w / \bar{\rho}}, \tag{16}$$

na qual U_P é a velocidade no elemento adjacente e τ_w é a tensão na parede.

A equação (14) é considerada válida apenas para os valores de y^* menores do que 11,225. Esse limite define a validade da equação da subcamada viscosa.

Para valores acima de 11,225, emprega-se a lei logarítmica, a qual é dada por (Launder e Spalding, 1974)

$$U^* = \frac{1}{\kappa} ln(E y^*), \tag{17}$$

onde E é uma constante empírica e igual a 9,793.

As relações para a subcamada viscosa e para a lei logarítmica são utilizadas para descrever a temperatura e a fração mássica nos elementos adjacentes à parede. Faz-se a hipótese de que camadas térmicas e de difusão podem ser correlacionadas com essas equações utilizando os números adimensionais de Prandtl e Schmidt respectivamente.

A relação entre as camadas térmica e de momento é definida pela aproximação

$$\frac{\delta}{\delta_T} \approx \sqrt{Pr}\,, \tag{18}$$

na qual Pr é o número adimensional de Prandtl.

Verificada a relação, é definida uma subcamada de condução térmica (Launder e Spalding, 1974 e Versteeg e Malalasekera, 2007)

$$T^* = \frac{(T_W - T_P)\bar{\rho} c_P k_P^{1/2}}{\dot{q}} = Pr\, y^*, \tag{19}$$

na qual $\dot{q}$ é o fluxo de calor através da parede, c_P é o calor específico do fluido, T_W é a temperatura na parede e T_P é a temperatura no elemento adjacente à parede, e é definida uma lei logarítmica térmica dada por (Launder e Spalding, 1974)

$$T^* = Pr_t \left[\frac{1}{\kappa} ln(Ey^*) + P\right], \tag{20}$$

onde

$$P = 9{,}24 \left[\left(\frac{Pr}{Pr_t}\right)^{3/4} - 1\right]\left[1 + 0{,}28 e^{-0{,}007 Pr/Pr_t}\right], \tag{21}$$

na qual Pr_t é o número adimensional de Prandtl turbulento, considerado 0,85 na parede.

A utilização da subcamada de condução térmica ou lei logarítmica térmica é condicionada pela lei utilizada para equação de momento linear. Caso seja utilizada a subcamada viscosa para o cálculo da velocidade, a subcamada de condução térmica é aplicada para definir a temperatura neste elemento do domínio.

Analogamente ao definido para a energia, uma subcamada é descrita pela equação

$$Y^* = \frac{(Y_{k,w} - Y_k)\bar{\rho} C_\mu^{1/4} k_P^{1/2}}{J_{k,w}} = Sc\, y^*, \tag{22}$$

onde Sc é o número adimensional de Schmidt e $J_{k,w}$ e o fluxo da espécie k através da parede, e uma camada logarítmica pela equação

$$Y^* = Sc_t \left[\frac{1}{\kappa} ln(Ey^*) + P_c\right], \tag{23}$$

na qual Sc_t é o número adimensional de Schmidt turbulento e P_c é

$$P_c = 9{,}24 \left[\left(\frac{Sc}{Sc_t}\right)^{3/4} - 1\right] \left[1 + 0{,}28 e^{-0{,}007 Sc/Sc_t}\right]. \tag{24}$$

Aplicando as leis de parede, obtêm-se as condições de contorno para as equações de energia, quantidade de movimento, espécies químicas e continuidade. Entretanto, ainda são necessárias as definições das condições de contorno das equações do modelo de turbulência.
Conforme apresentado anteriormente, a equação de transporte da energia cinética turbulenta é resolvida para todo o domínio, pois os valores das tensões de Reynolds nos elementos adjacentes à parede estão em função da energia cinética turbulenta.
Na região próxima à parede, aplica-se a condição de contorno de derivada nula

$$\frac{\partial k}{\partial n} = 0. \tag{25}$$

Após a definição do valor de k, são calculadas as condições de contorno das tensões de Reynolds dadas pelas relações (Versteeg e Malalasekera, 2007)

$$\frac{\widetilde{u''^2_\tau}}{k} = 1{,}098, \tag{26}$$

$$\frac{\widetilde{u''^2_\eta}}{k} = 0{,}247, \tag{27}$$

$$\frac{\widetilde{u''^2_\lambda}}{k} = 0{,}655, \tag{28}$$

e

$$\frac{\widetilde{u''_\eta u''_\tau}}{k} = 0{,}255, \tag{29}$$

nas quais $\widetilde{u''_\tau}$ é a flutuação na direção tangencial a parede, $\widetilde{u''_\eta}$ é a flutuação na direção normal e $\widetilde{u''_\lambda}$ é a flutuação na direção normal às demais.

A equação da taxa de dissipação da energia cinética turbulenta, em oposição à equação de k, não é resolvida em todo o domínio. Na região próxima a parede, é feita a hipótese de equilíbrio local, determinando que a taxa de produção de energia cinética turbulenta e a taxa de dissipação são iguais. Somada a essa hipótese, assume-se que a produção de k é definida pela equação

$$P = \tau_w \frac{\tau_w}{\kappa \bar{\rho} k_P^{1/2} y_P}. \tag{30}$$

Portanto, a taxa de dissipação ε_P no elemento adjacente a parede é dada por

$$\varepsilon_P = \frac{C_\mu^{3/4} k_P^{3/2}}{\kappa y_P}. \tag{31}$$

3.2. Modelagem dos processos de combustão

A modelagem de processos de combustão turbulentos passa por três pontos principais, segundo Echekki e Mastorakos (2011):

- A descrição da turbulência segundo um modelo de turbulência apropriado;
- A descrição da estrutura da chama;
- Um modelo de acoplamento entre os modelos de turbulência e de estrutura da chama;

O primeiro item já foi descrito na seção 3.1. Esta seção objetiva à descrição da estrutura da chama utilizando o modelo *flamelet* e à descrição do acoplamento entre os dois modelos utilizando funções de densidade de probabilidade.

3.2.1. Modelos de combustão baseados no transporte da fração de mistura

Modelos de combustão procuram descrever a estrutura da chama, mais especificamente a distribuição de temperatura, massa específica e espécies químicas do escoamento. Neste

trabalho, os modelos apresentados descrevem as propriedades escalares do escoamento em função da variável fração de mistura. A utilização da fração de mistura permite que a descrição da cinética química seja simplificada a solução de duas equações de transporte, a solução da equação de transporte da fração de mistura e da variância da fração de mistura. Dentre os modelos que utilizam a fração de mistura, foram destacados o modelo *flamesheet*, o modelo de equilíbrio e o modelo *flamelet*.

O *flamesheet model* (modelo Folha de Chama) fundamenta-se na hipótese de que a cinética química é infinitamente rápida em comparação com as escalas turbulentas e irreversível, considerando que oxidante e combustível nunca coexistem em uma mistura estequiométrica (Turns, 2000). Desta forma, a modelagem da combustão é simplificada a um processo de mistura e, ao ser atingida a mistura estequiométrica, há o consumo imediato de combustível e oxidante. O mecanismo deste modelo apresenta apenas um passo, considerando que a única reação envolvida é uma reação global de queima completa do combustível. Esse modelo reduz drasticamente a complexidade da interação entre turbulência e combustão, pois não há nenhum tipo de taxa de reação envolvida.

O modelo de Equilíbrio (*Equilibrium model*), assim como o modelo de folha de chama (*flamesheet model*), assume que a cinética química é infinitamente rápida, entretanto, conforme citado em Poinsot e Veynante (2000), as reações são reversíveis. A hipótese de equilíbrio local é feita e é possível verificar a coexistência de combustível e oxidante. As frações mássicas das espécies químicas são definidas pelas constantes de equilíbrio químico. Assim, como no modelo *flamesheet*, não há a necessidade de definir um mecanismo detalhado de cinética química, apenas uma reação global de oxidação do combustível.

A formulação do modelo *flamelet* introduz a taxa de dissipação escalar para caracterizar a chama em condições que se distanciam do equilíbrio, ou seja, atenua a hipótese de química infinitamente rápida (Peters, 2000 e Poinsot e Veynante, 2000). Entretanto, o modelo *flamelet* considera que as escalas de tempo de difusão e convecção são muito maiores do que as escalas de tempo das reações químicas, aplicando a hipótese de que as reações acontecem em estado de quasi-equilíbrio e de que a chama se ajusta imediatamente às condições do escoamento (mais especificamente às deformações da chama). As bibliotecas do modelo *flamelet* relacionam os valores das frações mássicas das espécies, da temperatura e da massa com os valores de fração de mistura e da taxa de dissipação escalar do escoamento.

3.2.2. Fração de mistura e sua variância

Turns (2000) apresenta a fração de mistura diretamente como um escalar conservativo, porém tal conclusão é melhor compreendida ao analisar a equação de transporte da fração de mistura. Peters (2000) afirma que a definição da fração de mistura é melhor derivada para um sistema homogêneo na ausência de difusão. Primeiro, a reação global de combustão é escrita e são definidos os coeficientes estequiométricos da reação

$$v'_{Fuel}Fuel + v'_{Oxidante}Oxidante \rightarrow v'_{produtos}\ Produtos. \tag{32}$$

Pode-se escrever a relação entre as variações de fração mássica de oxidante e combustível

$$\frac{dY_{Ox}}{v'_{ox}MW_{ox}} = \frac{dY_{Fuel}}{v'_{Fuel}MW_{Fuel}}, \tag{33}$$

na qual Y_{Ox} é a fração mássica de oxidante, Y_{Fuel} é a fração mássica de combustível, v'_{ox} e v'_{Fuel} são os coeficientes estequiométricos em base mássica do oxidante e do combustível, respectivamente, e MW_{ox} e MW_{Fuel} são os pesos moleculares do oxidante e do combustível. Realizando a integração para um sistema homogêneo, pode-se chegar à equação (34)

$$sY_{Fuel} - Y_{Ox} = sY_{Fuel,u} - Y_{Ox,u}, \tag{34}$$

na qual o índice u determina que as frações mássicas são definidas para pontos de misturas de gases não queimados, s é a relação estequiométrica mássica oxidante/combustível, dada pela equação,

$$s = \frac{v'_{ox}M_{ox}}{v'_{Fuel}M_{Fuel}} \tag{35}$$

e as frações mássicas sem índice correspondem a qualquer estado entre os gases queimados e os não queimados. Caso seja feita a hipótese de difusividade mássica igual para oxidante e combustível, a qual é comumente assumida, essa expressão é válida para sistemas não homogêneos (Peters, 2000).

Turns (2000) define a fração de mistura como

$$z = \frac{massa\ de\ material\ proveniente\ da\ linha\ de\ admissão\ de\ combustível}{massa\ total\ da\ mistura} \tag{36}$$

e quantitativamente é definida por Peters (2000), para um sistema com duas linhas de admissão, como

$$z = \frac{\dot{m}_1}{\dot{m}_1 + \dot{m}_2}, \tag{37}$$

na qual $\dot{m}_1$ representa a vazão de combustível admitida no sistema e $\dot{m}_2$ representa a vazão de ar admitida no sistema.

A fração mássica de combustível nos gases não queimados é relacionada com a fração de mistura através da equação (38)

$$Y_{Fuel,u} = Y_{Fuel_1} \cdot z\ , \tag{38}$$

na qual Y_{Fuel_1} é a fração de combustível na linha de admissão do combustível. Analogamente, pode ser escrito

$$Y_{Ox,u} = Y_{Ox_0}(1 - z), \tag{39}$$

na qual Y_{Ox_0} representa a fração de oxidante na linha de admissão de oxidante. Substituindo as equações (38) e (39) na equação (40), obtém-se:

$$z = \frac{sY_F - Y_{Ox} + Y_{Ox_0}}{sY_{F_1} - Y_{Ox_0}}. \tag{40}$$

Essa equação pode ser reescrita

$$z = \frac{(sY_F - Y_{Ox}) - (sY_{F_0} + Y_{Ox_0})}{(sY_{F_1} - Y_{Ox}) - (sY_{F_0} + Y_{Ox_0})}, \tag{41}$$

a qual facilita a interpretação da fração de mistura como uma normalização do escalar conservativo:

$$\varphi = sY_F - Y_{Ox} \tag{42}$$

Versteeg e Malalasekera (2007) obtêm a equação da fração de mistura através da conservação das espécies e conservação de massa, delineando a fundamentação desse escalar em equações de conservação.

É possível demonstrar que, partindo das equações de espécie, é obtida a equação de transporte da fração de mistura

$$\frac{\partial(\rho z)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho z u_i)}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\mathrm{D}_f \frac{\partial z}{\partial x_i}\right), \tag{43}$$

a qual explicita o caráter conservativo da fração de mistura, uma vez que não há termos fontes na equação de transporte. Há a introdução da difusividade da fração de mistura (D_f), que é igual à difusividade das espécies envolvidas, pois se assume que todas as espécies químicas têm a mesma difusividade na mistura.

A aplicação da decomposição de Favre e da média temporal na equação (43) tem-se a equação de transporte da fração de mistura média:

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{z})}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{z}\widetilde{u_i})}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\overline{\rho D_f \frac{\partial z}{\partial x_i}} - \bar{\rho}\widetilde{u''_i z''}\right). \tag{44}$$

O termo de segunda ordem é modelado através de uma analogia com a hipótese de Boussinesq e o termo molecular é negligenciado, pois se admite que o termo turbulento é muito maior. Logo,

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{z})}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{z}\widetilde{u_i})}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\bar{\rho} D_t \frac{\partial \tilde{z}}{\partial x_i}\right). \tag{45}$$

A utilização da β-PDF como método estatístico para definir os valores médios das variáveis do escoamento implica na necessidade de determinar o valor da variância da fração de mistura. Logo, a equação de transporte da variância da fração de mistura tem de ser resolvida. A equação de transporte da variância da fração de mistura é dada por

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\widetilde{z''^2})}{\partial t}+\frac{\partial(\bar{\rho}\widetilde{u_\iota}\widetilde{z''^2})}{\partial x_i}=-\frac{\partial}{\partial x_i}\left(\overline{\rho u''_\iota z''^2}\right)+2\left(\overline{\bar{\rho}D\frac{\partial z''^2}{\partial x_\iota}}\right)+2\overline{z''\frac{\partial}{\partial x_\iota}\left(\rho D\frac{\partial\tilde{z}}{\partial x_\iota}\right)}-2\overline{\rho u''_\iota z''}\frac{\partial\tilde{z}}{\partial x_i}-$$
$$2\overline{\rho D\frac{\partial z''}{\partial x_\iota}\frac{\partial z''}{\partial x_\iota}}. \tag{46}$$

O primeiro termo do lado direito da equação corresponde ao transporte turbulento. O segundo e terceiro termos do lado direito modelam o transporte difusivo molecular. O quarto termo corresponde à produção de variância de fração de mistura e o quinto termo define a taxa de dissipação da variância da fração de mistura.

Entretanto, essa equação é simplificada para

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\widetilde{z''^2})}{\partial t}+\frac{\partial(\bar{\rho}\widetilde{u_\iota}\widetilde{z''^2})}{\partial x_i}=\frac{\partial}{\partial x_i}\left(\bar{\rho}D_t\frac{\partial\widetilde{z''^2}}{\partial x_i}\right)+2\bar{\rho}D\left(\frac{\partial\tilde{z}}{\partial x_i}\right)^2-\rho\tilde{\chi}, \tag{47}$$

na qual $\tilde{\chi}$ é a média de Favre da taxa de dissipação, cuja definição é apresentada na seção 3.2.3.2. O transporte turbulento foi modelado através da introdução do primeiro termo do lado esquerdo da equação. Os termos dissipativo, produtivo e o segundo termo da difusão molecular são substituídos pela taxa de dissipação média que é dada por

$$\bar{\rho}\tilde{\chi}=2\rho D\overline{\frac{\partial z}{\partial x_\iota}\frac{\partial z}{\partial x_\iota}}+4\overline{\rho D\frac{\partial z''}{\partial x_\iota}}\frac{\partial z}{\partial x_i}+2\overline{\rho D\frac{\partial z''}{\partial x_\iota}\frac{\partial z''}{\partial x_\iota}}. \tag{48}$$

Esta taxa é calculada no domínio de cálculo pela equação (Peters, 2000 e Poinsot e Veynante, 2000):

$$\tilde{\chi}=C_\chi\frac{\tilde{\varepsilon}}{\tilde{k}}\widetilde{z''^2}, \tag{49}$$

na qual a C_χ é uma constante do modelo de valor igual a dois.

3.2.3. Modelo dos elementos de chamas laminares

3.2.3.1. Conceituação básica do modelo dos elementos de chamas laminares

Poinsot e Veynante (2000) e Peters (2000) apresentam que o modelo *flamelet* para escoamentos turbulentos se baseia na hipótese de que a escala de comprimento das reações químicas é muito menor do que as escalas de comprimento de difusão turbulenta. Baseado nessa hipótese, pode-se supor que um pequeno elemento de chama difusiva envolvido pelo escoamento turbulento tem a estrutura de uma chama laminar, o que permite utilizar as equações da seção 3.2.3.2.

Neste contexto, a grande vantagem dessa hipótese é o desacoplamento da estrutura química complexa da chama em relação às estruturas do escoamento (Echekki e Mastorakos, 2011). Essa hipótese permite que a modelagem da combustão seja feita de forma independente em relação à modelagem da turbulência, tanto considerando uma equação simples (modelo *flamesheet*) quanto uma biblioteca *flamelet* com cinética química detalhada

Definida a hipótese do conceito, é necessário verificar a validade do conceito e consequentemente do modelo. Para esta finalidade, é definido o número de Damköhler. O número de Damköhler compara as escalas de tempo do escoamento e da reação química, sendo definido como

$$D_a^{fl} = \frac{\tau_f}{\tau_c}, \tag{50}$$

na qual τ_f é a escala de tempo do escoamento e τ_c é a escala de tempo característica do processo de combustão. Em regimes turbulentos, Poinsot e Veynante (2000) demonstram que a escala de tempo do escoamento é dada por

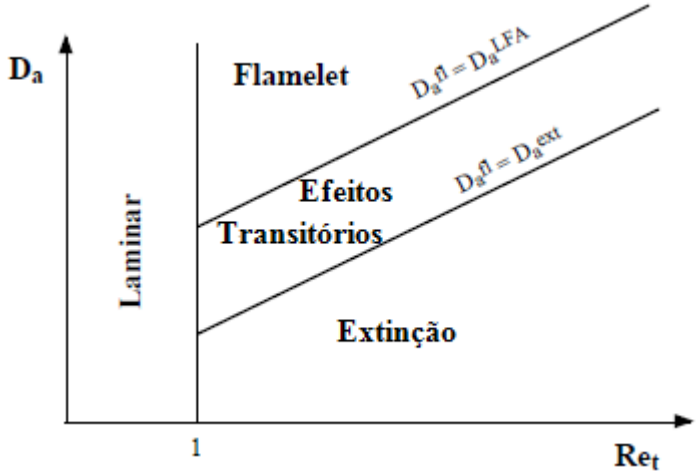
$$\tau_f = \frac{1}{\widetilde{\chi_{st}}} \approx \tau_k \tag{51}$$

na qual $\widetilde{\chi_{st}}$ é o a taxa de dissipação média para a mistura estequiométrica e τ_k é a escala de tempo de Kolmogorov.

A hipótese do conceito *flamelet* é aplicável somente se a escala de tempo das reações químicas for muito menor do que as escalas de tempo, ou seja, se o número de Damköhler for elevado. Essa consideração implica que o modelo não consegue representar corretamente

efeitos transitórios ou extinção da chama. As escalas de tempo das reações desses fenômenos não são muito menores do que as do escoamento e, portanto, o conceito *flamelet* não pode ser aplicado.

Figura 4 – Regimes de chamas turbulentas (adaptado de Poinsot e Veynante, 2000)

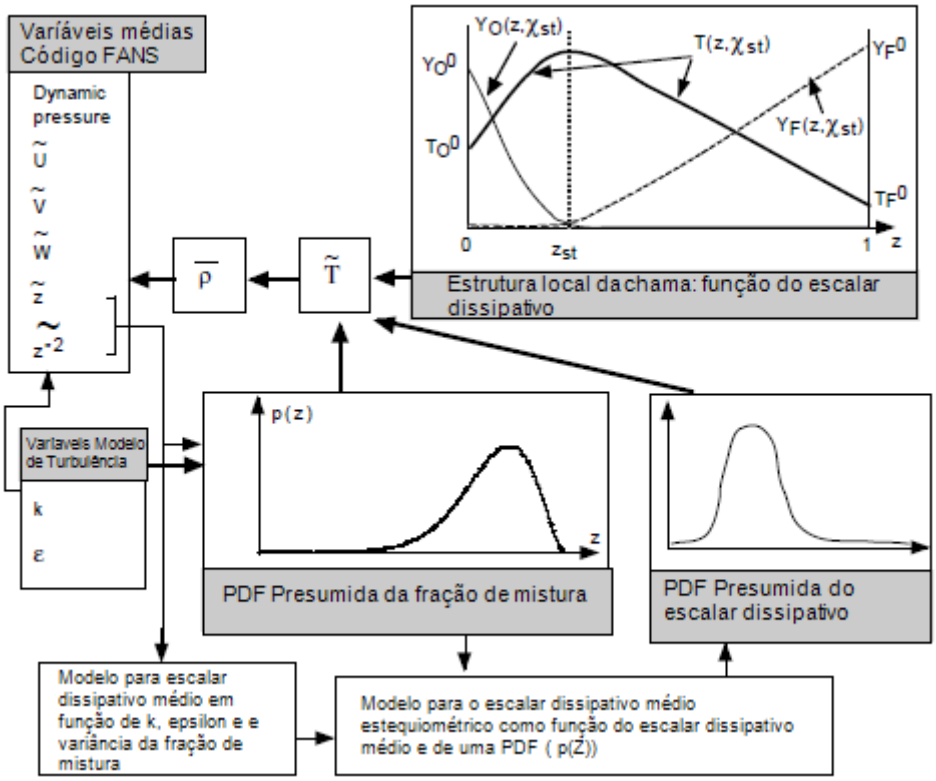


A Figura 4 apresenta os regimes de combustão turbulentos em função do número de Damköhler e do número de Reynolds. Os modelos baseados no conceito *flamelet* são válidos se o número de Damköhler for maior do que o valor limite D_a^{LFA}. Esse valor separa as regiões em que a hipótese do modelo *flamelet* é aplicável para descrição do regime de combustão turbulenta e a região em que começam a ser observados efeitos transitórios. Cuenot e Poinsot (1994) investigaram experimentalmente e definiram os parâmetros Da^{ext} e Da^{LFA}, os limites para cada regime de chama turbulenta. Em suma, o conceito/hipótese *flamelet* aplica-se somente para chamas turbulentas em que não são observados efeitos transitórios e extinção local da chama.

O modelo *flamelet* utiliza esse conceito e busca descrever as chamas turbulentas a partir de uma biblioteca de dados de uma chama laminar difusiva. A Figura 5 apresenta o fluxograma de cálculo do modelo *flamelet*.

Observa-se que a estrutura local da chama não necessita de dados do escoamento. Isso se deve a biblioteca de referência desenvolvida antes do cálculo numérico. Conforme o conceito *flamelet*, a estrutura da chama turbulenta pode ser caracterizada por elementos de chamas laminares e, portanto, é necessária a caracterização de uma chama laminar de difusão.

Figura 5 – Fluxograma operacional do modelo *flamelet* (adaptado de Poinsot e Veynante, 2000)



Normalmente são resolvidas as chamas laminares de fluxos opostos com base em um mecanismo de cinética química. As chamas de fluxos opostos são amplamente utilizadas, pois apresentam uma estrutura unidimensional (APÊNDICE C) e tem uma resolução analítica. Essa solução fornece a estrutura de uma chama laminar difusiva que servirá como base para a descrição da chama turbulenta. Entretanto, faz-se necessária a integração prévia dos dados laminares de acordo com uma função densidade de probabilidade, pois os modelos de turbulência RANS trabalham com variáveis médias e não com variáveis instantâneas.

Após essa integração, a estrutura da chama turbulenta pode ser descrita através de variáveis médias transportadas pelo escoamento.

3.2.3.2. Equações de conservação no espaço da fração de mistura: equações do modelo de elementos de chamas laminares

De acordo com as leis de conservação de massa, é realizado o balanço da concentração das espécies químicas:

$$\frac{\partial(\rho Y_k)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i Y_k) = \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\rho D \frac{\partial Y_k}{\partial x_i}\right) + \dot{\omega}_k \tag{52}$$

Peters (2000) apresenta a transformação de coordenada no espaço (Equação 53) e no tempo (Equação 54). Essa transformação de coordenadas é a base do modelo *flamelet*, no qual se faz a mudança do sistema de coordenadas cartesiano para o sistema baseado na fração de mistura como variável independente e duas coordenadas tangenciais à isossuperfície de fração de mistura estequiométrica.

$$\frac{\partial}{\partial x_i} = \frac{\partial z}{\partial x_i}\frac{\partial}{\partial z} \tag{53}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} = \frac{\partial z}{\partial t}\frac{\partial}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial \tau} \tag{54}$$

Peters (2000) salienta que a variável introduzida τ é idêntica à variável t.

Primeiramente, reescreve-se a equação de conservação das espécies químicas na seguinte forma

$$\rho \frac{\partial Y_k}{\partial t} + Y_k \frac{\partial \rho}{\partial t} + Y_k \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i) + \rho u_i \frac{\partial Y_k}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\rho D \frac{\partial Y_k}{\partial x_i}\right) + \dot{\omega}_k. \tag{55}$$

Reescrevendo, obtém-se

$$\rho \frac{\partial Y_k}{\partial t} + Y_k \left[\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i)\right] + \rho u_i \frac{\partial Y_k}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\rho D \frac{\partial Y_k}{\partial x_i}\right) + \dot{\omega}_k. \tag{56}$$

Nota-se que o termo em colchetes é a equação da continuidade, portanto esse termo é nulo. Utilizando a equação da continuidade e aplicando a transformação de coordenada (equações (133), (53) e (54), obtém-se

$$\rho \left(\frac{\partial z}{\partial t}\frac{\partial Y_k}{\partial z} + \frac{\partial Y_k}{\partial \tau}\right) + \rho u_i \frac{\partial z}{\partial x_i}\frac{\partial Y_k}{\partial z} = \frac{\partial z}{\partial x_i}\frac{\partial}{\partial z}\left(\rho D \frac{\partial z}{\partial x_i}\frac{\partial Y_k}{\partial z}\right) + \dot{\omega}_k. \tag{57}$$

Expandindo a derivada do primeiro termo do lado direito da equação e reescrevendo obtém-se

$$\rho\left(\frac{\partial z}{\partial t}\frac{\partial Y_k}{\partial z}+\frac{\partial Y_k}{\partial \tau}\right)+\rho u_i\frac{\partial z}{\partial x_i}\frac{\partial Y_k}{\partial z}=\rho D\frac{\partial z}{\partial x_i}\frac{\partial z}{\partial x_i}\frac{\partial^2 Y_k}{\partial z^2}+\frac{\partial Y_k}{\partial z}\frac{\partial z}{\partial x_i}\frac{\partial}{\partial z}\left(\rho D\frac{\partial z}{\partial x_i}\right)+\dot{\omega}_k. \tag{58}$$

O segundo termo do lado direito da equação pode ser reescrito da seguinte forma:

$$\frac{\partial Y_k}{\partial z}\frac{\partial z}{\partial x_i}\frac{\partial}{\partial z}\left(\rho D\frac{\partial z}{\partial x_i}\right)=\frac{\partial Y_k}{\partial z}\frac{\partial}{\partial x_i}\left(\rho D\frac{\partial z}{\partial x_i}\right). \tag{59}$$

Assim, rearranjando os termos, a equação da conservação das espécies químicas pode ser transformada em

$$\rho\frac{\partial Y_k}{\partial \tau}+\frac{\partial Y_k}{\partial Z}\left[\rho\frac{\partial z}{\partial t}+\rho u_i\frac{\partial z}{\partial x_i}-\frac{\partial}{\partial x_i}\left(\rho D\frac{\partial z}{\partial x_i}\right)\right]=\rho D\frac{\partial z}{\partial x_i}\frac{\partial z}{\partial x_i}\frac{\partial^2 Y_k}{\partial z^2}+\dot{\omega}_k. \tag{60}$$

O termo dentro dos colchetes é a equação da conservação da fração de mistura, portanto este termo é nulo. Assim, a equação das espécies químicas no sistema de coordenadas da fração de mistura é

$$\rho\frac{\partial Y_k}{\partial \tau}=\rho D\frac{\partial z}{\partial x_i}\frac{\partial z}{\partial x_i}\frac{\partial^2 Y_k}{\partial z^2}+\dot{\omega}_k. \tag{61}$$

Poinsot e Veynante (2000) e Peters (2000) definem a taxa de dissipação escalar χ.

$$\chi=2D\left(\frac{\partial z}{\partial x_i}\frac{\partial z}{\partial x_i}\right). \tag{62}$$

Aplicando a definição de taxa de dissipação escalar, obtém-se

$$\rho\frac{\partial Y_k}{\partial \tau}=\frac{1}{2}\rho\chi\frac{\partial^2 Y_k}{\partial z^2}+\dot{\omega}_k. \tag{63}$$

Para definir a estrutura da chama, a transformação de coordenadas também tem de ser aplicada à equação de energia. A equação de energia é dada por

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho h)+\frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j h)=\frac{\partial}{\partial x_j}\left[\frac{\mu}{\sigma_k}\frac{\partial h}{\partial x_j}\right]+S_h, \tag{64}$$

na qual S_h é o termo fonte da equação de energia devido à troca de energia entre as fases ou à troca de energia por radiação.

Esta equação pode ser reescrita na forma não conservativa

$$\rho \frac{\partial h}{\partial t} + h \frac{\partial \rho}{\partial t} + h \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i) + \rho u_i \frac{\partial h}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\rho D \frac{\partial h}{\partial x_i}\right) + S_h. \tag{65}$$

Rearranjando os termos da equação, tem-se

$$\rho \frac{\partial Y_k}{\partial t} + Y_k \left[\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i)\right] + \rho u_i \frac{\partial Y_k}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\rho D \frac{\partial Y_k}{\partial x_i}\right) + \dot{\omega}_k. \tag{66}$$

O termo em colchetes é nulo, pois é idêntico à equação da continuidade. Retirando esse termo e aplicando a transformação de coordenadas, obtém-se

$$\rho \left(\frac{\partial z}{\partial t}\frac{\partial h}{\partial z} + \frac{\partial h}{\partial \tau}\right) + \rho u_i \frac{\partial z}{\partial x_i}\frac{\partial h}{\partial z} = \frac{\partial z}{\partial x_i}\frac{\partial}{\partial z}\left(\rho D \frac{\partial z}{\partial x_i}\frac{\partial h}{\partial z}\right) + S_h. \tag{67}$$

Aplicando as regras de derivação no primeiro termo do lado direito da equação e rearranjando, escreve-se

$$\rho \left(\frac{\partial z}{\partial t}\frac{\partial h}{\partial z} + \frac{\partial h}{\partial \tau}\right) + \rho u_i \frac{\partial z}{\partial x_i}\frac{\partial h}{\partial z} = \rho D \frac{\partial z}{\partial x_i}\frac{\partial z}{\partial x_i}\frac{\partial^2 h}{\partial z^2} + \frac{\partial h}{\partial z}\frac{\partial z}{\partial x_i}\frac{\partial}{\partial z}\left(\rho D \frac{\partial z}{\partial x_i}\right) + \dot{\omega}_k. \tag{68}$$

Reescrevendo o segundo termo do lado direito da equação, obtém-se

$$\frac{\partial h}{\partial z}\frac{\partial z}{\partial x_i}\frac{\partial}{\partial z}\left(\rho D \frac{\partial z}{\partial x_i}\right) = \frac{\partial h}{\partial z}\frac{\partial}{\partial x_i}\left(\rho D \frac{\partial z}{\partial x_i}\right) \tag{69}$$

Introduzindo o termo acima na equação (68), obtém-se

$$\rho \frac{\partial Y_k}{\partial \tau} + \frac{\partial Y_k}{\partial Z}\left[\rho \frac{\partial z}{\partial t} + \rho u_i \frac{\partial z}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\rho D \frac{\partial z}{\partial x_i}\right)\right] = \rho D \frac{\partial z}{\partial x_i}\frac{\partial z}{\partial x_i}\frac{\partial^2 Y_k}{\partial z^2} + \dot{\omega}_k. \tag{70}$$

O termo dentro dos colchetes é a equação da conservação da fração de mistura, portanto este termo é nulo. Assim, a equação da energia no sistema de coordenadas da fração de mistura é

$$\rho \frac{\partial h}{\partial \tau} = \frac{1}{2} \rho \chi \frac{\partial^2 h}{\partial z^2} + S_h \tag{71}$$

Peters (2000) e Poinsot e Veynante (2000) definem que as equações do modelo *flamelet* são as equações das espécies químicas e da energia no sistema de coordenadas local da chama tendo como variável independente a fração de mistura.

A introdução da nova variável taxa de dissipação escalar (χ) é o fator que diferencia os modelos *flamelet* e *flamesheet*. A taxa de dissipação escalar tem dimensão inversa do tempo (1/s) como uma deformação (conforme discutido em Peters, 2000 e Poinsot e Veynante, 2000) e é a única variável relacionada ao sistema de coordenada espacial. Poinsot e Veynante (2000) afirmam que essa variável é intrinsicamente relacionada à taxa de deformação (*strain rate*), pois, ao aumentar a taxa de deformação da chama, a variável χ aumenta. Essa proporcionalidade pode ser verificada pelo equacionamento que descreve as chamas opostas em regime laminar.

Outra característica importante do modelo *flamelet* é a parametrização das equações de espécies químicas e da equação de energia, pois ambas dependem da mesma variável, a taxa de dissipação escalar χ. Diferentes valores de χ implicam em diferentes estruturas de chamas caracterizadas pelas equações, portanto a variável χ tem papel importante para correlacionar as equações de espécies químicas e da energia, obtendo uma descrição coerente da estrutura da chama.

3.2.3.3. Mecanismo de cinética química

O mecanismo de cinética química é um dado de entrada do modelo *flamelet*, para desenvolvimento das *look up tables* (tabelas de referência). Portanto, um mecanismo de cinética química do etanol é necessário.

Marinov (1999) definiu um mecanismo extremamente abrangente com 383 reações e 57 espécies envolvidas. O modelo abrange um vasto número de espécies e equações torna o modelo mais complexo, levando a uma tabela maior aumentando o tempo de desenvolvimento da tabela e do pré-processamento da simulação. Leplat et al. (2011) desenvolveu um mecanismo reduzido com 40 espécies e 355 reações,

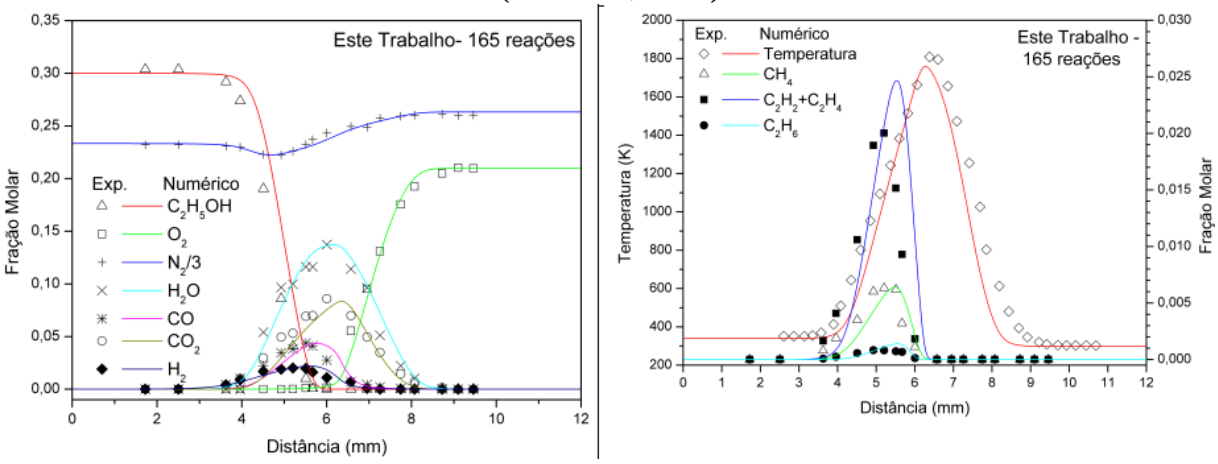
Demétrio (2013) desenvolveu um mecanismo reduzido com 165 reações e 36 espécies químicas, o qual foi utilizado como dados de entrada para o modelo *flamelet*. O modelo desenvolvido por Demétrio (2013) foi validado através de comparação com outros dados

disponíveis na literatura. A Figura 6 mostra os resultados obtidos por Demétrio (2013) e sua comparação com resultados experimentais para chamas de difusão de fluxos opostos ("*opposed flames*") laminares.

Demétrio (2013) afirma que seu mecanismo reduzido apresenta as mesmas vantagens e defeitos do mecanismo apresentado por Leplat (2011), ao caracterizar as chamas de fluxos opostos. Os principais pontos são a subestimação da formação do metano (CH_4) (e por consequência do CO e do CO_2) e a superestimação da fração molar do etanol (C_2H_5OH). Entretanto, o modelo apresenta as mesmas tendências dos resultados experimentais, pois as curvas dos resultados numéricos são semelhantes às curvas dos obtidos experimentalmente. A distribuição de temperatura descrita pelo mecanismo assemelha-se a obtida experimentalmente. A temperatura máxima do experimento é maior do que a temperatura máxima do experimento, porém o formato da curva permite afirmar que o mecanismo representa com acurácia esta chama, uma vez que os gradientes de temperatura foram muito bem representados.

O mecanismo de Demétrio (2013) é utilizado para obter uma solução numérica para o escoamento da chama de difusão laminar de fluxos opostos (APÊNDICE C). Os resultados numéricos laminares são integrados de acordo com as PDF's definidas pelo modelo e são tabelados previamente à simulação numérica. Desta forma, os resultados das chamas opostas estão em função dos valores locais de $\tilde{z}$, $\widetilde{z''^2}$, $\tilde{h}$ e $\tilde{\chi}_{st}$. Logo, apenas as equações de transporte dessas variáveis serão calculadas, ao invés de resolver uma equação para cada uma das espécies químicas e as taxas de progresso das reações do mecanismo de cinética química.

Figura 6 – Resultados experimentais e numéricos para chamas laminares de fluxos opostos (Demétrio, 2013)



3.2.4. Modelo para a descrição de escoamentos reativos turbulentos

A modelagem de chamas difusivas turbulentas requer atenção ao tratamento matemático das variáveis. Os modelos de turbulência RANS não descrevem os valores instantâneos das propriedades transportadas pelo escoamento, mas sim valores médios. Porém, o modelo de combustão baseia sua formulação em variáveis instantâneas, uma vez que as taxas de reações químicas são definidas pelas frações mássicas instantâneas das espécies químicas.

Essa diferença de abordagem dos dois modelos, devido ao tratamento estatístico da turbulência, implica na necessidade de um tratamento estatístico das variáveis instantâneas do modelo reativo para que se obtenha concordância entre os modelos.

Peters (2000) afirma que, para cada ponto do escoamento turbulento, é possível determinar os valores médios das variáveis do modelo reativo, supondo que o campo de densidade das variáveis seja conhecido ou presumido. De outra forma, é necessário calcular os valores médios das variáveis do modelo de reação química através do emprego de funções densidade de probabilidade, comumente referidas como PDF's (*Probability Density Functions*).

Genericamente, a média de uma variável qualquer q, função de uma variável z, é dada pela integração:

$$\bar{q}(z) = \int_{-\infty}^{\infty} q(z)P(z)\, dz \tag{72}$$

onde $P(z)$ é a função densidade probabilidade que descreve a propriedade $q(z)$. Em escoamentos reativos, as equações do modelo de reação química estudados estão escritos em função da variável fração de mistura (z), a qual só pode assumir valores entre 0 e 1 ($0 \leq z \leq 1$). Portanto, a equação acima pode ser reescrita:

$$\bar{q}(z) = \int_{0}^{1} q(z)P(z)\, dz \tag{73}$$

Observa-se que foi obtido o valor médio de acordo com a decomposição de Reynolds, entretanto, para escoamentos reativos turbulentos, é necessário obter o valor médio de acordo com a decomposição de Favre. Segundo Whitelaw e Jones (1982), o valor médio pode ser calculado por:

$$\tilde{q}(z) = \int_0^1 q(z)\tilde{P}(z)\, dz \tag{74}$$

Há a introdução de uma nova PDF $\tilde{P}(z)$, porém se trata da ponderação da PDF $P(z)$ através da densidade. Ou seja,

$$\tilde{P}(z) = \frac{\rho(z)}{\bar{\rho}} P(z) \tag{75}$$

A definição da função densidade de probabilidade pode variar de acordo com o objetivo da modelagem, bem como o objetivo da simulação. No caso deste trabalho foi utilizada a função β-PDF.

A função β-PDF é amplamente utilizada em estudos de combustão turbulenta, como pode ser observada pelos trabalhos de Sacomano (2011), Chrigui (2005), Fukumasu (2010) e Chrigui et al (2012). Peters (2000) e Versteeg e Malalasekera (2007) afirmam que esta função é a mais utilizada nos códigos CFD comerciais e entre programadores de CFD e Jones e Whitelaw (1982) afirmam que bons resultados são obtidos ao utilizando a função beta.

Uma propriedade interessante desta função é a dependência não só da fração de mistura, mas também, indiretamente, da variância da fração de mistura. Essa propriedade é explicitada através da formulação matemática dessa função, pois um dos parâmetros da função β-PDF necessita da informação da variância da fração de mistura.

A definição da função β-PDF, já aplicada para fração de mistura, é:

$$P(z) = \frac{z^{a-1}(1-z)^{b-1}}{\int_0^1 z^{a-1}(1-z)^{b-1} dz} \tag{76}$$

na qual:

$$a = \tilde{z}\left[\frac{\tilde{z}(1-\tilde{z})}{\widetilde{z''^2}} - 1\right] \tag{77}$$

e

$$b = \frac{a}{\tilde{z}} - a \tag{78}$$

A função β-PDF pode assumir várias formas dependendo dos valores de fração de mistura e da respectiva variância. No limite de valores de variância da fração de mistura tendendo a

zero, é possível demonstrar que sua forma se aproxima da forma de uma curva gaussiana (Peters, 2000). A análise das equações (76) a (78) mostra que há dois pontos de singularidade: fração de mistura nula (ponto de entrada de oxidante) e fração de mistura unitária (ponto de alimentação de combustível). Essa característica inviabiliza a utilização da função β-PDF para funções com singularidades nestes pontos.

A utilização da PDF conforme apresentada até o momento fica restrita aos modelos *flamesheet* e equilíbrio ambos adiabáticos. Nesses modelos, todas as variáveis do modelo de combustão são escritas somente em função da fração de mistura. Entretanto, ao modelar chamas de sprays, é necessário considerar o resfriamento evaporativo da fase gasosa (seção 3.3.3). Esse resfriamento adiciona um termo fonte à equação de energia da fase gasosa e, portanto, a temperatura e a massa específica dessa fase já não dependem apenas da fração de mistura, mas também da entalpia transportada pelo escoamento. A PDF passa ser função de duas variáveis independentes, entalpia e fração de mistura e passa a se denominar *joint* PDF. O valor médio passa a ser calculado por:

$$\tilde{q}(z,h) = \int_{-\infty}^{\infty}\int_{0}^{1} q(z,h)\tilde{P}(z,h)\, dz\, dh \tag{79}$$

na qual h é a entalpia absoluta da mistura da fase gasosa. Faz-se a hipótese que as variáveis sejam estatisticamente independentes, o que permite caracterizar a *joint* PDF como a multiplicação de duas PDF's completamente segregadas ou marginais:

$$\tilde{P}(z,h) = \tilde{P}(z|h) = \tilde{P}(z)\cdot\tilde{P}(h) \tag{80}$$

Assume-se que o campo de densidade relativo à fração de mistura é descrito pela função β-PDF, conforme descrito para escoamentos reativos adiabáticos monofásicos. Porém, não é presumido o mesmo campo de densidade para a entalpia. Comumente, aproxima-se o campo de densidade da entalpia pela função delta de Dirac.

$$\tilde{P}(h) = \delta\left(h - \tilde{h}\right) \tag{81}$$

Assim, a média da variável q é dada por:

$$\tilde{q}(z,h) = \int_{-\infty}^{\infty}\int_{0}^{1} q\left(z,\tilde{h}\right)\tilde{P}(z)\,dz\,dh \tag{82}$$

A formulação da *joint* PDF de fração de mistura e entalpia é utilizada nos modelos *flamesheet* e equilíbrio não adiabático, os quais são aplicáveis para escoamentos reativos turbulentos de sprays.

O modelo *flamelet* apresenta uma nova variável, a taxa de dissipação escalar χ. Peters (2000) afirma que há dependência do campo de densidade da variável q em relação ao escalar dissipativo, χ. Esta dependência é explicitada pelo fato de que as equações no modelo *flamelet* estão descritas em função desta variável (seção 3.2.3.2).

Novamente, é feita a hipótese de independência estatística das variáveis, portanto:

$$\tilde{P}(z,\chi,h) = \tilde{P}(z)\cdot\tilde{P}(\chi)\cdot\tilde{P}(h) \tag{83}$$

Poinsot e Veynante (2000) apresentam duas PDF's comumente usadas para a distribuição da variável q em função do escalar dissipativo: a função delta de Dirac e a distribuição normal logarítmica. Neste trabalho, assumiu-se que a PDF da taxa de dissipação escalar foi aproximada pela função delta de Dirac, dada por:

$$\tilde{P}(\chi_z) = \delta(\chi_z - \tilde{\chi}_z) \tag{84}$$

na qual $\tilde{\chi}_z$ é a taxa de dissipação escalar média condicionada por um valor z qualquer da fração de mistura.

Calculado o valor da média condicional da taxa de dissipação escalar, o valor médio de uma variável da fase gasosa é dado por:

$$\bar{\rho}\tilde{q} = \int_{0}^{1} \rho q\left(z,\tilde{\chi}_{st},\tilde{h}\right)P(z)\,dz \tag{85}$$

3.3. Descrição da fase dispersa (fase líquida)

Esta seção define os métodos e modelos utilizados para descrever os fenômenos da fase líquida segundo a abordagem lagrangeana. Primeiro, é descrito o modelo da cinemática das gotas, que define sua trajetória dentro do domínio. Em seguida, apresenta-se o modelo de

evaporação da gota, o qual define as taxas de transferência de energia e massa para ou da gota.

O último tópico a ser abordado é o acoplamento interfásico, no qual as taxas de transporte calculadas para a fase líquida são introduzidas nas equações de transporte da fase gasosa.

Sirignano (2010) apresenta modelagens para descrever o movimento interno da gota, porém a aplicação das equações de fenômeno na fase dispersa implica em grande aumento do custo computacional e são desconsideradas nesse trabalho.

3.3.1. Classificação de sprays

Ao tratar de sprays, é necessário definir dois adimensionais, o número de Reynolds de escorregamento (Re_e) e o número de Stokes (St). O número de Stokes (equação (86)) é definido pela razão entre escalas de tempo das fases dispersa e dispersante. A fase dispersa é caracterizada pelo tempo de relaxação da partícula, intervalo de tempo para o qual uma partícula de diâmetro representativo do spray leva para atingir a mesma velocidade do escoamento da fase dispersante, e sua modelagem está apresentada na equação (88). A escala de tempo da turbulência do escoamento (T_i) pode ser estimada pelos valores de k e ε, conforme definido em Pope (2000) e Wilcox (1993) e apresentado na equação (87). Seguindo a definição clássica do número de Reynolds, o número de Reynolds de escorregamento (equação (89)) relaciona as forças de inércia do escoamento e viscosas do escoamento, porém a velocidade a ser considerada é a relativa entre as fases dispersantes e dispersas.

$$St = \frac{\tau_P}{T_i} \tag{86}$$

$$T_i = \frac{k}{\varepsilon} \tag{87}$$

$$\tau_P = \left(\frac{18\mu}{\rho_l d_P^2}\frac{C_D Re_e}{24}\right)^{-1}, \tag{88}$$

na qual C_D é o coeficiente de arrasto da gota, d_P é o diâmetro da gota, ρ_l é a massa específica da gota, μ é viscosidade da fase dispersante e Re_e é o número de Reynolds de escorregamento, definido por

$$Re_e = \frac{\rho d_P |\vec{u} - \vec{u}_P|}{\mu}, \tag{89}$$

onde ρ é a massa específica da fase dispersante, $\vec{u}$ é o vetor velocidade da fase dispersante e $\vec{u}_P$ é o vetor velocidade da gota.

Sacomano (2011) adaptou o trabalho de Chrigui (2005) para determinar a influência das partículas do spray no escoamento da fase dispersante. Crowe et al (1996) propõe a utilização da fração volumétrica da fase líquida (α_P), para classificação do tipo de spray. A classificação é apresentada na Figura 7. A equação dessa variável da é dada por

$$\alpha_P = \frac{V_L}{V_T}. \tag{90}$$

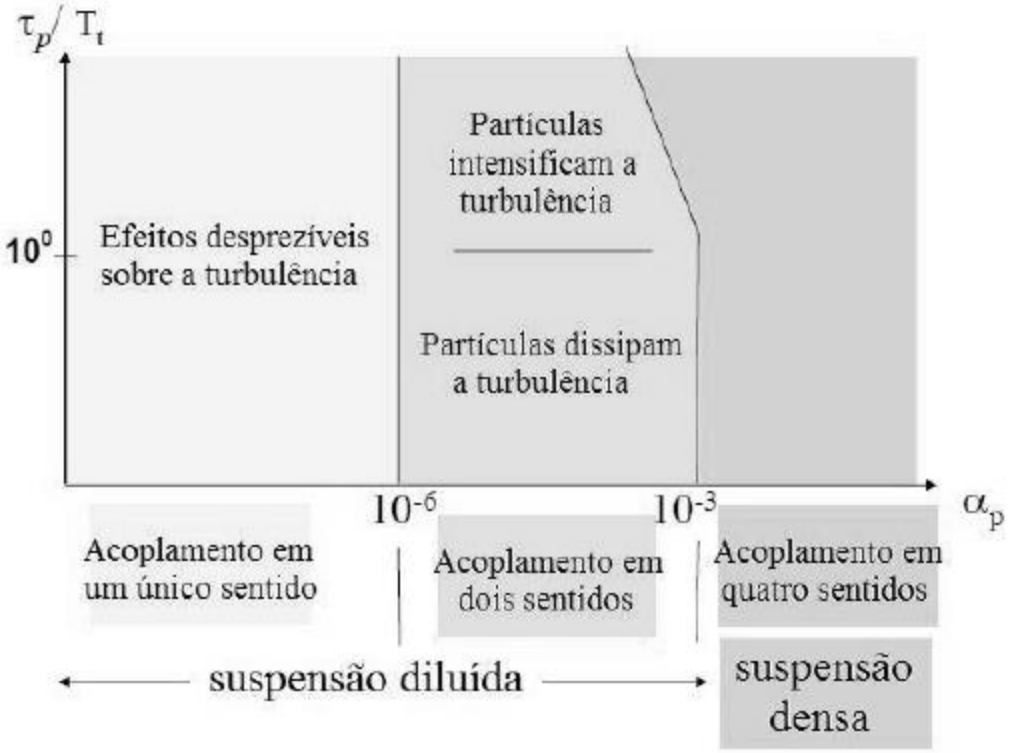
Na Figura 7, são caracterizados dois tipos de sprays os diluídos e os densos. Os sprays densos não serão estudados aqui devido a sua grande complexidade.

Três métodos de acoplamento da turbulência entre as fases podem ser assumidos:

- Acoplamento em um único sentido: a fase dispersa não interfere na fase dispersante, portanto os efeitos turbulentos da presença da fase dispersa sobre a fase dispersante podem ser negligenciados;
- Acoplamento em dois sentidos: há também interferência da fase dispersa sobre a fase dispersante, o que implica na utilização de modelos de modulação da turbulência (seção 3.3.6.2);
- Acoplamento em quatro sentidos: tem de ser considerado também o acoplamento entre partículas, uma vez que sua interação é intensa e não pode ser desconsiderada. Sempre há a influência da fase dispersante sobre a fase dispersa, uma vez que a turbulência é um grande intensificador de troca de calor e, portanto, interfere diretamente no modelo evaporativo das partículas.

Ainda ao analisar a Figura 7, infere-se que o efeito das partículas sobre a turbulência da fase dispersante pode ser ignorado desde que o spray seja bastante diluído. Caso o tempo de relaxação da partícula seja maior do que o da escala de tempo da turbulência, há intensificação da turbulência pelo escoamento da turbulência, por outra perspectiva há aumento da energia cinética turbulenta da fase dispersante. Porém, caso seja menor, há dissipação da turbulência.

Figura 7 – Classificação do spray (Sacomano (2011), adaptado de Chrigui (2005))



O impacto da presença das gotículas no regime turbulento da fase dispersante tem de ser bem compreendido, pois a modulação da turbulência (seção 3.3.6) tem de estar de acordo com o comportamento físico demonstrado acima.

3.3.2. Análise cinemática das gotas

A fase dispersa é descrita por uma abordagem lagrangeana (Chrigui, 2005). Assim, a descrição do movimento da gota dentro da fase dispersante é semelhante à translação de esferas sólidas. Seguindo as proposições da mecânica clássica de Newton, utiliza-se a definição de velocidade (equação (91)) para determinar a posição da gota. Integrando essa equação, obtém-se o valor numérico da posição da gota dentro do referencial do domínio.

$$\frac{d\vec{x}_P}{dt} = \vec{u}_P \tag{91}$$

na qual $\vec{x}_P$ é o vetor posição da partícula e $\vec{u}_P$ é o vetor velocidade da partícula.

O próximo passo é a obtenção do vetor velocidade $\vec{u}_P$, que é obtido com a integração do vetor de aceleração $\vec{a}_P$, que, por sua vez, pode ser calculado pela aplicação da segunda lei de

Newton (ou da mecânica do corpo rígido, o Teorema do Baricentro). Primeiro, define-se que há apenas a atuação de força pela fase dispersante e pela gravidade, pois foi feita a hipótese de spray disperso e não há colisões entre gotas. Logo, a força resultante é resultado da atuação das forças de arrasto e gravidade. Substituindo as formulações dessas forças e aplicando a segunda lei de Newton, define-se a seguinte expressão para o vetor aceleração $\vec{a}_P$:

$$\frac{d\vec{u}_P}{dt} = \frac{3}{4}\frac{C_D}{d_P}\left(\frac{\rho}{\rho_l}\right)(\vec{u} - \vec{u}_P)|\vec{u} - \vec{u}_P| + \vec{g}\,\frac{(\rho_l - \rho)}{\rho_l} \tag{92}$$

onde g é o vetor de aceleração da gravidade. A equação (92) pode ser reescrita:

$$\frac{d\vec{u}_P}{dt} = \frac{18\mu}{d_P^2\rho_l}\frac{C_D Re_e}{24}(\vec{u} - \vec{u}_P) + \vec{g}\,\frac{(\rho_l - \rho)}{\rho_l}. \tag{93}$$

A influência do termo gravitacional é pequena em comparação ao arrasto, entretanto optou-se pela utilização desse termo.

Nota-se que ainda não foi definido o coeficiente de arrasto da equação (93). Sacomano (2011) e Chrigui (2005) usam a correlação abaixo proposta por Yuen e Chen (1976), corrigida para utilização em Sprays.

$$C_D = \frac{24}{Re_e}\left(1 + \frac{Re_e^{2/3}}{6}\right) \quad : \quad 0 < Re_e \leq 1000 \tag{94}$$

$$C_D = 0{,}424 \quad : \quad Re_e > 1000 \tag{95}$$

Outros termos poderiam ser incluídos no equacionamento da segunda lei de Newton, dentre os quais podem ser citados o movimento browniano, forças devido a gradientes de temperatura (*thermophoretic force*) e força de sustentação devido ao cisalhamento (*Saffman's Lift Force*).

3.3.3. Modelo de evaporação da fase líquida

O processo de combustão acontece sempre na fase gasosa, independente se o combustível originalmente está na fase sólida ou líquida. Esse fato explicita a importância do processo de evaporação para combustíveis líquidos. A evaporação é um processo extremamente

complexo, pois envolve várias áreas de conhecimento dos fenômenos de transporte, destacando-se a transferência de calor, a transferência de massa e a termodinâmica clássica.

Como todo modelo, o processo de evaporação segue uma série de simplificações com a finalidade de viabilizar a caracterização numérica do fenômeno. Primeiro são feitas algumas considerações sobre a fase líquida e sua interação com a fase gasosa:

- O spray é considerado diluído e não há interação entre as gotas do spray;
- A gota é constituída de etanol puro;
- Gotas são perfeitamente esféricas;
- Não há solubilização da fase gasosa na fase líquida; pode se dizer que a fase gasosa é imiscível na fase líquida;
- Observa-se o estado de equilíbrio entre as fases na interface;
- Ignoram-se quaisquer tipos de fenômenos radiativos (por exemplo: troca de calor entre as fases ou de qualquer condição de contorno de parede, caso seja uma das condições de contorno);
- Utiliza-se a hipótese de regime quase estático para a fase gasosa (derivadas temporais nulas para essa fase). Essa hipótese é apoiada pelo fato de que a difusividade térmica da fase gasosa é muito menor do que a líquida (Faeth, 1977);
- As flutuações turbulentas da fase gasosa não são explicitamente consideradas
- A distância entre as gotas do spray são muito maiores que seus respectivos diâmetros;
- Movimento interno da gota é desconsiderado;

Kuo (1986) salienta que o modelo esférico de gota é válido somente para sprays caracterizados como diluídos, ou seja, o volume ocupado pela fase líquida é extremamente inferior ao da fase gasosa. A diluição do spray implica em poucos eventos de colisão, o que permite negligenciar a coalescência de gotas e as deformações no formato da gota.

A deformação da gota pode ocorrer devido à diferença de velocidade entre as duas fases, ou seja, o efeito de escorregamento da partícula pode ser intenso ao ponto de provocar alterações na forma da gotícula. Essa questão será discutida com profundidade na seção 3.3.4, inclusive utilizando parâmetros definidos para sprays de etanol.

A insolubilidade da fase gasosa na fase líquida facilita o tratamento da troca de massa e a definição das propriedades do líquido, em especial na interface entre as fases, onde se assume que pode ser observado o equilíbrio termodinâmico. Ao ignorar os fenômenos radiativos, a troca de calor entre as fases se resume ao processo convectivo, porém sabe-se que, a altas

temperaturas, a troca de calor por radiação atinge valores significativos e, em certos casos, o processo preponderante de troca entre os meios. Portanto, essa hipótese tem de ser tomada com certa precaução e ser questionada caso não sejam obtidos resultados condizentes.

Analisando o processo evaporativo, propõe-se que o problema seja espacialmente dividido em três regiões:

- O interior da gota
- A interface gás-líquido, ou região de filme (região em que são descritas as transferências de calor e massa)
- A fase gasosa.

A dinâmica da fase gasosa é descrita pelas equações de transporte e, para os cálculos do processo de evaporação, assume-se que as propriedades da fase gasosa sejam uniformes dentro do volume de controle em todas as direções.

A modelagem da evaporação, portanto, procura descrever principalmente a dinâmica da fase líquida e a interface entre as fases discreta e dispersante. A estes pontos, adiciona-se a evolução do processo de evaporação da partícula.

A descrição do comportamento do líquido é uma questão extremamente complicada. Há vários modelos que podem representar o comportamento interno da gota, entretanto a complexidade envolvida em cada um dos modelos, bem como o custo computacional para a simulação dos mesmos, é diversificada. Sirignano (2010) apresenta 6 modelos, os quais serão divididos em dois grupos:

- Modelos que desconsideram o movimento interno da gota:
  - Temperatura Constante
  - Condutividade Infinita
  - Aquecimento transiente da gota com simetria esférica
- Modelos que consideram o movimento interno da gota:
  - Condutividade Efetiva
  - Modelo de Vórtice de aquecimento de gotícula
  - Solução das equações de Navier-Stokes

O modelo de temperatura constante não permite a variação da temperatura. O modelo impõe que a temperatura da gota é constante e igual à de bulbo úmido ou de ebulição (Sirignano, 1984). Logo, ao realizar o balanço de energia na gota conclui-se que todo o calor transferido para a gota é consumido pelo processo de evaporação da gota. Este modelo também é

conhecido como lei do d^2, pois o decaimento do quadrado do diâmetro da gota é linear com o tempo.

O modelo de condutividade infinita permite que seja considerada a variação de temperatura da gota em função do intervalo de tempo de rastreamento da gota. Apesar do avanço em relação ao modelo de temperatura constante, a hipótese de condutividade infinita desconsidera os gradientes internos de temperatura, logo a distribuição de temperatura na gota se mantém uniforme. Esse modelo foi utilizado por Sacomano (2011) e Chrigui (2005) e apresenta-se como o melhor modelo de baixo custo computacional, uma vez que não é necessário resolver qualquer tipo de equacionamento de condução na gota.

O modelo de aquecimento transiente da gota assume que a condutividade da fase líquida é finita, porém baseia-se que não há escoamento interno à gota. Essas duas hipóteses implicam que há apenas gradientes radiais de temperatura, o que implica na distribuição radial de temperatura e simetria esférica da temperatura. Sirignano (1984) afirma que desde que a capacidade computacional esteja disponível, este modelo é o mais aconselhável, dentre os modelos citados até o momento.

O modelo de condutividade efetiva corrige o valor da condutividade do fluido de acordo com fatores de ajustes definidos experimentalmente e baseados no escoamento interno da gota (Sirignano 2010 e Sirignano, 1984). Ao apenas corrigir a condutividade térmica da fase líquida, o método numérico aplicado é semelhante ao utilizado para solução da formulação do método de aquecimento transiente da gota.

O modelo de vórtice divide a gota em dois hemisférios nos quais há um vórtice que representa o movimento interno devido às condições de contorno da interface com a fase gasosa.

A solução das equações de Navier-Stokes segue a mesma metodologia aplicada para a fase gasosa, apenas alterando as condições de contorno e o domínio de cálculo.

As formulações que procuram descrever o escoamento interno da gota e o modelo de aquecimento transiente da gota com simetria dificilmente são utilizados em escoamentos de sprays, pois aumentam consideravelmente o consumo de recursos computacionais, uma vez que são necessários métodos numéricos de alto custo computacional para resolver as equações do modelo para cada uma das gotas que compõe o spray. Já os modelos de temperatura constante e condutividade infinita são resolvidos com métodos numéricos com menor custo de processamento, o que viabiliza sua utilização em simulações de sprays com grande número de gotas.

O modelo de interface entre as fases descreve as transferências de massa e calor que ocorre entre elas. Dentre os métodos, três podem ser destacados. O primeiro modelo parte da

modelagem das equações de transporte de uma gota estacionária em um meio estacionário e expande as equações para situações em que há movimento relativo entre as fases, adicionando fatores de correção. O segundo parte do princípio de filme apresentado por Faeth (1977), Abramzon e Sirignano (1989) e Apte et al. (2009). O terceiro método, o qual será utilizado nesse trabalho, define as equações de balanço de energia e de massa. Em posse das condições de contorno das fases, são calculados os fluxos de massa e calor.

A evolução do processo de evaporação da partícula define como o modelo de interface será empregado no método numérico. Faeth (1983) define que os modelos de evaporação das gotas podem ser divididos em dois grupos: a aproximação por modelos de aquecimento transiente e a aproximação pelo modelo de dois estágios.

O método por aquecimento transiente define que toda a troca de massa entre as fases é determinada pela diferença de concentração de vapor entre a superfície da gota e a concentração na fase gasosa. Assim, há o aquecimento transiente da gota através da troca de calor entre as fases. Já o método por estágio define que a troca de massa ocorre fundamentalmente pelo aquecimento da gota. No primeiro estágio, a partícula é aquecida até atingir a temperatura de bulbo úmido do líquido à pressão ambiente e não há evaporação da fase líquida. Em um segundo estágio, ao atingir a temperatura de bulbo úmido, a temperatura da gota é fixada e a taxa de transferência de massa por evaporação é definida pelo calor transferido pela fase gasosa. Assim, a transferência de massa ocorre exclusivamente pela diferença de temperatura entre as fases e não pelo gradiente de concentração entre a fase gasosa e a superfície da fase líquida.

Faeth (1983) afirma que o método por estágios é muito mais simples de ser implementado numericamente, mas que a validade pode ser questionada. Em regiões em que a temperatura é baixa e há gradientes elevados de concentração de combustível, o processo de transferência de massa é controlado pelo gradiente de concentração do combustível. Portanto, o modelo não descreve bem essas situações, as quais correspondem a grande parte da trajetória das partículas (Faeth, 1983).

Analisando as deficiências e vantagens do modelo de dois estágios, Sacomano (2011) adaptou este modelo e considerou o processo evaporativo por gradiente de concentrações durante o aquecimento da gota até esta atingir a temperatura de ebulição, e o processo de evaporação por temperaturas após a gota atingir a temperatura de ebulição. Logo, foi definido um método hibrido entre os dois modelos.

Neste trabalho, o processo evaporativo é descrito por 3 estágios. O primeiro é o aquecimento da gota sem troca de massa entre as fases até que seja atingida a temperatura de bulbo úmido.

O segundo estágio considera a troca de massa por gradiente de concentração entre as fases e, ao mesmo tempo o processo de aquecimento da gota, até atingida a temperatura de saturação. Finalmente, o terceiro estágio é a evaporação diretamente pela diferença de temperatura entre as fases.

Primeiro, faz-se o balanço de energia sobre a gota, válido para todos os estágios

$$m_P c_P \frac{dT_P}{dt} = hA_P(T_\infty - T_P) + \frac{dm_P}{dt} h_{fg}, \tag{96}$$

na qual m_P é a massa da gota, c_P é o calor específico da fase líquida, T_P é a temperatura da gota, A_P é a área de superfície da gota, h é o coeficiente de convecção, T_∞ é a temperatura da fase gasosa e h_{fg} é a entalpia de vaporização do líquido. Essa equação já explicita que todos os fenômenos radiativos são negligenciados e apenas há troca de calor por convecção entre as fases.

Durante o estágio de simples aquecimento da gota, não há evaporação e, portanto, a equação se reduz a

$$m_P c_P \frac{dT_P}{dt} = hA_P(T_\infty - T_P), \tag{97}$$

na qual o coeficiente de convecção h é calculado pela correlação (Incropera e DeWitt, 2003)

$$Nu = \frac{h\, d_P}{k_f} = 2.0 + 0.6\, Re_e^{\frac{1}{2}}\, Pr^{\frac{1}{3}}, \tag{98}$$

onde d_P é o diâmetro da gota, k_f é a difusividade térmica da gota, Re_e é o número de Reynolds de escorregamento da gota e Pr é o número de Prandtl. Integrando a equação (97) obtém-se:

$$T_P(t + \Delta t) = T_\infty \cdot \left(1 - e^{-\frac{h\, A_P}{m_P c_P}\Delta t}\right) + T_P(t)\ \cdot e^{-\frac{h\, A_P}{m_P c_P}\Delta t} \tag{99}$$

na qual Δt é o intervalo de cálculo da fase líquida.

Esse processo de aquecimento ocorre até a temperatura atingir a temperatura de bulbo úmido da mistura gasosa. A partir desse ponto, começa a ser observado o segundo estágio, no qual há

a evaporação através da diferença de concentração entre a concentração de combustível na fase gasosa e a concentração de combustível na superfície da gota. A transferência de massa é modelada por

$$N_i = k_c\left(C_{i,s} - C_{i,\infty}\right), \tag{100}$$

na qual N_i é a taxa de transferência de massa, $C_{i.s}$ é a concentração de combustível na fase gasosa na superfície da gota, e $C_{i,\infty}$ é a concentração de combustível na fase gasosa fora da região de filme em torno da gota. O coeficiente de transferência de massa k_c da fase gasosa é obtido pela correlação

$$Sh_{AB} = \frac{k_c d_P}{D_{i,m}} = 2.0 + 0.6 Re_e^{\frac{1}{2}} Sc^{\frac{1}{3}}, \tag{101}$$

onde Sh_{AB} é o número adimensional de Sheerwood, $D_{i,m}$ é coeficiente de difusão de massa e Sc é o número de Schmidt.

Conforme mencionado anteriormente, usa-se a hipótese de estado de equilíbrio de fases na interface entre gotas e fase gasosa. Portanto, assume-se que a concentração da fase gasosa na superfície da gota é relacionada à pressão de saturação da gota por

$$C_{i,s} = \frac{p_{sat}(T_P)}{RT_P}, \tag{102}$$

na qual $p_{sat}(T_P)$ corresponde à pressão de saturação do combustível na temperatura T_P e R é a constante universal dos gases. A concentração do combustível na fase gasosa ao longe, $C_{i,\infty}$, é relacionada à pressão da fase gasosa pela equação

$$C_{i,\infty} = X_i \frac{p}{RT_\infty}, \tag{103}$$

na qual X_i é a concentração de etanol na fase gasosa e p é a pressão da fase gasosa. Baseando-se nas equações (100) a (103), pode-se deduzir a taxa de decréscimo do diâmetro da gota para esse estágio como

$$\frac{d(d_P)}{dt} = -k_c\left(\frac{p_{sat}(T_P)}{RT_P} - X_i\frac{p}{RT_\infty}\right)\frac{MW_l}{\rho_l}, \tag{104}$$

onde MW_l é a massa específica da fase líquida, ρ_l é a massa específica da fase liquida

Neste estágio, o aquecimento da gota é descrito pela equação (96), pois se verifica o resfriamento evaporativo e aquecimento por convecção. A equação é integrada numericamente e obtém-se a temperatura da gota no passo seguinte.

Finalmente, o terceiro estágio é empregado quando a temperatura de ebulição é atingida. Nesse caso, toda a transferência de massa provém da diferença de temperatura entre as fases e não há aquecimento da partícula, uma vez que a partícula é composta unicamente de etanol puro. A equação (96) é simplificada para:

$$hA_P(T_P - T_\infty) = \frac{dm_P}{dt}h_{fg} \tag{105}$$

Kuo (1986) integrou a equação acima e obteve a taxa de decréscimo do diâmetro da gota.

$$\frac{d(d_P)}{dt} = \frac{4k_\infty}{\rho_l c_{P,\infty} d_P}\left(1 + 0.23\sqrt{Re}\right)ln\left[1 + \frac{c_{P,\infty}(T_\infty - T_P)}{h_{fg}}\right] \tag{106}$$

onde $c_{p.\infty}$ é o calor específico da gota e k_∞é o coeficiente de capacidade térmica da fase gasosa.

A comparação entre as equações (104) e (106) mostra claramente as diferenças entre a aproximação por dois estágios e a aproximação por aquecimento transiente. A primeira descreve o decaimento do diâmetro da gota em função de parâmetros de transferência de massa, enquanto a segunda caracteriza o decaimento em função de variáveis de transferência de calor.

3.3.4. Número de Weber: parâmetro de avaliação da integridade das gotas

O número de Weber serve para avaliar a interface entre escoamentos multifásicos. Em sprays, é o parâmetro que permite a avaliação da implosão/quebra das gotas por ação do campo de pressões da fase gasosa, trata-se da relação entre as forças inerciais e a tensão superficial da gota:

$$We = \frac{\rho d_P |\vec{u} - \vec{u}_P|^2}{2\sigma_{ts}}, \tag{107}$$

onde σ_{ts} é a tensão superficial da gota, ρ é a massa específica da fase gasosa.

O aumento do número de Weber implica em menores forças superficiais em comparação com as forças inerciais, o que implica em maiores deformações na gota. Atingindo o valor crítico de número de Weber, a tensão superficial é baixa ao ponto de que o campo de pressões consegue alterar o formato da gota de forma que podem ser observadas quebras nas gotículas.

Em seu trabalho, Rochaya (2007) estabeleceu um valor próximo de 12 para o valor crítico do número de Weber para sprays de etanol. Esse número foi estabelecido para sprays livres, então sua validade para sprays confinados ainda não foi avaliada. Neste trabalho, esse valor será adotado como limitante.

O número de Weber permite avaliar a hipótese de que não há quebra da gota. Outra hipótese que deve ser validada pelo número de Weber é o formato aproximadamente esférico da gota. Kuo (1986) estabelece a hipótese de gotículas esféricas é válida desde que estas tenham número de Weber muito menor do que 20.

Como pode ser observado na equação (107), o número de Weber é dependente do diâmetro da partícula (d_P) e, devido ao processo evaporativo, o diâmetro da gota diminui durante seu escoamento pela fase dispersa e o número de Weber tende a diminuir.

3.3.5. Acoplamento entre as fases

O processo evaporativo das gotas já foi descrito, entretanto nada foi dito sobre o impacto deste processo na fase gasosa. A evaporação das gotas implica na transferência de quantidade de movimento, massa, fração de mistura e energia da fase líquida para fase gasosa. Matematicamente, essas transferências são introduzidas através de termos fontes nas equações da fase gasosa. Nota-se que não é observada conservação das quantidades transportadas nas fases, porém, ao analisar o sistema bifásico, observa-se a conservação das quantidades.

As equações de conservação médias, apresentadas no APÊNDICE B, têm de ser reescritas com a introdução dos termos fontes, provenientes do processo evaporativo da fase líquida. Abaixo estão reescritas as equações de transporte com a introdução dos respectivos termos fonte

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho}\widetilde{u_i})}{\partial x_i} = \bar{S}_m, \tag{108}$$

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\widetilde{u_i})}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho}\widetilde{u_i}\widetilde{u_j})}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\tau_{ij} - \bar{\rho}\widetilde{u''_i u''_j}\right) + \bar{\rho} g_i + \bar{S}_{u_i}, \tag{109}$$

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{h})}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{h}\widetilde{u_j})}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\frac{\mu_t}{\sigma_t}\frac{\partial \tilde{h}}{\partial x_j}\right) + \bar{S}_h, \tag{110}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\bar{\rho}\widetilde{u''_i u''_j}\right) + \frac{\partial}{\partial x_k}\left(\bar{\rho}\widetilde{u_k}\widetilde{u''_i u''_j}\right) = \frac{\partial}{\partial x_m}\left(\frac{\mu_t}{\sigma_k}\frac{\partial \widetilde{u''_i u''_j}}{\partial x_m}\right) - P_{ij} + \phi_{ij,1} + \phi_{ij,2} + \phi_{ij,w} - 2\bar{\rho}\varepsilon\delta_{ij} + \bar{S}_{\tau_{ij}} \tag{111}$$

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\varepsilon)}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho}\varepsilon\widetilde{u_j})}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon}\frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j}\right) + C_{1\varepsilon}\frac{\varepsilon}{k}2\mu_t\tilde{S}_{ij}\tilde{S}_{ij} - C_{2,\varepsilon}\bar{\rho}\frac{\varepsilon^2}{k} + \bar{S}_\varepsilon, \tag{112}$$

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{z})}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{z}\widetilde{u_j})}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\Gamma_z\frac{\partial \tilde{z}}{\partial x_j}\right) + \bar{S}_{\tilde{z}}, \tag{113}$$

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\widetilde{z''^2})}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho}\widetilde{z''^2}\widetilde{u_j})}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\Gamma_z\frac{\partial \widetilde{z''^2}}{\partial x_j}\right) C_g\mu_t\left(\frac{\partial \tilde{z}}{\partial x_j}\right)^2 - C_d\bar{\rho}\frac{\varepsilon}{k} + \bar{S}_{\widetilde{z''^2}}, \tag{114}$$

onde $\bar{S}_m$, $\bar{S}_{u_i}$, $\bar{S}_h$, $\bar{S}_{\tau_{ij}}$, $\bar{S}_\varepsilon$, $\bar{S}_{\tilde{z}}$, e $\bar{S}_{\widetilde{z''^2}}$ são respectivamente os termos fonte das equações de transporte de massa, quantidade de movimento transferida entre as fases dispersa e dispersante, energia, tensões de Reynolds, dissipação da energia cinética turbulenta, fração de mistura e variância de fração de mistura.

Os termos relacionados ao modelo de turbulência foram discutidos na seção 3.3.6. Estes termos modelam a perturbação do regime turbulento da fase gasosa devido à presença da fase líquida.

A principal questão a ser tratada no acoplamento interfásico é a diferença no tratamento matemático entre as fases. A fase dispersa é descrita por equações de conservação obtidas pela abordagem euleriana, enquanto a fase dispersante é caracterizada pela abordagem lagrangeana.

A abordagem lagrangeana é intrinsicamente transitória, independentemente do regime observado para a fase gasosa. Através da utilização do método de integração de Monte Carlo (Collins, 2003), é possível calcular as propriedades do spray sem que todas as gotas sejam simuladas, apenas uma parcela representativa do total de partículas é simulada. O método de

Monte Carlo permite que, a partir de um determinado número de amostras aleatórias, seja determinada a função de probabilidade da variável estudada, no caso as características do spray.

Utilizando o método de Monte Carlo, os termos fontes podem ser representados através da média de conjunto de todas as partículas dentro do volume de controle. De acordo com Jones et al (2010), os termos fontes podem ser descritos por

$$S = \frac{1}{\Delta V}\sum_{\alpha=1}^{n} S^{\alpha} \ , \tag{115}$$

na qual ΔV corresponde ao volume do elemento do domínio de cálculo, n é o número de partículas dentro do elemento e S^{α} é o termo fonte associado a cada uma das partículas.

A fase gasosa, no caso estudado, é considerada em regime estatisticamente estacionário. Entretanto, para a fase líquida, são calculadas as variações, por exemplo, de massa. De alguma forma, tem de ser introduzido um intervalo de tempo para que essas variações sejam transformadas nas taxas observadas na fase gasosa. Neste trabalho, utilizou-se a relação:

$$\frac{\dot{m}_{p,0}}{m_{p,0}} = \frac{1}{\Delta t_P}, \tag{116}$$

onde $\dot{m}_{p,0}$ é a vazão mássica da partícula, $m_{p,0}$ é a massa inicial da partícula e Δt_P é um intervalo de tempo característico.

O emprego dessa relação possibilita que o caráter transitório da abordagem lagrangeana não influencie a modelagem da fase gasosa em regime estatisticamente estacionário.

Fundamentando-se nas equações (115) e (116), são descritos os termos fontes

$$\bar{S}_m = \frac{1}{\Delta V}\sum_{\alpha=1}^{n}\left(-\frac{\Delta m_P}{m_{p,0}}\dot{m}_{p,0}\right)_n \ , \tag{117}$$

$$S_{u_i} = \frac{1}{\Delta V}\sum_{\alpha=1}^{n}\left[\left(-\frac{18\mu C_D Re_e}{\rho_P d_P^2 24}\left(u_{P_i} - u_i\right) - g_i\frac{(\rho_l-\rho)}{\rho_l}\right)m_P\right]_n + \sum_{\alpha=1}^{n}\overline{S_m\left(u_{P_i}\right)_n}, \tag{118}$$

$$S_h = \frac{1}{\Delta V}\sum_{\alpha=1}^{n}\left[\left(\Delta m_P h_{fl} - \Delta m_P h_{fg} - m_P\int_{T_{ref}}^{T_{ps}} c_p dT + (m_P + \Delta m_P)\int_{T_{ref}}^{T_{pe}} c_p dT\right)\frac{\dot{m}_{p,0}}{m_{p,0}}\right]_n, \tag{119}$$

$$\overline{S_z} = \frac{s}{s+Y_{Ox,0}}\overline{S_m}, \tag{120}$$

$$\overline{S_{z''^2}} = \frac{\widetilde{z''^2}(1-2\tilde{z})}{\tilde{z}}\overline{S_z}, \tag{121}$$

onde Δm_P é a varação de massa da partícula ao passar pelo elemento do domínio de cálculo, u_{P_i} é a velocidade da partícula na direção i, T_{ps} é a temperatura da partícula ao sair do volume de controle, T_{pe} é a temperatura da partícula ao entrar no volume de controle, h_{fl} é a entalpia de formação da espécie e h_{fg} é a entalpia de vaporização da fase líquida.

Em uma primeira análise, o termo fonte aparece ser negativo, entretanto a variação de massa da partícula é negativa. Portanto, o termo fonte da continuidade é positivo, o que era esperado, pois é considerada apenas a evaporação da gota.

O termo fonte da quantidade de movimento tem duas parcelas diferentes. A primeira está relacionada às forças observadas na interface entre as fases e a segunda corresponde ao aumento da quantidade de movimento devido à transferência de massa do processo evaporativo.

O primeiro termo da equação (119) corresponde à transferência de entalpia de formação da fase líquida para a fase gasosa. O segundo termo corresponde à transferência de energia para a fase líquida devido ao processo evaporativo. Os demais termos descrevem o aquecimento da fase líquida por retirada de calor da fase gasosa.

3.3.6. Descrição do acoplamento da turbulência

A presença da fase dispersa altera o escoamento da fase dispersante, em especial afeta o regime turbulento desta. Há alterações no campo de deformações (gradientes de velocidade), devido às tensões viscosas que surgem pelo escorregamento entre partícula e fase gasosa. Tais alterações afetam as linhas de corrente do escoamento.

Outro impacto é o amortecimento do escoamento como consequência da força de arrasto sobre a gota, que, além deste amortecimento, causa alteração nas estruturas turbulentas criadas na parte posterior da gota, intensificando a produção da energia cinética turbulenta e a taxa de dissipação desta energia.

Os efeitos supracitados são apenas alguns dos efeitos que a presença das gotas causa no escoamento da fase dispersa do ponto de vista da turbulência. Outros efeitos são descritos em Sirignano (2010), Faeth (1987) e Faeth (1983).

Neste trabalho, foi utilizado o acoplamento em dois sentidos. Os efeitos do acoplamento sobre o regime turbulento da fase gasosa são considerados através da modulação da turbulência.

A modulação da turbulência é feita através da introdução de termos fontes nas equações de transporte das tensões de Reynolds e da taxa de dissipação da energia cinética turbulenta. Apesar da simples introdução como um termo fonte, a modulação turbulenta modela fenômenos complexos e uma modulação universal ainda está longe de ser obtido, o que pode ser observado pelo trabalho de Crowe (2000).

Ao analisar a equação (93), conclui-se que a trajetória da partícula é descrita em função da velocidade instantânea. Entretanto, os modelos RANS só calculam os valores médios das variáveis do escoamento. O acoplamento em um único sentido desconsidera a flutuação e utiliza a velocidade média da fase gasosa para descrever a trajetória da partícula. O acoplamento em dois sentidos, utilizado neste trabalho, utiliza modelos de dispersão turbulenta para considerar o efeito das flutuações turbulentas nas trajetórias das partículas. A dispersão turbulenta define um modelo estocástico para descrever a flutuação turbulenta das velocidades da fase gasosa e obter a velocidade instantânea da fase gasosa. Desta forma, há o acoplamento da turbulência da fase gasosa sobre a fase líquida.

3.3.6.1. Dispersão turbulenta

Conforme citado anteriormente, os modelos que utilizam a média temporal (RANS) para descrever os escoamentos turbulentos perdem parte da informação, pois há a supressão das flutuações das variáveis. A descrição matemática da fase dispersa depende da velocidade da fase dispersante, o que pode ser observado pelas equações (93), (96) e (100). Portanto, é necessário o conhecimento da velocidade instantânea da fase gasosa.

A dispersão turbulenta modela a dispersão das gotas dentro do domínio devido ao caráter aleatório da turbulência, atuando basicamente na reconstrução da informação da velocidade instantânea da fase gasosa. O embasamento teórico é de que as gotas interagem com sucessivos turbilhões durante sua trajetória dentro do domínio de cálculo, sendo que cada turbilhão contribui para a descrição da trajetória.

Conforme descrito na seção 2.3, existem alguns métodos de formulação para a dispersão turbulenta. O *Deterministic Separated Flow Model* (DSF) considera nula a ação da flutuação

turbulenta, utilizando diretamente o campo de velocidades do escoamento médio. O termo determinístico é utilizado, pois as trajetórias das gotas são definidas apenas pelas condições iniciais e valores médios das variáveis do escoamento da fase dispersante. O método SSF já é um modelo mais sofisticado em que as flutuações são calculadas a partir de um método estocástico, para simular o caráter aleatório da influência dos vários turbilhões presentes no escoamento da fase dispersante sobre a fase dispersa. Vários modelos SSF podem ser utilizados, dentre os quais se se destacam o *Discrete Random Walk* (DRW), *Particle Cloud Tracking* (Baxter e Smith, 1993) e o Método do Tempo Integral (Daly e Harlow, 1970).

Neste trabalho, foi utilizado o DRW para descrever a dispersão turbulenta. O modelo DRW considera que as partículas interagem com uma sucessão de turbilhões. Desta forma, não é considerada a interação com vários turbilhões de diversas escalas de comprimento simultaneamente, mas sim com um único turbilhão por vez.

As propriedades dentro dos turbilhões são consideradas constantes, entretanto variam de um turbilhão para outro. Ao assumir que as propriedades são constantes, define-se que a flutuação turbulenta é constante durante o intervalo de interação entre a partícula e turbilhão.

O modelo DRW define que partícula e turbilhão interagem por um determinado intervalo de tempo, sendo este o menor entre o intervalo de travessia da gota (t_{cross}) e o tempo de vida característico dos turbilhões (τ_e). A partícula interage com o turbilhão até atravessá-lo ou até que este turbilhão seja extinto. Ao término da interação, a partícula inicia uma nova interação com outro turbilhão com características diferentes do anterior, caracterizando a interação com sucessivos turbilhões até que a partícula evapore ou saia do domínio de cálculo.

O intervalo de travessia da gota (t_{cross}) e o tempo de vida característico dos turbilhões (τ_e) são dados, respectivamente, por:

$$t_{cross} = -\tau_P \, ln\left[1 - \left(\frac{L_e}{\tau_P|u-u_P|}\right)\right] \tag{122}$$

$$\tau_e = -0.3\frac{k}{\varepsilon} \, ln\,(r) \tag{123}$$

em que L_e é o tamanho característico de um turbilhão dado por

$$L_e = C_\mu^{3/4}\frac{k^{3/2}}{\varepsilon}, \tag{124}$$

τ_P é escala de tempo de relaxação das partículas, apresentado na equação (88) e r é uma variável aleatória entre 0 e 1.

Determinado o intervalo de interação, podem ser calculadas as flutuações das velocidades da fase gasosa através das equações:

$$u_i' = \varsigma_{u_i}\sqrt{\overline{u_i'^2}} \tag{125}$$

onde ς_{u_i} é uma variável aleatória que obedece a uma distribuição Gaussiana.

Essas flutuações são somadas as velocidades médias das gotas e, portanto, define-se a velocidade instantânea da partícula. A dispersão turbulenta permite que as partículas modeladas experimentem trajetórias aleatórias e, portanto, cada partícula emitida do mesmo ponto em instantes diferentes tem trajetórias diferentes. Desta forma, a aleatoriedade da turbulência do regime da fase gasosa é considerada na dispersão das partículas no domínio.

Além disso, as flutuações turbulentas calculadas são utilizadas no cálculo dos termos fonte das equações descritas na seção 3.3.6.2.

3.3.6.2. Modulação da turbulência

A modelagem da modulação turbulenta é realizada através da introdução de termos fontes nas equações de transporte das tensões de Reynolds e da dissipação da energia cinética turbulenta (ε). As equações (126) e (127) apresentam os modelos utilizados para a modulação da turbulência,

$$\overline{S_{\tau_{ij}}} = \overline{u_j S_{u_i p}} + \overline{u_i S_{u_j p}} - \overline{u_j}\,\overline{S_{u_i p}} - \overline{u_i}\,\overline{S_{u_j p}} \tag{126}$$

$$\bar{S}_\varepsilon = C_{3\varepsilon}\frac{\varepsilon}{k}\bar{S}_{\tau_{ii}}, \tag{127}$$

na qual $\bar{S}_{\tau_{ii}}$ é a soma dos termos fontes das tensões principais do tensor de Reynolds.

A constante $C_{3,\varepsilon}$ é uma definida como constante de ajuste para lidar com as incertezas do modelo. Esta constante deve ser definida por dados experimentais, porém Sacomano (2011) aconselha a alteração do valor dessa constante para garantir boa aderência entre resultados numéricos e dados experimentais.

A modelagem da modulação das tensões de Reynolds provém diretamente da dedução da equação de transporte das tensões de Reynolds. Os dois primeiros da equação (126) provêm da operação de média aplicada à equação de quantidade de movimento instantânea multiplicada pela velocidade instantânea. Modelando a dispersão turbulenta, é possível calcular diretamente os dois primeiros termos da equação e obter sua média. Já os dois últimos termos dessa equação são provenientes da subtração da equação de transporte da energia cinética média da equação da quantidade de movimento instantânea multiplicada pela velocidade. Esses termos podem ser calculados diretamente dos valores médios obtidos pela modelagem da fase gasosa.

4. Resultados e discussão

Os resultados das simulações numéricas serão discutidos nessa seção da dissertação. A seção será dividida em duas subseções principais.

A primeira aborda o escoamento isotérmico (ou em inglês, *cold flow*), no qual há apenas o escoamento da fase dispersante. O objetivo do escoamento isotérmico é avaliar a representatividade do modelo de turbulência e sua precisão em descrever as propriedades do escoamento. Além de validar o modelo de turbulência, são avaliados os modelos numéricos aplicados, principalmente os métodos de discretização dos termos convectivos. A validação é feita através da comparação dos resultados numéricos com os resultados obtidos por Fukumasu et al (2013) no LETE Laboratório de Engenharia Térmica e Ambiental. No caso, serão consideradas aceitáveis diferenças de até 10% entre os dados experimentais e os resultados numéricos.

A segunda parte discute os resultados da simulação numérica para o escoamento reativo. Os resultados da fase líquida serão comparados com resultados experimentais. O modelo de combustão será discutido de forma qualitativa, pois não há dados experimentais disponíveis da temperatura e das espécies químicas do escoamento.

Em suma, a avaliação de chamas turbulentas de spray de etanol foi feita por dois processos, sendo que o primeiro avalia exclusivamente o modelo de turbulência e o segundo permite discutir a interação entre os vários modelos utilizados.

4.1. Escoamento isotérmico

A avaliação do escoamento isotérmico objetiva a validação do modelo numérico desenvolvido para a fase gasosa. Este escoamento é caracterizado por apresentar apenas o escoamento inerte do oxidante com as mesmas condições de contorno do escoamento reativo. Desta forma, é possível avaliar os modelos aplicados sem a interferência da fase líquida e da combustão sobre o regime turbulento da fase gasosa.

A validação será feita em duas etapas diferentes. Na primeira etapa, as simulações foram feitas caracterizando todo o domínio, o qual é apresentado na seção 4.1.1. Primeiro, foi realizado um estudo de convergência de malha, no qual é verificada a influência da malha é isolada dos demais resultados. Em seguida, é feita a validação dos resultados numéricos através da comparação com dados experimentais obtidos pelo método PIV. O erro do PIV foi estimado em 10% e, portanto, essa métrica será utilizada para avaliação e validação do

modelo numérico. Dentro desta etapa, foram desenvolvidas simulações para avaliar o impacto dos diferentes métodos de discretização e do parâmetro $C_{2,\varepsilon}$ do modelo de turbulência, mais especificamente da equação da taxa de dissipação da energia cinética turbulenta.

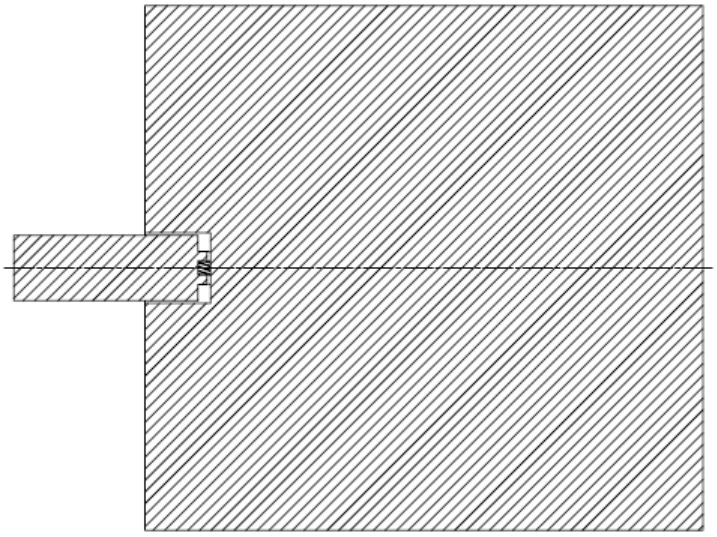
Em uma segunda etapa, as simulações foram desenvolvidas com um domínio simplificado, no qual apenas o escoamento após a seção de descarga do *swirler* é descrito. Esta simulação é possível através da imposição da distribuição de velocidades a jusante do *swirler*, obtida a partir dos dados experimentais obtidos pelo método PIV. Assim como para a primeira etapa, foram avaliados a independência de malha e o impacto dos diferentes métodos de discretização sobre os resultados. Não foi feita a avaliação da turbulência, uma vez que, na primeira etapa, já havia sido comprovado que o efeito sobre os resultados não eram significativos.

4.1.1. Domínio de cálculo

O domínio de cálculo é apresentado na Figura 8. O problema estudado é caracterizado como uma chama aberta, sendo que o escoamento da fase gasosa é helicoidal (*swirling flow*). O escoamento da fase gasosa é orientado pela presença de um *swirler* no meio do domínio de cálculo, enquanto o escoamento do ar é forçado por um ventilador que está a montante do tubo representado no domínio.

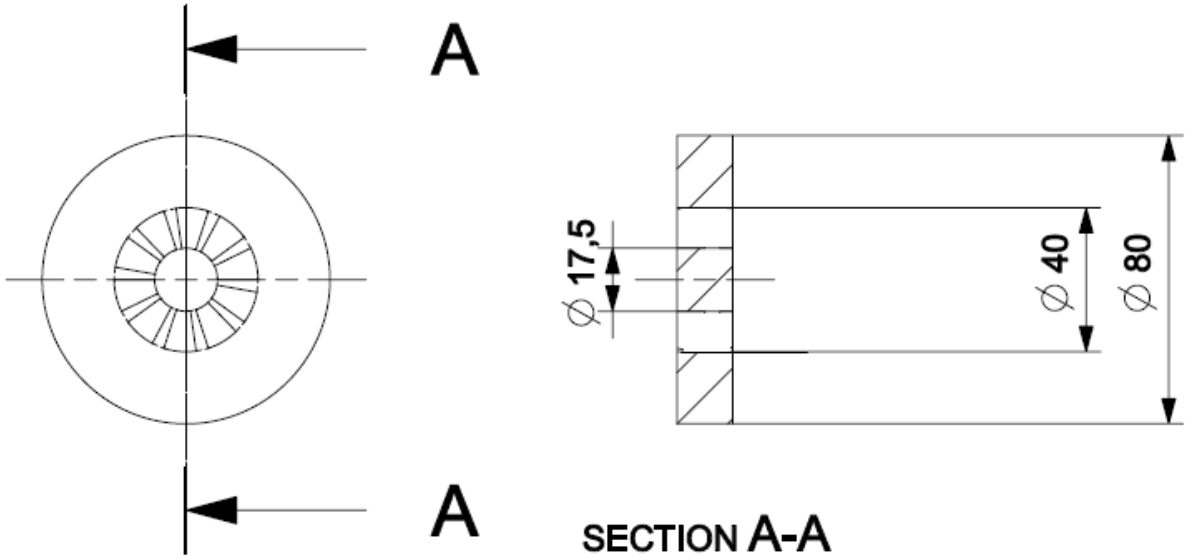
O domínio pode ser separado em três regiões diferentes: a região do *swirler*, a região a montante e a jusante do mesmo.

Figura 8 – Domínio de cálculo



O *swirler*, destacado na Figura 9, possui 10 palhetas, as quais possuem um ângulo médio de 45°, e a área de escoamento tem diâmetro externo de 40 mm e interno de 17,5 mm. Este componente direciona o escoamento e define as características helicoidais do escoamento. O projeto do *swirler* tem influência direta no desenvolvimento da chama. A presença de corpos rombudos e *swirlers* são responsáveis pela estabilização da chama. No caso de sprays, as características do escoamento helicoidal intensificam a evaporação das gotas e ajudam na formação da mistura entre combustível e comburente.

Figura 9 – *Swirler* desenvolvido para a configuração experimental



A região a montante do *swirler*, Figura 10, apresenta a parte interna do tubo pelo qual o escoamento da fase gasosa é forçado. Este tubo tem diâmetro de 80 mm e representa a região de menor interesse do estudo, uma vez que o objetivo é avaliar o fluxo direcionado pelo *swirler* e o escoamento reativo subsequente. Porém, a descrição correta dessa região é importante para descrever corretamente o regime turbulento. Adotou-se que um comprimento de 240 mm (o equivalente a 3 diâmetros do tubo) seria suficiente para que o escoamento estivesse completamente desenvolvido na face de admissão do *swirler*.

A região a jusante do *swirler* é a de maior interesse, pois é a região em que a chama está localizada. Visando à descrição de um escoamento livre, essa região do escoamento foi caracterizada no domínio por uma região cilíndrica com altura de 680 mm e diâmetro de 640 mm e uma região anelar de diâmetro interno de 86 mm e externo de 640 mm, com altura de 80 mm. Essa região está representada na Figura 11.

Figura 10 – Desenho da parte interna do tubo da configuração experimental

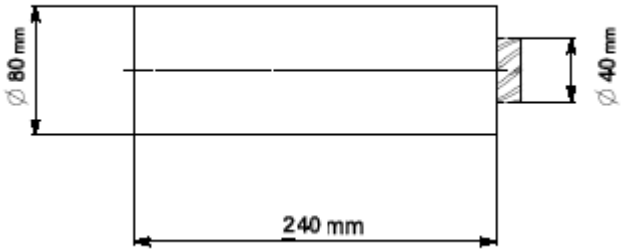
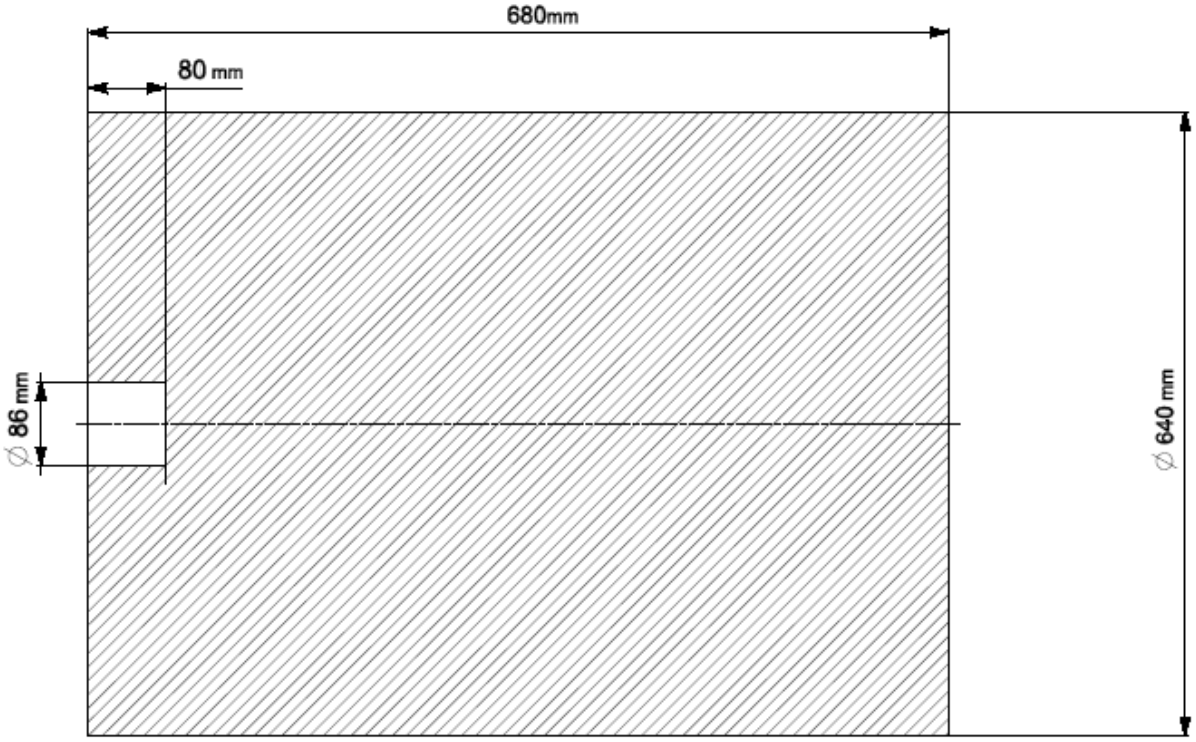


Figura 11 – Região localizada a jusante da seção de descarga do *swirler*



Na segunda etapa, apenas a região localizada a jusante do *swirler* foi discretizada. Desta forma, tanto a região do *swirler* quanto a região do tubo a montante do tubo não foram simuladas, isolando possíveis erros introduzidos pela modelagem do escoamento no tubo e no *swirler*.

4.1.1.1. Malhas de cálculo

Para o presente estudo foram desenvolvidas cinco malhas com diferentes graus de refinamento, 3 malhas nas quais há a representação do *swirler* e 2 em que apenas a região a jusante é representada. Todas as malhas são tridimensionais e estruturadas. Porém, devido à

característica da configuração experimental, utilizou-se a técnica *O-grid*, disponível no software ANSYS ICEM CFD®, para desenvolver uma malha que se adequasse a geometrias circulares/cilíndricas.

Os tamanhos de cada malha, em número de elementos, estão dispostos na Tabela 1. O número crescente de elementos indica a diminuição da dimensão dos elementos da malha.

Tabela 1 – Características das malhas

Malha	**Número de elementos**	**Representação do *Swirler***
1	1 milhão de elementos	Sim
2	3 milhões de elementos	
3	4 milhões de elementos	
4	1 milhão de elementos	Não
5	6 milhões de elementos	

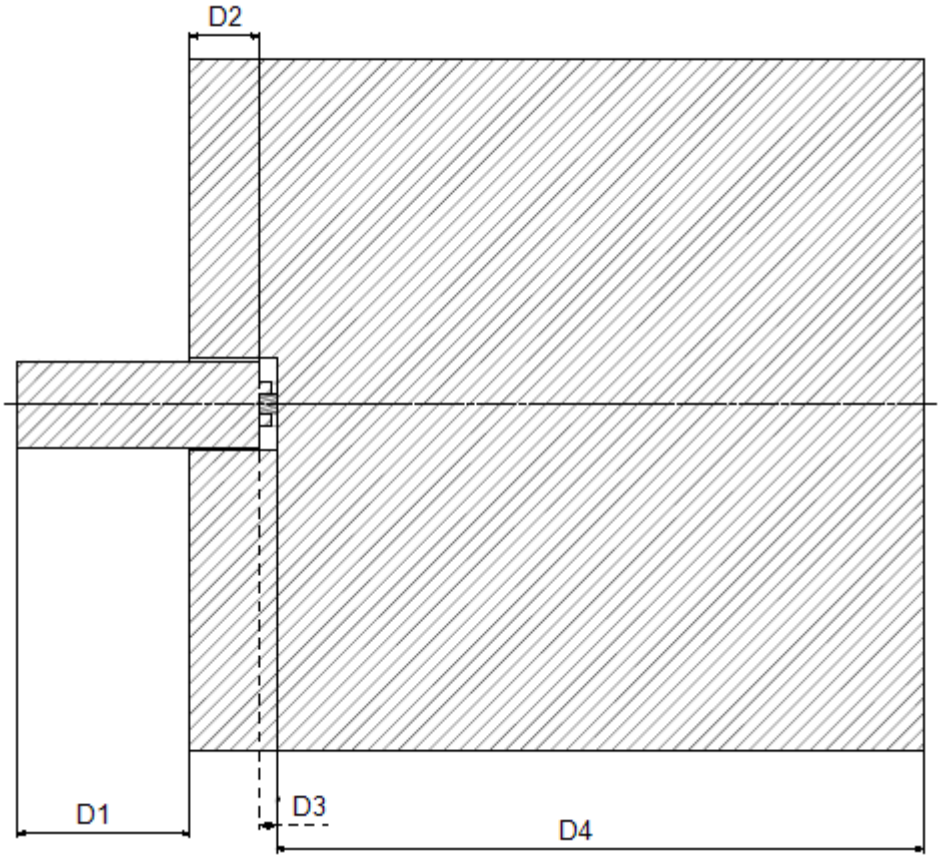
Primeiro, serão apresentadas as malhas desenvolvidas com o *swirler* e em seguida as malhas com domínio simplificado.

A Figura 12 apresenta as cotas D1, D2, D3 e D4 que serviram de base para o desenvolvimento da divisão do domínio na direção axial para as malhas 1, 2 e 3. As características da discretização dessas dimensões são apresentadas na Tabela 2, a qual descreve o número de nós de cada aresta, os tamanhos do último e primeiro elemento bem como a taxa de aumento a partir desses elementos. Observa-se que as taxas de crescimento foram todas iguais a 1, não havendo gradientes nas dimensões dos elementos dentro de cada dimensão.

Tabela 2 – Características axiais das malhas 1, 2 e 3

Dimensão	Malha	Número de Nós	Tamanho do Primeiro Elemento	Taxa de Crescimento	Tamanho do Último elemento	Taxa de Crescimento
D1 (160mm)	1	31	5,33	1	5,33	1
	2	54	3,02	1	3,02	1
	3	54	3,02	1	3,02	1
D2 (64,5mm)	1	22	3,07	1	3,07	1
	2	33	2,02	1	2,02	1
	3	33	2,02	1	2,02	1
D3 (16,5mm)	1	6	3,10	1	3,10	1
	2	9	1,94	1	1,94	1
	3	9	1,94	1	1,94	1
D4 (600mm)	1	201	3,00	1	3,00	1
	2	301	2,00	1	2,00	1
	3	301	2,00	1	2,00	1

Figura 12 – Cotas para desenvolvimento das malhas na direção axial



A discretização na direção tangencial foi uniforme. Desta maneira, todos os elementos estão com distância angular igual. A distância angular de cada uma das malhas está representada na Tabela 3.

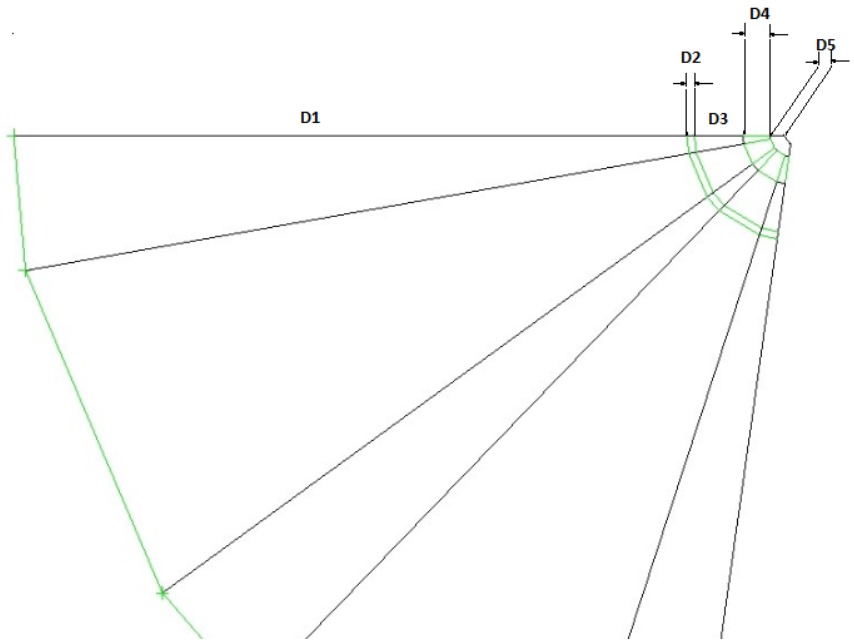
Tabela 3 – Características tangenciais das malhas 1, 2 e 3

Malha	Distância Angular
1	3,6
2	2,77
3	2,25

A discretização na direção radial é dada pelas cotas apresentadas na Figura 13. Assim como feito para a direção axial, a Tabela 4 apresenta as características de discretização de cada uma das cotas.

A Tabela 4 mostra que há um maior refinamento na região central das malhas. Esse aumento na densidade de elemento próximo a região central foi feito com o objetivo de representar melhor a região próxima ao spray e melhorar a descrição do escoamento isotérmico nesse local, uma vez que são observados os maiores gradientes de velocidade.

Figura 13 – Cotas para desenvolvimento das malhas na direção radial

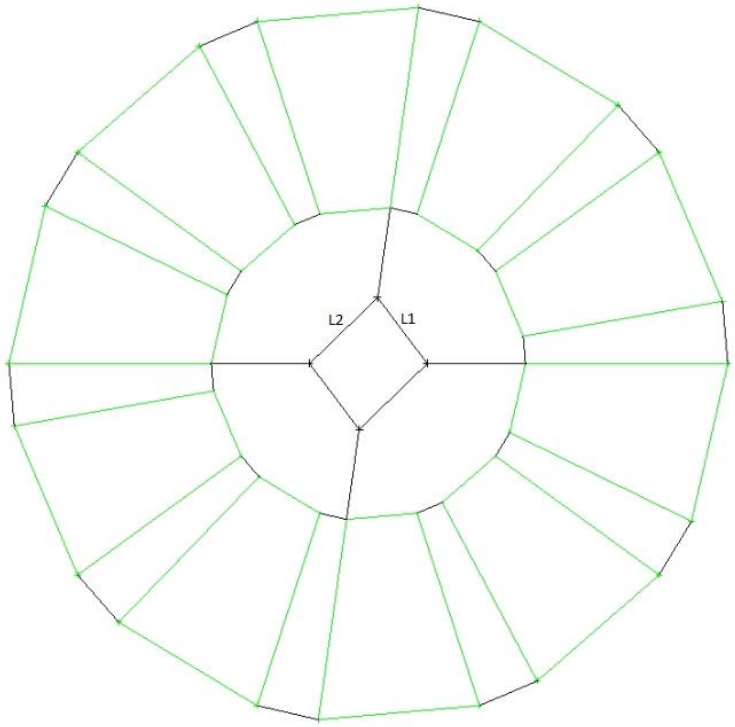


O método O-grid, disponível no Software ANSYS ICEM CFD®, permite desenvolver malhas hexaédricas em geometrias de formato cilíndrico e esféricos. Entretanto, há a necessidade de fazer um núcleo formado por elementos quadrados. A Figura 14 apresenta o núcleo e suas cotas L1 e L2, cujos parâmetros de discretização estão apresentados na Tabela 5.

Tabela 4 – Características radiais das malhas 1, 2 e 3

Cota	Malha	Número de Elementos	Tamanho do Primeiro Elemento	Taxa de Crescimento	Tamanho do Último elemento	Taxa de Crescimento
D1 (277mm)	1	31	9,23	1	9,23	1
	2	31	9,23	1	9,23	1
	3	34	8,39	1	8,39	1
D2 (3mm)	1	2	3,00	1	3,00	1
	2	2	3,00	1	3,00	1
	3	3	1,50	1	1,50	1
D3 (20mm)	1	9	2,50	1	2,50	1
	2	16	1,33	1	1,33	1
	3	18	1,18	1	1,18	1
D4 (7mm)	1	7	1,88	1	1,88	1
	2	13	0,94	1	0,94	1
	3	15	0,80	1	0,80	1
D5 (5,5mm)	1	5	1,37	1	1,37	1
	2	12	0,46	1	0,46	1
	3	14	0,42	1	0,42	1

Figura 14 – Núcleo hexaédrico das malhas 1, 2 e 3



O *swirler* é o principal componente do sistema para o escoamento isotérmico. Portanto, a discretização do *swirler* tem de ser destacada. Um bloco representativo das passagens do *swirler* está representado na Figura 15. Nesta figura também estão representadas as dimensões características do *swirler*, denominadas S1, S2, S3 e S4. As propriedades da discretização dessas dimensões estão apresentadas na Tabela 6.

Tabela 5 – Características do núcleo das malhas 1, 2 e 3

Cota	Malha	Número de Elementos	Tamanho do Primeiro Elemento	Taxa de Crescimento	Tamanho do Último elemento	Taxa de Crescimento
L1 (4,6mm)	1	19	0,26	1	0,26	1
	2	26	0,18	1	0,18	1
	3	33	0,14	1	0,14	1
L2 (5,3mm)	1	23	0,24	1	0,24	1
	2	31	0,18	1	0,18	1
	3	39	0,14	1	0,14	1

As dimensões S1 e S2, ambas na direção tangencial, tem a mesma distância angular apresentada na Tabela 3, mantendo a uniformidade da discretização nessa direção. Os parâmetros de discretização S3 são os mesmos da cota radial D4. O número de nós de S4 é o mesmo da distância D3 na direção axial, porém o tamanho dos elementos não é mesmo, consequência da geometria do *swirler*.

Figura 15 – Bloco hexaédrico de uma das passagens do *swirler*

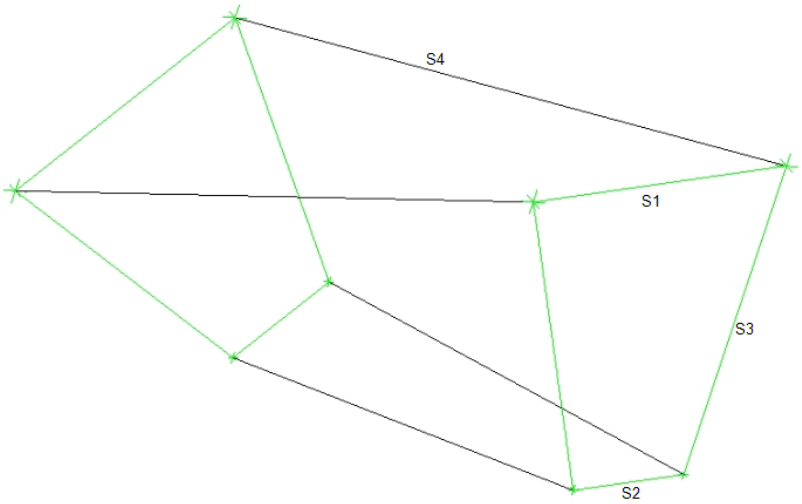


Tabela 6 – Características do *swirler* das malhas 1, 2 e 3

Cota	Malha	Número de Elementos	Tamanho do Primeiro Elemento	Taxa de Crescimento	Tamanho do Último elemento	Taxa de Crescimento
S1 (9,1mm)	1	7	1,51	1	1,51	1
	2	9	1,13	1	1,13	1
	3	11	0,91	1	0,91	1
S2 (4mm)	1	7	0,66	1	0,66	1
	2	9	0,50	1	0,50	1
	3	11	0,40	1	0,40	1
S3 (11,25mm)	1	7	1,88	1	1,88	1
	2	13	0,94	1	0,94	1
	3	15	0,80	1	0,80	1
S4 (19,8mm)	1	6	3,97	1	3,97	1
	2	9	2,48	1	2,48	1
	3	9	2,48	1	2,48	1

O desenvolvimento das malhas 4 e 5 se baseou na metodologia de blocos *O-grid*, assim como as malhas 1, 2 e 3. Entretanto, a simplificação do domínio diminuiu o número de cotas a serem definidas para a definição da malha.

No caso do domínio sem o *swirler*, as dimensões discretizadas estão representadas nas Figuras 16 e 17.

Os parâmetros da discretização estão apresentados na Tabela 7. Observa-se que, no caso, há a utilização de taxas de crescimento na direção axial. Essas taxas foram impostas com o objetivo de caracterizar melhor o escoamento próximo à seção de descarga do *swirler*. Assim como desenvolvido para as malhas 1, 2 e 3, a discretização na direção tangencial é uniforme e os ângulos de cada elemento para as malhas 4 e 5 são, respectivamente, 5° e 3,16°.

Figura 16 – Cotas utilizadas para discretização na direção axial

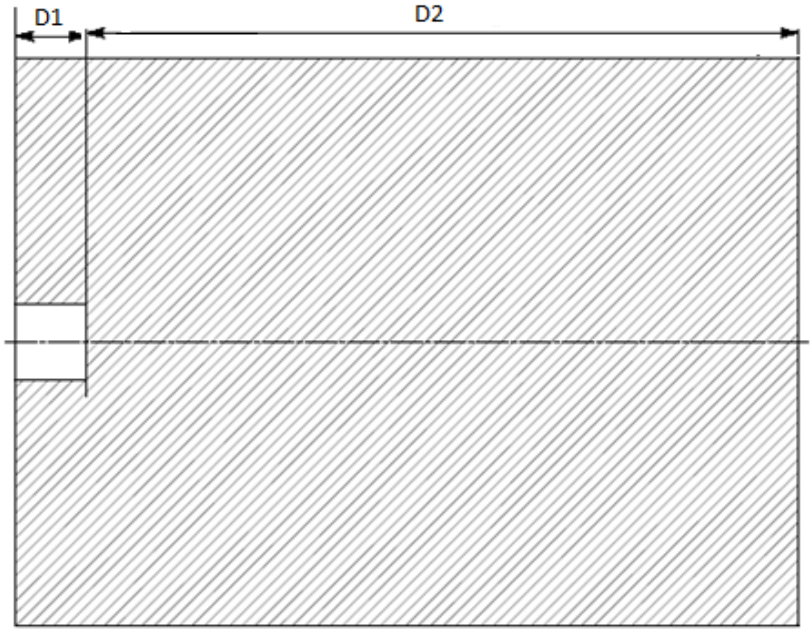
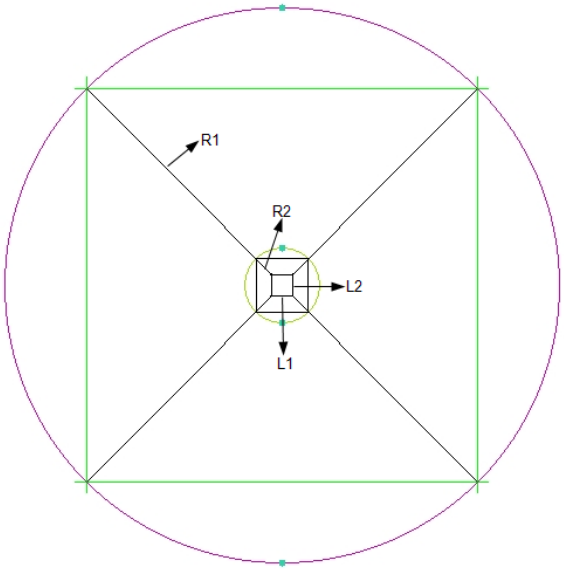


Figura 17 – Cotas utilizadas para discretização na direção radial e no núcleo hexaédrico



Conforme será apresentado na seção 4.1.3.1, as malhas serão utilizadas para avaliar o impacto do tamanho da discretização espacial sobre os resultados numéricos do escoamento isotérmico.

As avaliações de difusividade numérica foram feitas utilizando as malhas 3 e 5 exatamente por serem as mais refinadas e, portanto, diminuírem o erro de aproximação dos métodos numéricos. Já a avaliação do modelo de turbulência foi feita utilizando apenas a malha 3, pois os resultados com o domínio completo foram suficientes para chegar a uma conclusão sobre o impacto da variação dessa constante.

Tabela 7 – Características das malhas sem *swirler*

Cota	Malha	Número de Elementos	Tamanho do Primeiro Elemento	Taxa de Crescimento	Tamanho do Último elemento	Taxa de Crescimento
D1	4	24	4,90	1	0,50	1,25
(80mm)	5	41	2,20	1	0,50	1,25
D2	4	197	0,25	1,05	5,00	1
(600mm)	5	351	0,25	1,05	2,49	1
R1	4	60	4,69	1	4,69	1
(277mm)	5	107	2,61	1	2,61	1
R2	4	13	2,13	1	2,13	1
(25,6mm)	5	21	1,28	1	1,28	1
L1	4	17	1,51	1	1,51	1
(24,1mm)	5	28	0,89	1	0,89	1
L2	4	19	1,39	1	1,39	1
(25mm)	5	29	0,90	1	0,90	1

A simulação do escoamento reativo foi realizada utilizando a malha 1, pois o uso desta malha diminuiu o tempo de processamento sem prejudicar a qualidade dos resultados da fase gasosa, conforme foi comprovado pelo estudo de independência de malha.

4.1.2. Condições de contorno

4.1.2.1. Condições de contorno para simulações com representação do *swirler*

As condições de contorno a montante do *swirler* estão dispostas na Tabela 8. Observa-se que foi imposta a vazão mássica do ar na seção de admissão, como condição de contorno de entrada. Esta vazão é transformada em condições de contorno de velocidade do tipo de Dirichlet, impondo o valor na face do elemento. A determinação do valor da vazão foi feita através de um medidor de vazão colocado a montante do *swirler* e suficientemente distante para não afetar o escoamento na entrada do *swirler*, permitindo a hipótese de escoamento plenamente desenvolvido.

Tabela 8 – Condições de Contorno de Admissão

Condições de Contorno	
Vazão Mássica (kg/s)	6,059 e-03
Intensidade Turbulenta (%)	10
Diâmetro Hidráulico (mm)	40

A falta de informações sobre o regime turbulento nas condições de contorno resultou na hipótese de que este pode ser caracterizado pela intensidade turbulenta e por uma escala de comprimento característica do problema. No caso, foi adotado que a intensidade turbulenta era 10% e a escala de comprimento do escoamento 40 mm para todas as condições de contorno. A partir da determinação dessas condições de contorno, foram calculadas as condições de contorno da energia cinética turbulenta e para a taxa de dissipação da energia cinética turbulenta, dadas por (Versteeg e Malalasekera, 2007)

$$k = \frac{3}{2}(U_0 T_i)^2 \tag{128}$$

e

$$\varepsilon = C_\mu^{3/4} \frac{k^{3/2}}{0{,}07\, D_H}, \tag{129}$$

onde U_0 é a velocidade perpendicular à face e T_i é a intensidade turbulenta, D_H é o diâmetro hidráulico e C_μ é a constante introduzida pela hipótese de Boussinesq.

As condições de contorno para as tensões de Reynolds do RSM são obtidas através da determinação da energia cinética turbulenta, a partir das equações:

$$\widetilde{u'_i u'_j} = 0 \quad para \quad i \neq j \tag{130}$$

$$\widetilde{u'^2_i} = \frac{2}{3}k \tag{131}$$

As condições de contorno de parede seguiram o tratamento matemático apresentado na seção 3.1. Este tratamento é o padrão disponibilizado no software ANSYS FLUENT®. Este modelo adota que o primeiro elemento da malha pode ser calculado pela equação da subcamada viscosa ou pela equação da camada logarítmica, dependendo do regime turbulento.

As demais condições de contorno (leia-se as condições de contorno da região aberta do domínio) foram do tipo de Dirichlet, prescrevendo pressão relativa nula nas faces. Essas condições de contorno foram prescritas no software ANSYS FLUENT® como "*pressure outlet*" caracterizando uma seção de saída. Entretanto, foram impostos valores de intensidade turbulenta e escala de comprimento característico, para que, nos elementos em que fosse

verificada recirculação, pudessem ser calculadas as condições turbulentas do fluido admitido no domínio. As condições de contorno de pressão estão discriminadas na Tabela 9.

Tabela 9 – Condições de contorno de pressão

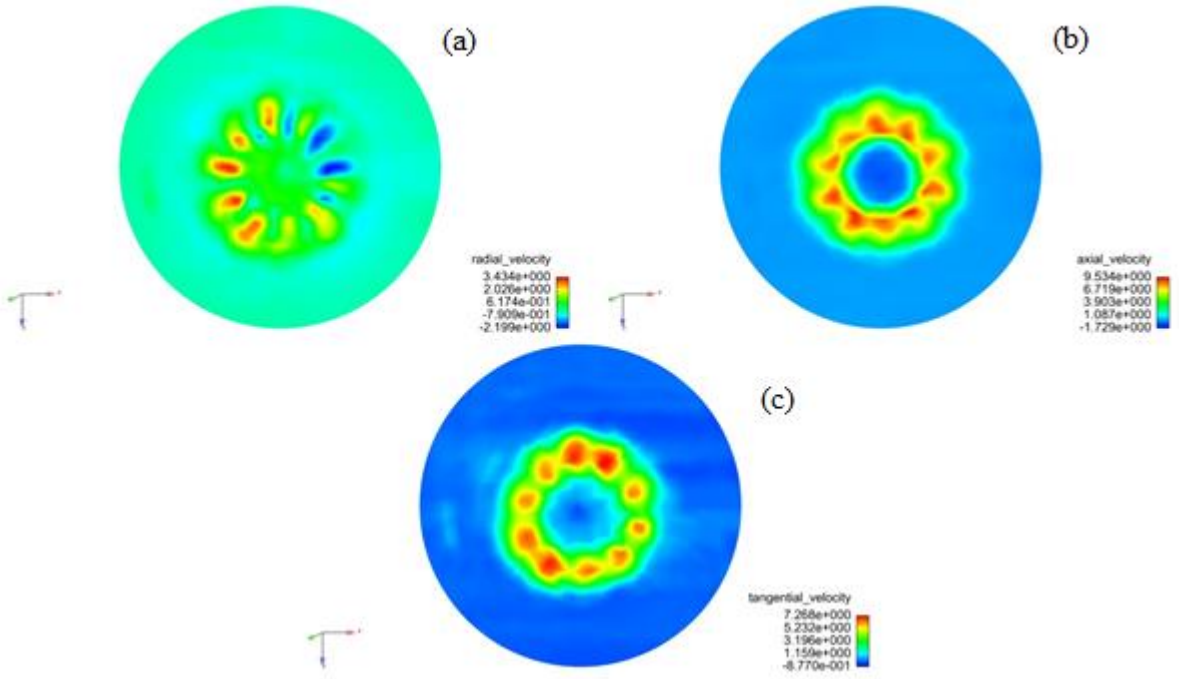
Condições de Contorno	
Pressão relativa (Pa)	0
Intensidade Turbulenta (%)	10
Diâmetro Hidráulico (mm)	40

4.1.2.2. Condições de Contorno para simulações sem representação do *swirler*

Ao retirar o s*wirler* do domínio de cálculo, foi necessário impor a distribuição de velocidades do escoamento em um plano acima do *swirler*. Esses dados estavam disponíveis dos experimentos realizados por Fukumasu et al. (2013) através do método PIV. Analisando os resultados experimentais do escoamento isotérmico, foi decidido utilizar os resultados experimentais para o plano normal à direção axial e distante 5 mm da seção de descarga do *swirler*.

As distribuições de velocidade impostas estão apresentadas na Figura18.

Figura 18 – Distribuição de velocidade: (a) radial; (b) axial; (c) tangencial.



Ao analisar as distribuições de velocidade na Figura 18, obtidas experimentalmente, infere-se que há assimetria nos resultados. Este fato é observado para as três componentes da velocidade. A origem da assimetria provém da configuração experimental, a qual contém a adaptação para posicionamento do injetor na região central do *swirler*, e de imprecisão da fabricação da própria peça.

As condições de contorno de turbulência e das seções de descarga são as mesmas que foram apresentadas na seção 4.1.2.1, uma vez que o objetivo é avaliar se o modelo de turbulência foi capaz de descrever corretamente o escoamento no *swirler*.

4.1.3. Resultados para o domínio completo

4.1.3.1. Estudo de independência de malha

O primeiro estudo realizado é o de independência de malha, o qual objetiva avaliar o impacto da discretização do domínio sobre os resultados numéricos. A independência é verificada quando é observado que o refinamento da malha não implicará em variação do resultado obtido. Esta independência implica que erros da simulação podem ser atribuídos aos modelos físicos e numéricos, mas não à dimensão da discretização.

Conforme descrito na seção 4.1.1, foram desenvolvidas 3 malhas e a independência de malha será avaliada para os resultados das simulações utilizando essas malhas. Todas as simulações foram desenvolvidas utilizando o método PRESTO para interpolação da pressão do escoamento, o método PISO para acoplamento entre as equações da quantidade de movimento e da continuidade, e o método *Upwind* de primeira ordem. Na seção 4.1.3.3, foi avaliada a difusão numérica introduzida pelo método de discretização espacial *Upwind* ao compará-lo com métodos de ordem superior.

A independência de malha foi avaliada através de três parâmetros diferentes. O primeiro foi o perfil da velocidade axial em um plano horizontal distante 5 mm do *swirler*. O segundo foi o perfil da velocidade tangencial no mesmo plano. O último parâmetro foi o perfil da velocidade axial sobre a linha de centro do *swirler*.

Todos os parâmetros são apresentados ou pela posição radial normalizada pelo raio externo do *swirler* ou pela posição axial normalizada através do diâmetro externo do *swirler*.

Os resultados para o primeiro parâmetro estão dispostos na Figura 19 em função da posição radial normalizada pelo raio da seção de descarga do *swirler* (R). Os resultados obtidos para as malhas 2 e 3 estão sobrepostos indicando que a independência de malha foi atingida para

esse parâmetro. A diferença máxima entre os valores obtidos para as malhas 2 e 3 é menor do que 1%, o que permite dizer que a discretização não afeta a distribuição radial da velocidade axial. A comparação entre os resultados mostra que a diferença entre os resultados obtidos pela malha 1 e as demais é baixa. A maior diferença entre os resultados das malhas 1 e 3 foi de 10% para a posição r/R igual a 0,5, porém os demais pontos tem erro inferior a 5%, dessa forma observa-se que as diferenças entre os resultados obtidos são pequenas.

Figura 19 – Distribuição da componente axial da velocidade em plano horizontal distante 7 mm do *swirler*

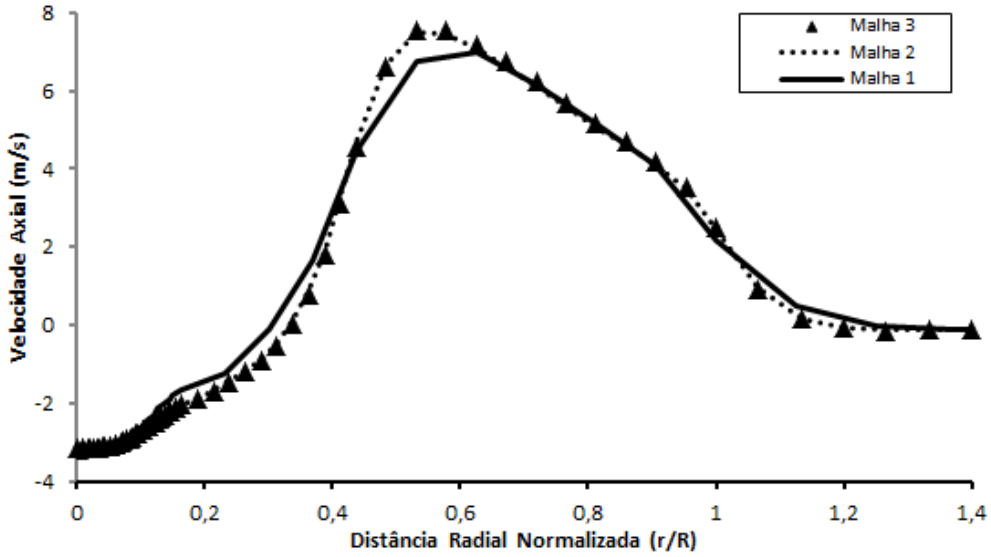
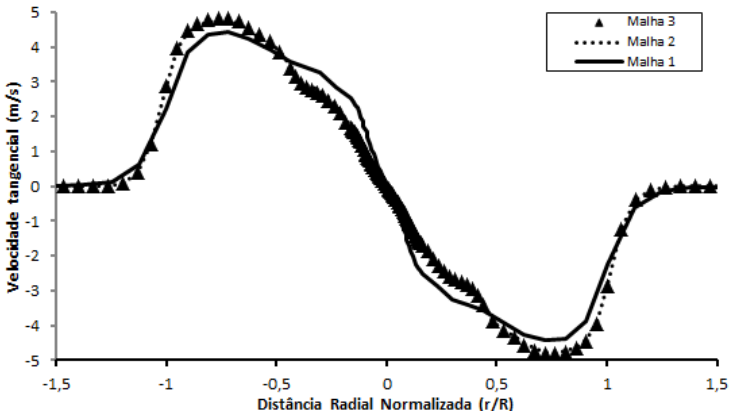


Figura 20 – Distribuição da componente tangencial da velocidade em plano horizontal distante 5 mm do *swirler*

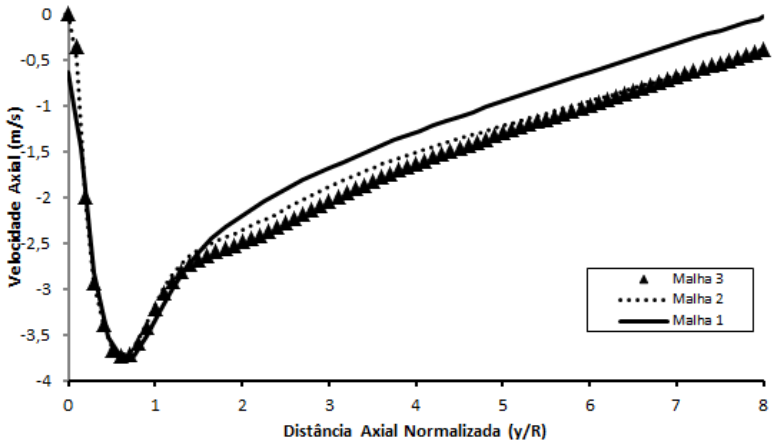


A Figura 20 apresenta os resultados para a velocidade tangencial, segundo parâmetro de avaliação da independência de malha. Assim como observado para a velocidade axial no mesmo plano, os resultados para as malhas 2 e 3 estão sobrepostos, com erro máximo de aproximadamente 2%. Apesar da independência de malha não ter sido atingida com a malha

1, a comparação dos resultados permite inferir que sua utilização não acarretaria grandes impactos nos resultados, uma vez que erro o máximo entre os resultados das malhas 1 e 3 é de 7% e os demais pontos com erros inferiores a 5%.

A distribuição da velocidade axial sobre a linha de centro, Figura 21, diferencia-se dos demais, pois as curvas dos resultados para as malhas 2 e 3 apresentam diferenças maiores, chegando a 8,1 % para y/R igual a 3,5. Entretanto, a maioria dos resultados apresenta diferenças abaixo de 5%. Os resultados da malha 1, em comparação com as demais, mostram que a distribuição da velocidade axial sobre a linha de centro não está bem representada, pois se observam diferenças de até 35% entre os resultados das malhas 1 e 3. Portanto, a utilização da malha 1 prejudicaria a descrição dessa propriedade.

Figura 21 – Distribuição da componente axial da velocidade sobre a linha de centro do domínio



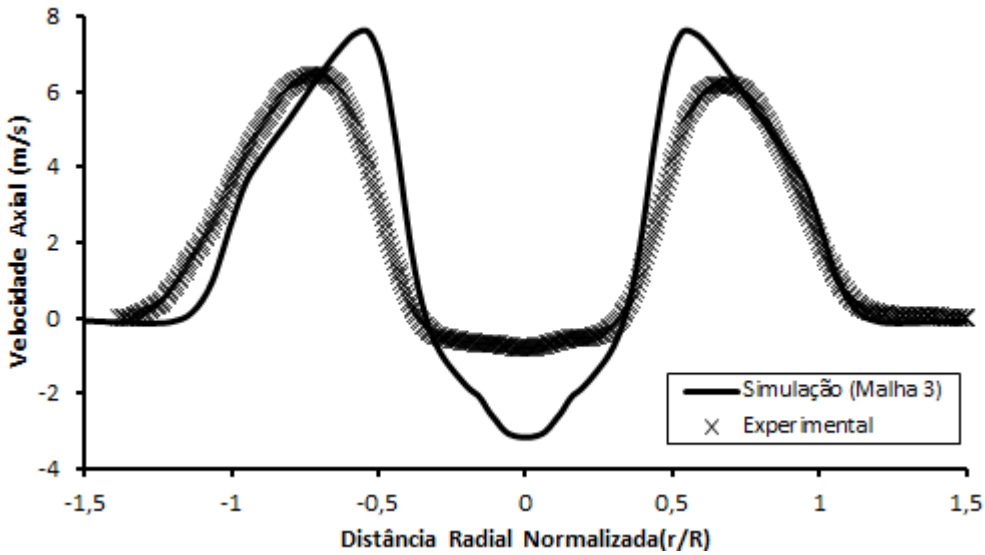
4.1.3.2. Validação dos resultados numéricos

Os resultados obtidos com a malha 3 e apresentados na seção anterior foram comparados com os resultados experimentais obtidos por Fukumasu et al (2013) através do método PIV. Os erros experimentais foram estimados em aproximadamente 10% e devem ser considerados ao comparar os resultados experimentais e numéricos.

A comparação dos resultados para a distribuição da velocidade axial (Figura 22) mostra que o modelo numérico superestimou a componente axial da velocidade na região da linha de centro. A diferença entre os resultados é de 300%, com base no resultado experimental. O modelo numérico falha em descrever os gradientes radiais da componente axial da velocidade entre as posições radiais normalizadas 0 e 0,7. O modelo numérico também superestima o

valor máximo da componente axial da velocidade em 20%. Além disso, observa-se que o local de valor máximo ocorre em diferentes pontos do domínio.

Figura 22 – Resultados numéricos e experimentais para a componente axial da velocidade (y=5 mm)



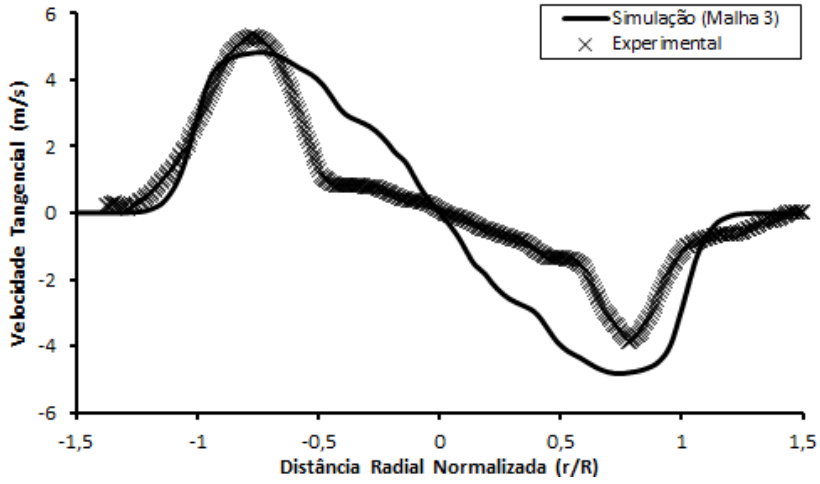
A distribuição da velocidade tangencial no mesmo plano, apresentada na Figura 23, mostra a deficiência do modelo em caracterizar os gradientes dessa propriedade do escoamento próximos à zona de recirculação. Isto fica explicito pelo fato de que o modelo numérico não conseguiu representar os altos gradientes da velocidade tangencial entre 0,5 e 0,8 r/R. A simulação apresenta gradientes menores da componente tangencial, o que pode ser um indicativo que o modelo superestima a difusão dessa componente na direção radial.

A máxima velocidade tangencial obtida pelo modelo numérico se assemelha à obtida experimentalmente em 0,7 r/R. Entretanto, são obtidos erros elevados entre os resultados numéricos e experimentais, sendo o erro máximo de 200% com base na posição r/R igual a 0,5.

A partir das Figura 22 e 23, infere-se que o modelo numérico não conseguiu caracterizar a região da recirculação com acurácia desejada, pois tanto a componente axial quanto a componente tangencial tem seus módulos superestimados.

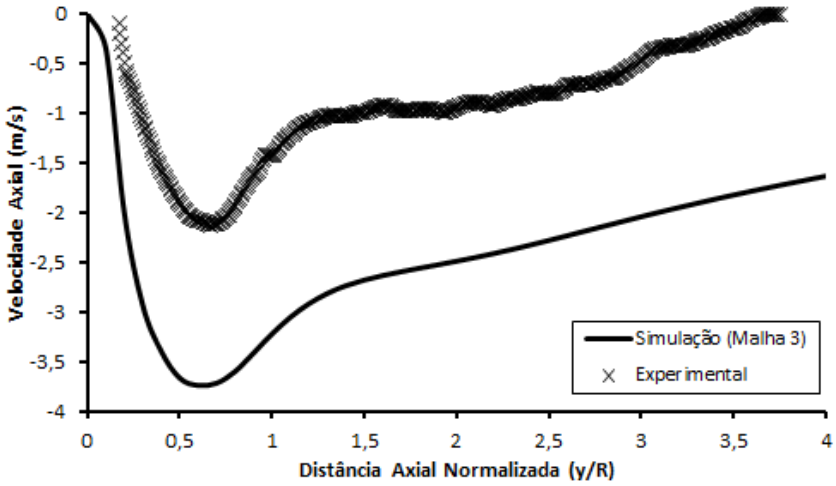
Os resultados experimentais apresentados na Figura 23 apresentam assimetria em relação ao módulo das componentes tangenciais da velocidade. Essa assimetria é uma consequência de problemas da configuração experimental e não consegue ser representado por esse modelo, uma vez que ele se baseia em uma geometria axissimétrica.

Figura 23 – Resultados numéricos e experimentais para a componente tangencial da velocidade (y=5 mm)



A Figura 24 compara os resultados experimentais e o perfil da velocidade axial sobre a linha de centro. Assim como observado na Figura 22, a velocidade da recirculação sobre a linha de centro é superestimada. A diferença entre os resultados numéricos e experimentais possibilita que a malha 1 possa ser utilizada, uma vez que o erro introduzido pelo menor refinamento é pequeno em comparação à diferença observada entre os resultados experimentais e os resultados numéricos.

Figura 24 – Resultados numéricos e experimentais para a componente axial da velocidade sobre a linha de centro (r/R=0)



A comparação dos resultados numéricos e experimentais e os resultados dos estudos de independência de malha mostram que a zona de recirculação sobre a linha de centro não é representada com boa precisão, uma vez que foram observados erros de até 300%. Entretanto, este estudo permite concluir que as deficiências do modelo numérico não estão vinculadas ao

refinamento do modelo, mas sim a outros fatores como condições de contorno, métodos numéricos e o modelo de turbulência.

4.1.3.3. Estudo da difusividade numérica

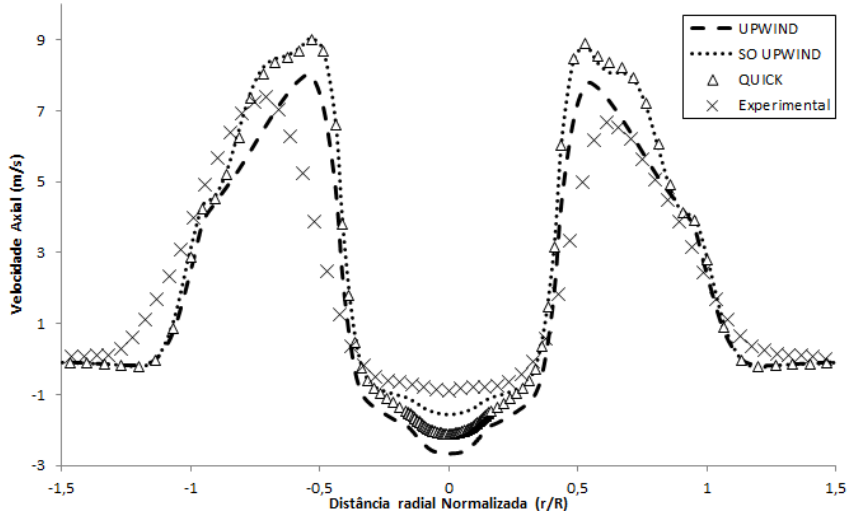
A utilização do modelo *Upwind* de primeira ordem simplifica o modelo numérico, entretanto sua utilização introduz difusividade numérica no cálculo (Versteeg e Malalasekera, 2007). Essa difusividade pode ser um dos fatores principais para a grande diferença entre os resultados experimentais e do modelo numérico explicitados na seção anterior. Versteeg e Malalasekera (2007) afirmam que a difusividade numérica é intensificada em pontos do escoamento em que são encontrados grandes gradientes. A partir da análise dos resultados experimentais, conclui-se que gradientes consideráveis são encontrados próximos à seção de saída do *swirler*. Logo, há a possibilidade da difusividade numérica ter um papel importante nas deficiências do modelo numérico.

A utilização de métodos de discretização de segunda ordem permite atenuar a introdução de difusividade numérica. A fim de verificar o impacto desta, dois métodos de segunda ordem foram empregados, além do método *upwind* de primeira ordem. Foram utilizados os métodos *Second Order Upwind* e *Quadratic Upstream Interpolation for Convective Kinetics* (QUICK). Os resultados com o método *upwind* de segunda ordem serão referidos doravante como SO Upwind nos gráficos.

A distribuição da velocidade axial em um plano horizontal distante 5 mm do *swirler* é apresentada na Figura 25. Nesta, estão representados os resultados utilizando os respectivos métodos de discretização e os experimentais. Os métodos de segunda ordem apresentam resultados semelhantes, entretanto observa-se que o método QUICK diminui a superestimativa da velocidade da recirculação próxima ao *swirler*. Todavia, ambos aumentam a superestimativa encontrada para o método *Upwind* de primeira ordem do pico de velocidade axial.

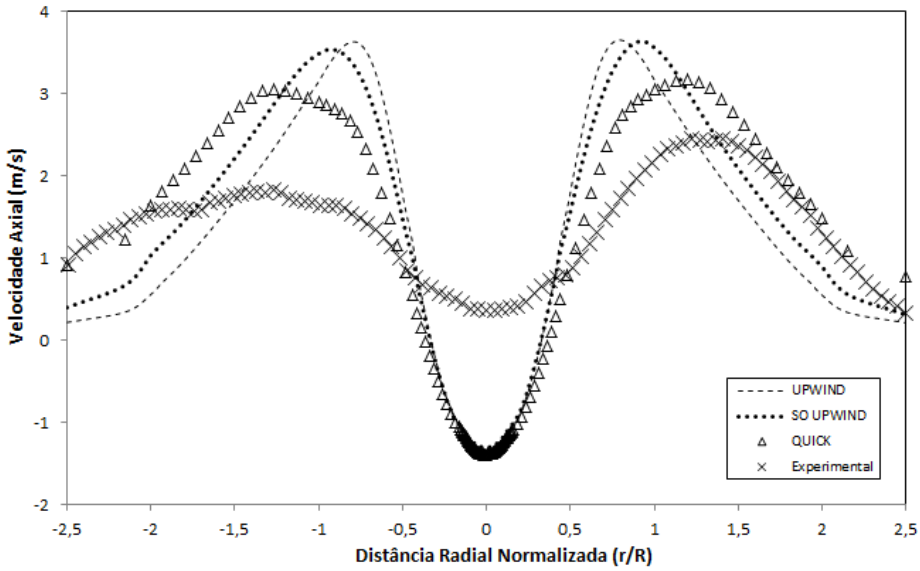
Conforme apresentado anteriormente, a superestimação da componente axial da velocidade utilizando o método numérico com o método *upwind* de primeira ordem é da ordem de 300%, entretanto ao utilizar o método SO Upwind esse erro é reduzido para 105%. Essa diminuição entre os resultados numéricos e experimentais mostra que, nesse local, o erro introduzido pelo método de discretização é significativo. Porém, o erro para o valor máximo da velocidade axial aumentou para 30%.

Figura 25 – Comparação entre os métodos de discretização com base na componente axial da velocidade (y=5 mm)



A Figura 26 apresenta os resultados da velocidade axial em um plano horizontal distante 90 mm do *swirler*. Todos os métodos foram deficientes nesse local. Todos calculam velocidades negativas na linha de centro, enquanto o experimento mostra velocidades positivas. Este ponto reitera a superestimativa da estrutura da recirculação pelo modelo numérico. Entretanto, ao comparar com os resultados obtidos próximos ao *swirler*, Figura 25, conclui-se que o modelo representou melhor as propriedades do escoamento próximas ao *swirler* em comparação às propriedades mais afastadas do *swirler*.

Figura 26 – Comparação entre os métodos de discretização com base na componente axial da velocidade (plano a 90 mm do *swirler*)



Na Figura 26, observa-se que os métodos *Upwind* apresentam tendência diferente do método QUICK. Isto se deve ao fato de que os métodos *upwind* foram desenvolvidos para escoamentos com forte caráter convectivo (Versteeg e Malalasekera, 2007). O método QUICK se aproxima um pouco mais dos resultados experimentais, apresentando um erro, em relação ao módulo máximo da velocidade, de 60%, enquanto os demais estão próximos de 100%. O método *upwind* tende a diminuir os gradientes devido à superestimativa da difusão (Versteeg e Malalasekera, 2007), entretanto esse método previu os maiores gradientes de velocidade, conforme caracterizado pela Figura 26. Esses resultados mostram que a principal fonte das diferenças entre os resultados numéricos e os dados experimentais não são os métodos de discretização.

O mesmo comportamento é obtido para a velocidade tangencial. A distribuição de velocidade tangencial foi avaliada nos mesmos planos que a velocidade axial. Os resultados para o plano a 5 mm do *swirler* são apresentados na Figura 27 e os resultados para o plano 90 mm na Figura 28. Comparando os resultados para as componentes axial e tangencial, conclui-se que o modelo numérico representa com maior precisão o desenvolvimento da distribuição de velocidades tangenciais. A Figura 28 mostra que, em planos mais afastados do *swirler*, a diferença entre resultados numéricos e experimentais aumenta. Na Figura 27, a diferença entre os valores máximos da velocidade tangencial são de aproximadamente 30%, enquanto, no plano a 90 mm do *swirler*, Figura 28, essa diferença chega a 80%.

Portanto, conclui-se que o modelo de discretização não consegue ter efeitos significativos para melhorar o resultado.

Figura 27 – Comparação entre os métodos de discretização com base na componente tangencial da velocidade (plano a 5 mm do *swirler*)

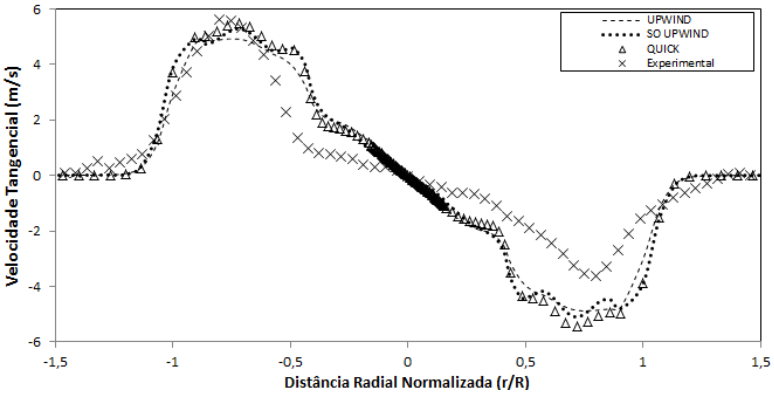
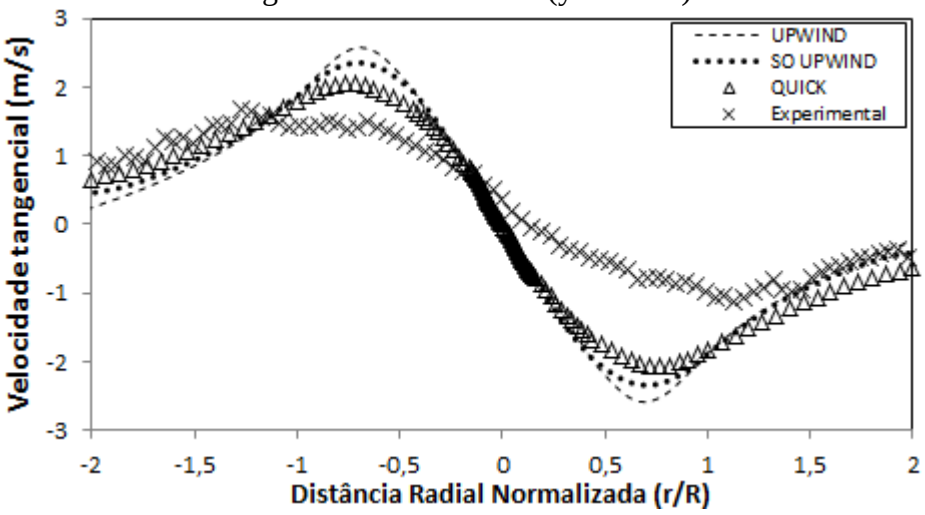
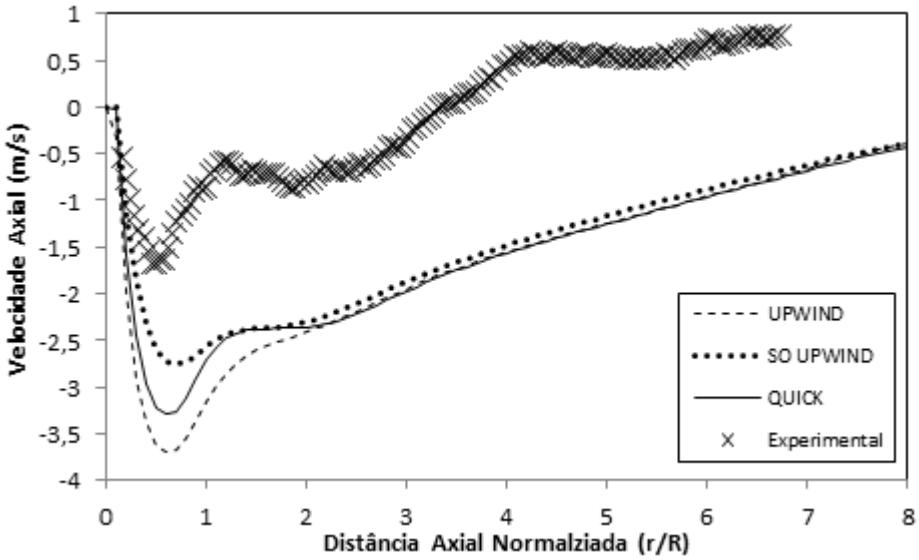


Figura 28 – Comparação entre os métodos de discretização com base na componente tangencial da velocidade (y=90 mm)



A distribuição da velocidade axial sobre a linha de centro é comparada na Figura 29. Observa-se que a introdução de novos métodos de ordem superior não trazem grandes melhoras nos resultados, ainda distantes dos resultados experimentais. Este fato explicita que a diferença observada entre os resultados numéricos e experimentais não pode ser atribuída à difusividade numérica. O método SO Upwind melhora os resultados na região próxima ao *swirler*, devido à diminuição da difusividade numérica, porém observa-se que independente do método utilizado a recirculação é superestimada.

Figura 29 – Comparação entre os métodos de discretização com base na componente axial da velocidade (sobre a linha de centro)



Em suma, os métodos de discretização não resultaram em melhoras significativas nos resultados do modelo numérico. Esta conclusão permite excluir a difusividade numérica como principal fonte de erros do modelo numérico.

4.1.3.4. Estudo do modelo de turbulência

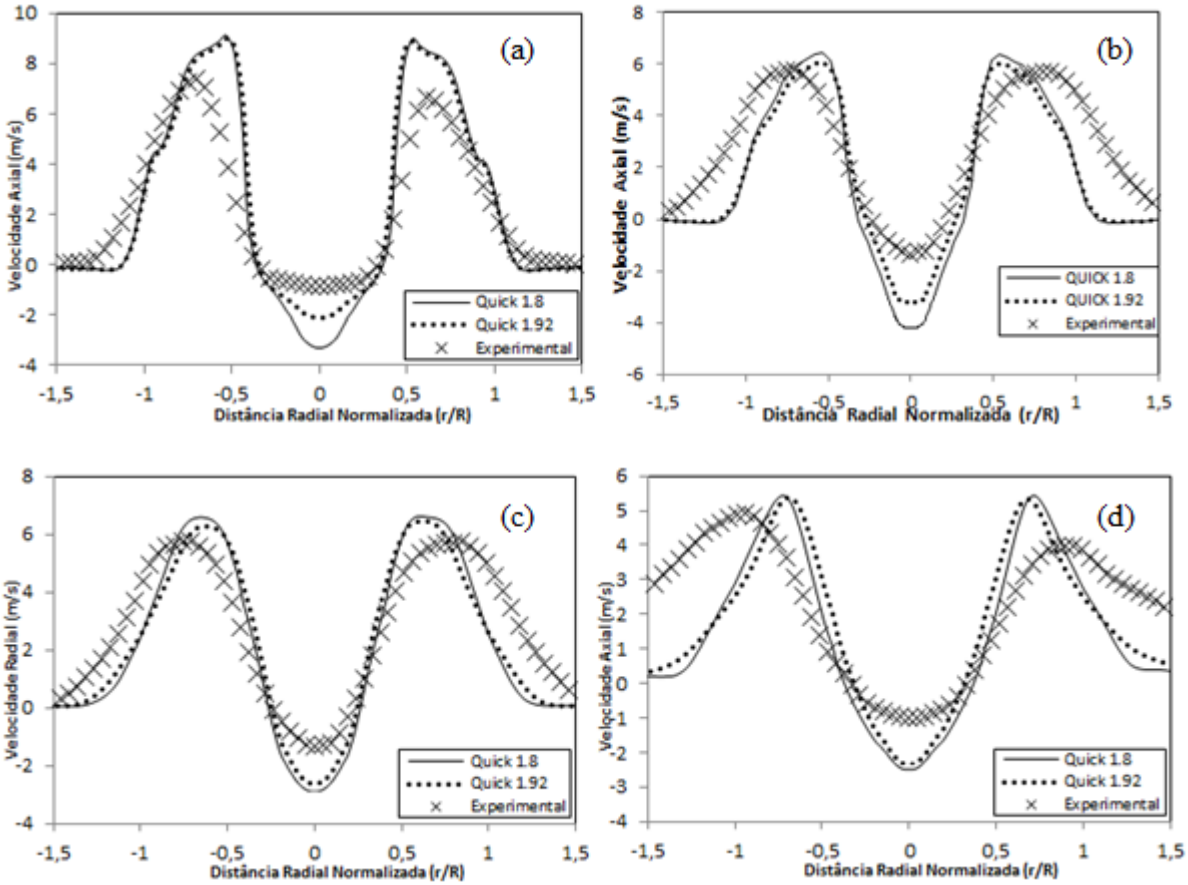
Conforme observado pelos resultados apresentados nas seções 4.1.3.1 e 4.1.3.3, a difusividade numérica e a malha não são as fontes da discrepância observada entre os resultados numéricos e experimentais. Sacomano (2011), durante a validação do modelo k-ε padrão, afirma que a superestimação da turbulência pode ser fonte de erros significativos, mais especificamente a equação de ε. O modelo de turbulência RSM utiliza a equação modelada da taxa de dissipação da energia cinética turbulenta (ε) para descrever a dissipação das tensões de Reynolds. A equação exata de transporte da dissipação da energia cinética turbulenta apresenta muitos termos abertos e, por isso, comumente, utiliza-se uma equação modelada. Entretanto, a equação apresenta coeficientes de ajuste, os quais foram definidos com bases em dados experimentais. Desta forma, a equação foi desenvolvida e validada especificamente para um determinado escoamento, o que não a torna válida para outros casos. Pope (2000) afirma que a equação deve ser interpretada como uma equação empírica. Deste fato, conclui-se que ela tem de ser ajustada para cada caso e não deve ser encarada como uma equação diretamente aplicável a qualquer caso.

Sacomano (2011), durante a validação do seu código, procurou alterar apenas os valores da constante $C_{2,\varepsilon}$ (Equação 112) por simplicidade. Pope (1978) procurou obter uma solução mais geral introduzindo novos termos nas equações e também fez ajustes a equação padrão para que o modelo representasse o escoamento de jatos circulares axissimétricos propriamente. Seguindo o caminho proposto por esses autores, foram desenvolvidas duas simulações numéricas com o método de discretização QUICK do termo advectivo alterando o coeficiente de ajuste $C_{2,\varepsilon}$.

Foram simulados dois casos: um em que o valor padrão do RSM (1,92) foi atribuído a essa constante e um segundo caso em que foi atribuído o valor utilizado por Sacomano (2011), 1,8. As distribuições apresentadas na Figura 30 mostram que a alteração não teve grandes efeitos sobre os resultados obtidos para a componente axial da velocidade. A recirculação na região da linha de centro foi ainda mais superestimada nos planos mais próximos ao *swirler*. Nas demais regiões do escoamento, a diferença é pequena e nenhum tipo de afirmação pode ser feita sobre a precisão do modelo. Esses resultados deixam explícito que há baixa sensibilidade

deste escoamento em relação a essa constante da equação de ε. O ponto em que foi observada maior sensibilidade foi a região da linha de centro para planos próximos do *swirler*. Esta sensibilidade se deve ao fato de que essa é a região com maior taxa de dissipação (ε) e a alteração da constante diminuiu a dissipação de ε, provocando o aumento o módulo da componente axial sobre a linha de centro.

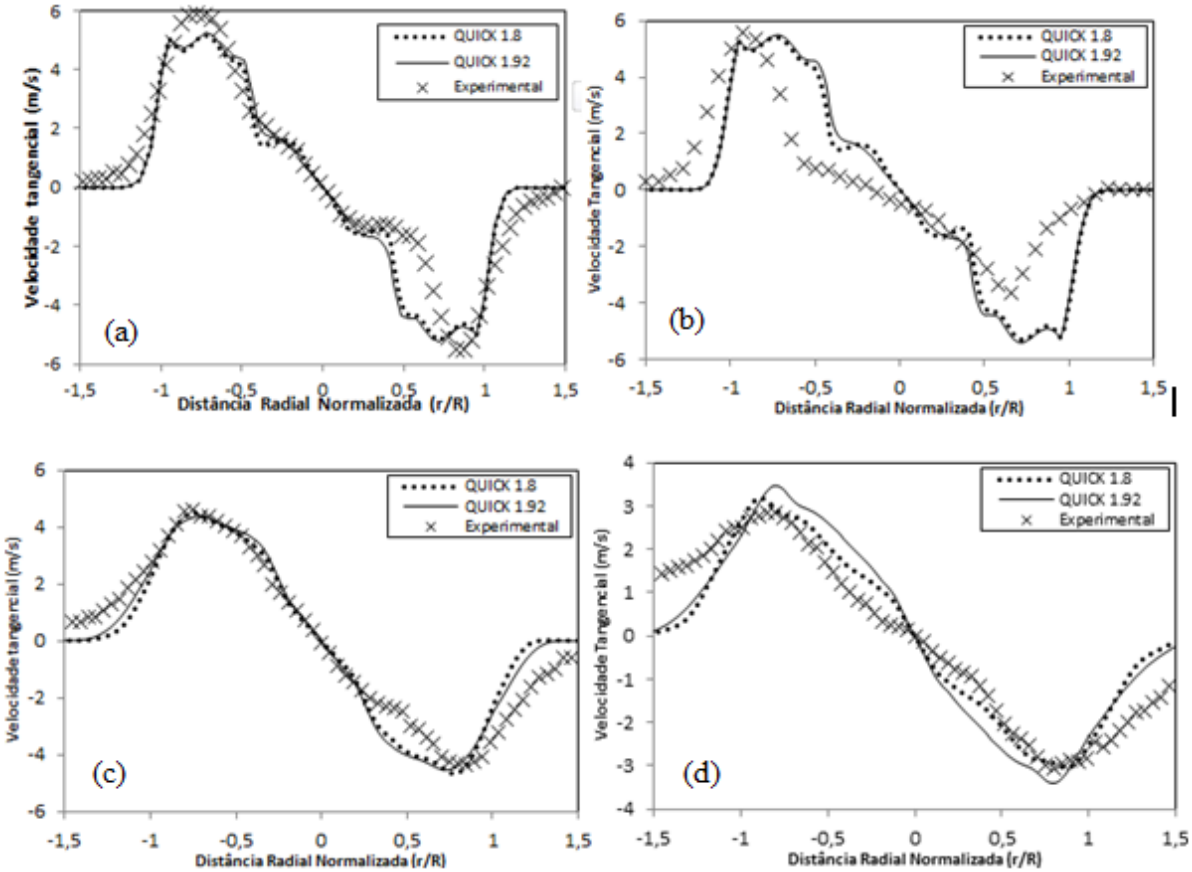
Figura 30 – Resultados da componente axial da velocidade em um plano horizontal distante: (a) 5 mm do *swirler* (b) 10 mm do *swirler* (c) 20 mm do *swirler* (d) 40 mm do *swirler*



A mesma conclusão feita acerca da componente axial pode ser feita sobre os resultados da componente tangencial (Figura 31). As alterações nos resultados são pequenas e são muito menores em comparação às diferenças encontradas entre o modelo numérico e os resultados experimentais.

Resumindo, a alteração deste coeficiente não trouxe melhoras na representatividade do modelo. Na região da linha de centro, o novo coeficiente ($C_{2,\varepsilon}$ =1,8) se afastou mais dos resultados experimentais. Desta forma, pode-se concluir que este parâmetro não tem grande influência. Além disso, a alteração dessa constante dificultou a convergência, pois esta só foi atingida com um número mais elevado de iterações.

Figura 31 – Resultados da componente tangencial da velocidade em um plano horizontal distante: (a) 5 mm do *swirler* (b) 10 mm do *swirler* (c) 20 mm do *swirler* (d) 40 mm do *swirler*



4.1.3.5. Estudo da condição de contorno de admissão

Os estudos anteriores mostraram que os resultados não sofreram melhoras significativas e, portanto, as diferenças entre os resultados numéricos e experimentais poderiam ser atribuídas a outros fatores. Um dos fatores destacados são as condições de contorno de vazão, obtida experimentalmente e as condições de contorno de turbulência.

Para avaliar a influência da vazão, foram feitas três simulações impondo três vazões diferentes, apresentadas na Tabela 10. Todas as simulações foram feitas utilizando a malha 3 e o método de discretização *upwind* de primeira ordem.

A vazão do modelo 1 foi obtida experimentalmente através de um medidor de vazão. Já a vazão do modelo 2 foi obtida através da integração das componentes da velocidade obtidas experimentalmente pelo PIV em um plano a 5 mm do *swirler*. Finalmente, uma terceira vazão foi escolhida para avaliar uma vazão abaixo da medida experimentalmente.

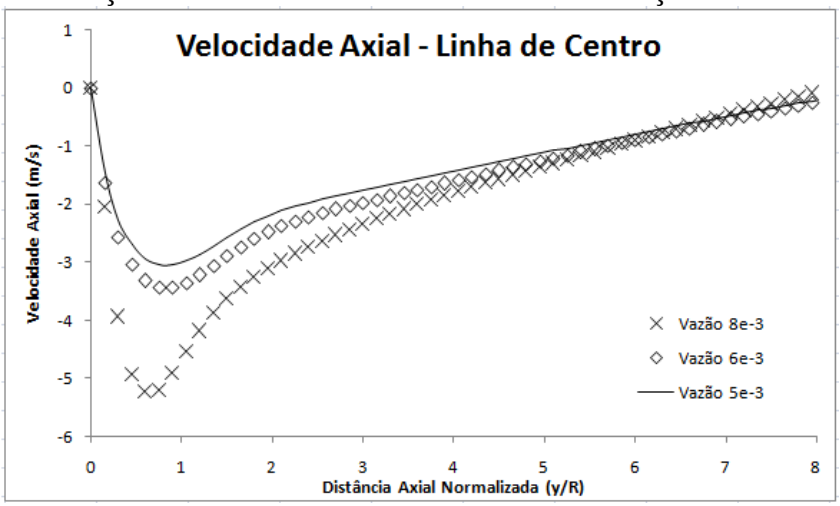
Tabela 10 – Vazões para análise paramétrica

Modelo	Vazão (kg/s)
1	6,06E-03
2	8,00E-03
3	5,00E-03

Conforme avaliado nas seções anteriores, os resultados apresentavam maior discrepância nas regiões próximas da linha de centro. Portanto, a análises paramétrica da vazão ficaram restritas à avaliação da distribuição da componente axial da velocidade nessa região. Os resultados dessas simulações estão apresentados na Figura 32.

O aumento da vazão provocou uma recirculação com módulo ainda maior. O valor máximo da componente axial, utilizando a vazão estimada pelo PIV, aumentou 50% em relação ao modelo desenvolvido com a vazão nominal do experimento. A diminuição da vazão no modelo 3 diminui o módulo da velocidade em 11%. Entretanto, ao comparar os resultados obtidos com os resultados experimentais, ainda é observada grande diferença, pois ainda há um erro de 84% entre os resultados do modelo 3 e os resultados experimentais.

Figura 32 – Avaliação da sensibilidade dos resultados à condição de contorno de vazão

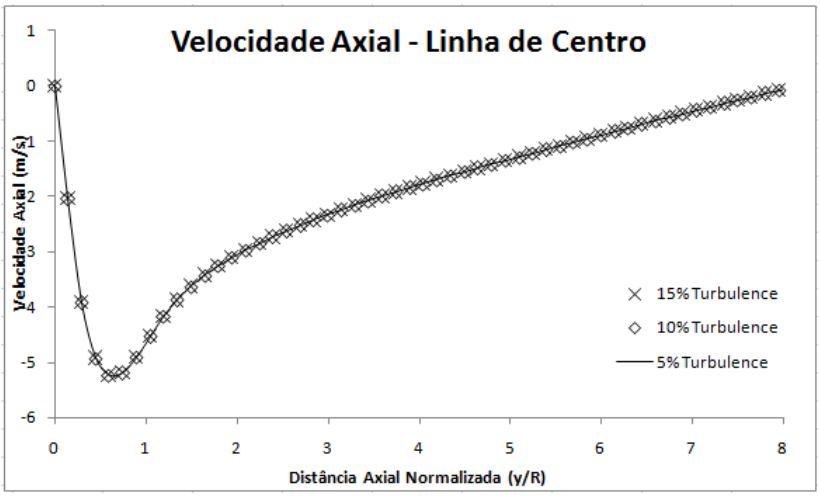


O estudo paramétrico da vazão mostrou que, mesmo alterando a condição de contorno de vazão, o modelo ainda tem deficiências em descrever o escoamento caracterizado experimentalmente pelo método PIV.

Outra condição de contorno que poderia ser a fonte de erros do modelo numérico é a condição de contorno de turbulência. Visando à avaliação da sensibilidade dos resultados a este parâmetro, foram alteradas as condições de contorno de intensidade turbulenta do modelo. Três diferentes valores de intensidade foram testados: 5%, 10%, e 15%. Assim como feito

para o estudo paramétrico da vazão, a avaliação dos modelos foi feita através da distribuição da componente axial da velocidade sobre a linha de centro, apresentada na Figura 33.

Figura 33 – Avaliação da sensibilidade dos resultados à condição de contorno de intensidade turbulenta



Os resultados mostram baixa sensibilidade a esse parâmetro, uma vez que a diferença relativa entre os erros é menor do que 1%. Logo, a intensidade turbulenta não é uma das fontes das divergências entre os resultados experimentais e numéricos.

Em suma, a análise paramétrica permitiu concluir que as condições de contorno impostas no modelo numérico não são a principal fonte de divergência entre os resultados. Conforme esperado, observou-se a sensibilidade dos resultados em relação à variação da vazão. Entretanto, ao utilizar a vazão estimada através da integração dos resultados do PIV, as diferenças entre modelo numérico e experimento aumentaram, o que não permite sua utilização.

4.1.4. Resultados para o domínio simplificado

Após a avaliação dos resultados com domínio completo, conclui-se que a diferença observada entre os resultados numéricos e experimentais não poderia ser atribuída às malhas, aos métodos de discretização, à constante $C_{2,\varepsilon}$ da equação de transporte da taxa de dissipação da energia cinética turbulenta e às condições de contorno.

Uma segunda metodologia foi utilizada, procurando definir qual era a fonte dos problemas do modelo numérico. Desta forma, o domínio foi simplificado e o *swirler* foi retirado do domínio

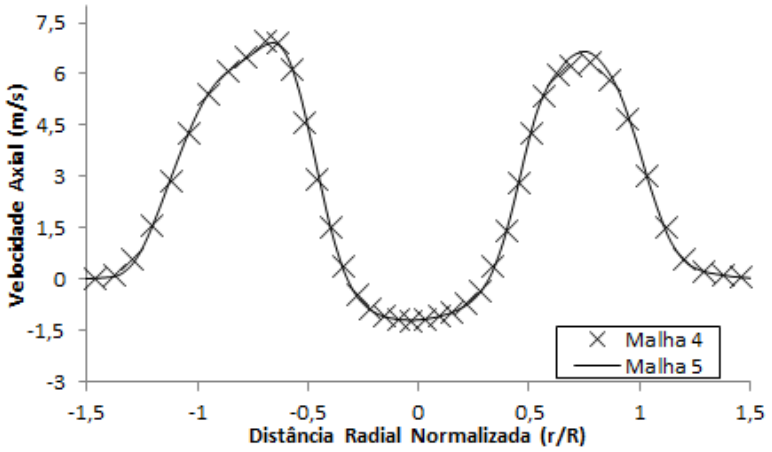
de cálculo, sendo que as distribuições das componentes da velocidade a 5 mm do *swirler* foram impostas.

Assim como definido para o domínio completo, foram realizados os estudos de independência de malha, sendo que no caso foram avaliadas apenas duas malhas e de difusividade numérica. O estudo da constante $C_{2,\varepsilon}$ não foi realizado, pois as conclusões obtidas com as simulações do domínio completo foram suficientes para descartar um segundo estudo.

4.1.4.1. Estudo de independência de Malha

Um segundo estudo de independência de malha foi desenvolvido para o domínio simplificado. A metodologia é semelhante à apresentada na seção 4.1.3.1, na qual os resultados para as componentes axial e radial da velocidade serão utilizadas como parâmetros de avaliação. Porém, como a velocidade está sendo imposta na seção de admissão a 5 mm, os resultados serão avaliados a 5 mm da seção de descarga, o que corresponderia a um plano a 10 mm do *swirler*.

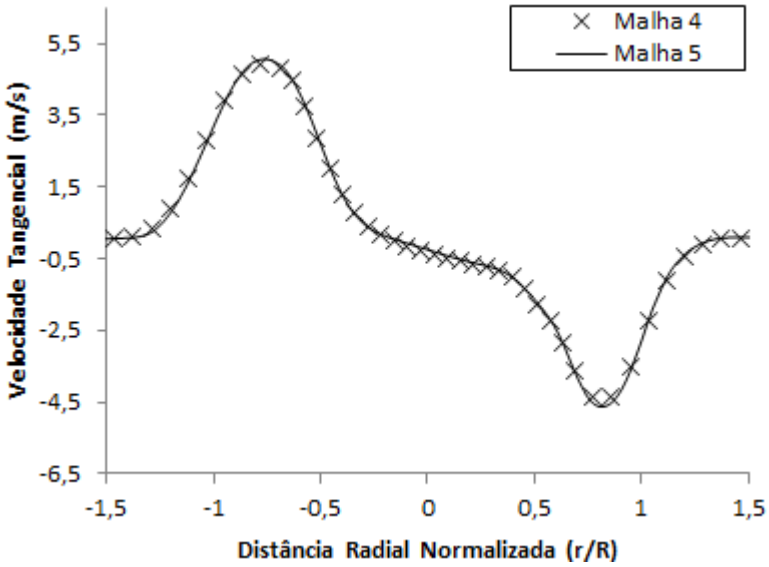
Figura 34 – Distribuição da componente axial da velocidade em plano horizontal distante 10 mm do *swirler*



Os resultados da distribuição da componente axial da velocidade na direção radial estão apresentados na Figura 34. A diferença entre os resultados é pequena, sendo de no máximo 5% para r/R igual 0,7. Entretanto, os resultados estão muito próximos e para este parâmetro conclui-se que a independência de malha foi atingida.

A Figura 35 representa graficamente a distribuição da componente tangencial na direção radial. A diferença máxima obtida entre os resultados foi inferior a 3%, no ponto r/R igual a 0,7. Portanto, conclui-se que a independência de malha foi atingida para esse parâmetro.

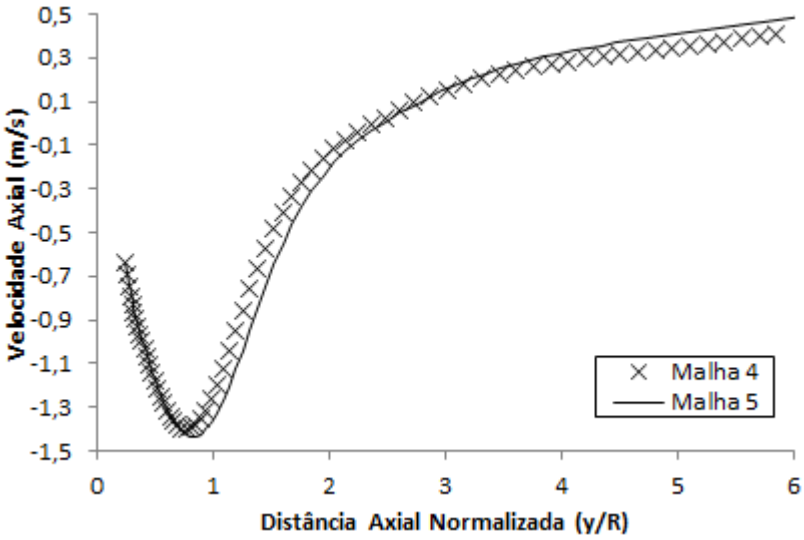
Figura 35 – Distribuição da componente tangencial da velocidade em plano horizontal distante 10 mm do *swirler*



A distribuição da componente axial sobre a linha de centro, apresentada na Figura 36, ratifica a independência de malha. A diferença entre os valores máximos das duas malhas é de 2,9%. Entretanto, há uma pequena diferença entre as curvas entre os pontos 1 e 2,5 e entre 3 e 6 das coordenadas axiais normalizadas. Entretanto, essa diferença é de baixa magnitude, sendo aproximadamente 0,05 m/s.

Analisando os resultados apresentados, constata-se que a independência de malha foi atingida e que, portanto, as características da malha não influenciam no resultado.

Figura 36 – Distribuição da componente axial da velocidade sobre a linha de centro do domínio

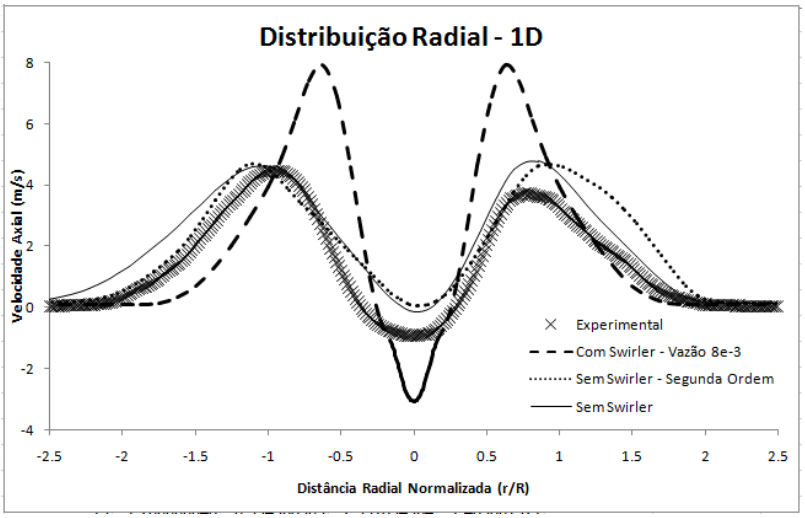


4.1.4.2. Estudo da Difusividade numérica

As simulações realizadas para avaliação da independência de malha foram desenvolvidas utilizando o método de discretização *upwind* de primeira ordem. Conforme apresentado na seção 4.1.3.3, este método introduz difusividade numérica no modelo e essa difusividade tem de ser avaliada, pois pode alterar a aderência dos resultados numéricos aos experimentais. Seguindo a metodologia aplicada ao cálculo com domínio completo, foi desenvolvido um segundo modelo numérico com a malha 5 e o método SO Upwind.

Os resultados para a distribuição radial da velocidade axial em um plano a 40 mm do *swirler* estão apresentados na Figura 37. Nesta figura, estão dispostos os resultados para o modelo com o método *upwind* de primeira ordem (doravante denominado Sem Swirler) e para o modelo utilizando o SO *Upwind* (referido como Sem Swirler – Segunda Ordem). A fim de comparar as duas metodologias, também estão apresentados nos gráficos os resultados experimentais e os do modelo com domínio completo e vazão calculada a partir dos resultados experimentais.

Figura 37 – Distribuição da componente axial da velocidade em plano horizontal distante 40 mm do *swirler*



A análise dos resultados mostra que as simulações com domínio simplificado descrevem mais precisamente o escoamento medido experimentalmente, o que permite concluir que os modelos com domínio completo não conseguem caracterizar adequadamente o escoamento no *swirler*. A diferença entre os resultados experimental e com *swirler* é de 90%, para o valor máximo da velocidade axial no plano a 40 mm do *swirler*. A diferença entre os resultados

experimental e Sem Swirler é de apenas 7,5%, o que mostra uma melhora significativa nos resultados.

A diferença entre os modelos Sem Swirler e Sem Swirler – Segunda Ordem na linha de centro é menor do que 0,2 m/s, enquanto os valores máximos das componentes axiais tem diferença menor de 2%.

A distribuição radial da velocidade axial também foi avaliada nos planos a 80 mm e 120 mm do *swirler*. Essas distribuições estão apresentadas nas Figuras 38 e 39, respectivamente. As mesmas conclusões são atingidas ao analisar essas distribuições. Porém, torna-se evidente a assimetria do escoamento experimental, o que não poderia ser descrito pelo domínio completo. A simulação impondo as velocidades do PIV permitiu representar as assimetrias do escoamento, melhorando a aderência dos resultados numéricos em relação aos dados experimentais.

A descrição da velocidade axial próxima à linha de centro foi o ponto em que os modelos com *swirler* tiveram pior desempenho, superestimando a recirculação nessa região. Os resultados apresentados na Figura 40 mostram que a tendência é oposta ao utilizar o domínio simplificado. O módulo da maior velocidade na linha de centro nos resultados foi 35 % mais baixo do que o valor obtido experimentalmente.

Além disso, os métodos de discretização apresentam tendências diferentes. O modelo Sem Swirler – Segunda Ordem apresenta oscilações em comparação ao modelo Sem Swirler, este tem tendência semelhante aos modelos com domínio completo. Entretanto, ao comparar os modelos com o resultado experimental, observa-se que nenhum deles consegue representar completamente o fenômeno da recirculação, apesar de apresentarem melhora em comparação aos modelos com domínio completo.

As Figuras 41, 42 e 43 permitem concluir que os modelos Sem Swirler e Sem Swirler – Segunda tiveram boa aderência aos resultados experimentais. Para o plano a 120 mm, Figura 43, a diferença entre os valores máximos da componente tangencial para a velocidade tangencial é de 7%, comparação feita entre o resultado obtido para o modelo *upwind* de primeira ordem e os resultados experimentais. Os métodos de discretização tiveram pouco impacto sobre a descrição da distribuição da velocidade tangencial.

Figura 38 – Distribuição da componente axial da velocidade em plano horizontal distante 80 mm do *swirler*

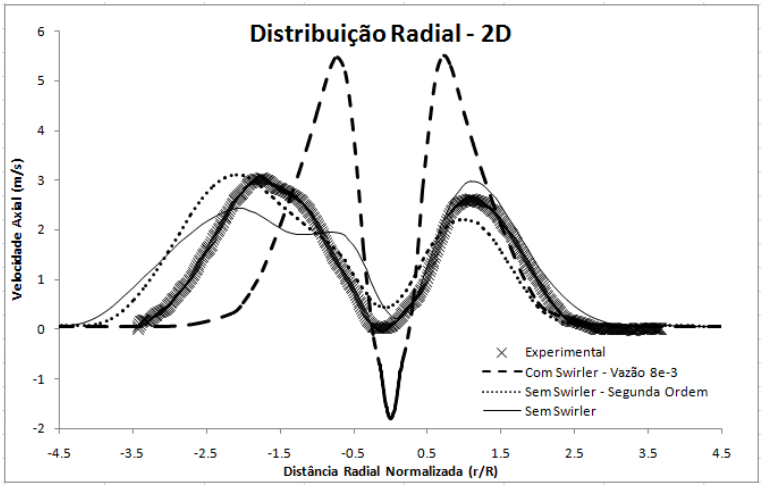


Figura 39 – Distribuição da componente axial da velocidade em plano horizontal distante 120 mm do *swirler*

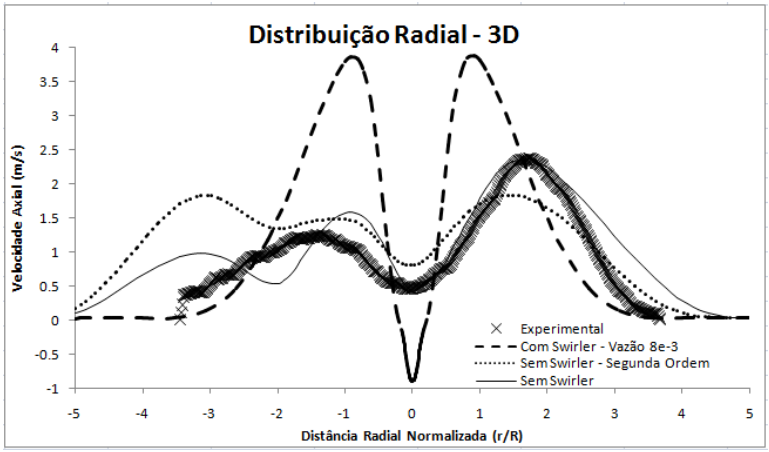


Figura 40 – Distribuição da componente axial da velocidade sobre a linha de centro do domínio

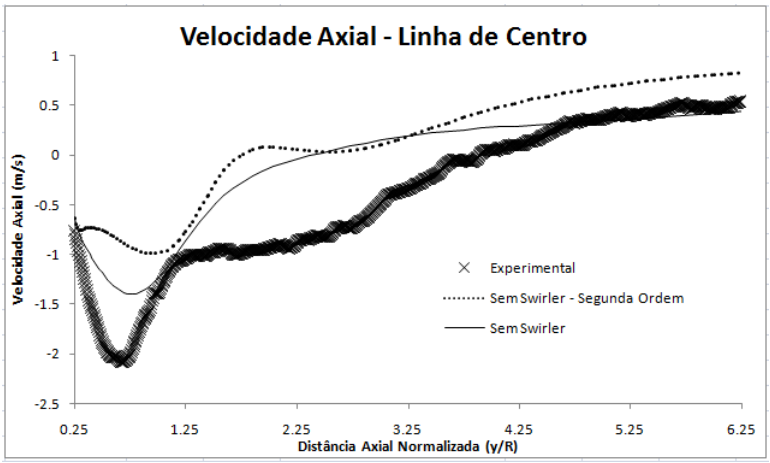


Figura 41 – Distribuição da componente tangencial da velocidade em plano horizontal distante 40 mm do *swirler*

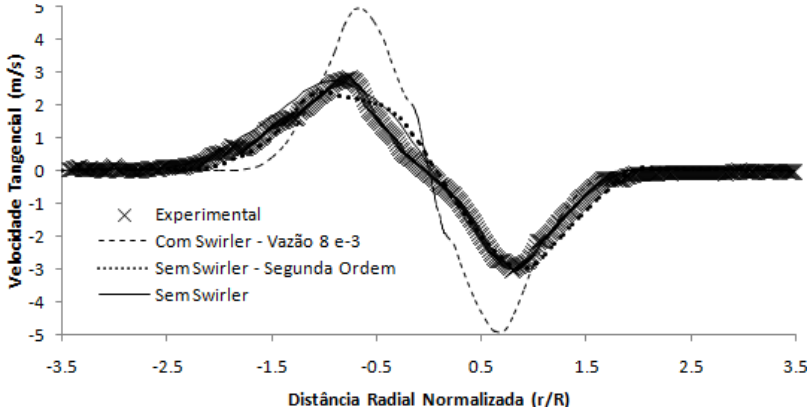


Figura 42 – Distribuição da componente tangencial da velocidade em plano horizontal distante 80 mm do *swirler*

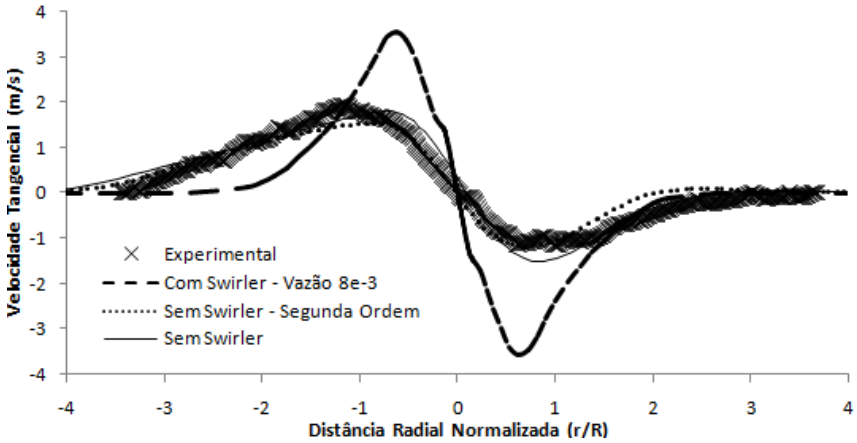
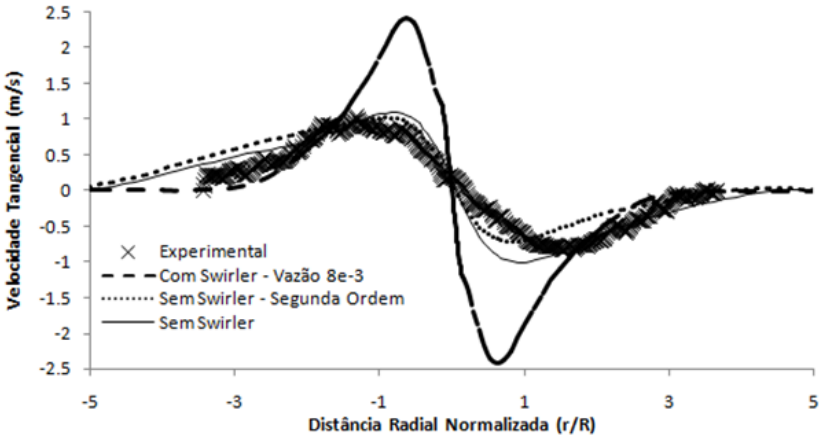


Figura 43 – Distribuição da componente tangencial da velocidade em plano horizontal distante 120 mm do *swirler*



A comparação dos resultados das simulações com e sem representação do *swirler* confirma que, de fato, o modelo de turbulência utilizado não foi capaz de descrever o escoamento no

swirler, o que implicou nas divergências entre resultados numéricos e experimentais apresentados na seção 4.1.3.

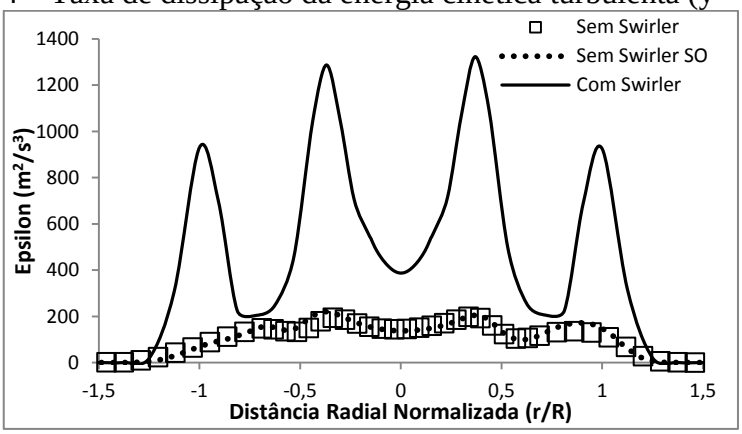
4.1.4.3. Avaliação dos parâmetros de turbulência

Durante a seção anterior ficou nítida a incapacidade do modelo numérico em representar o escoamento no *swirler*. Entretanto, essa incapacidade foi apenas diagnosticada e não foram apontadas as fontes das deficiências do modelo numérico.

A fim de avaliar as diferenças entre os resultados numéricos dos domínios completo e simplificado, foram avaliadas tensões de Reynolds e a taxa de dissipação ε em dois planos paralelos ao *swirler* para identificar a diferença nos regimes turbulentos em cada um dos modelos.

As Figura 44, 45 e 46 apresentam os valores de ε, viscosidade turbulenta e tensão principal de Reynolds na direção axial (VV) em um plano a 10 mm do *swirler*. Os valores de ε no modelo com *swirler* são bem mais elevados em comparação aos modelos sem *swirler*, enquanto os valores da tensão de Reynolds não demonstram diferenças tão elevadas. Na Figura 44, o valor de ε chega a ser 6 vezes maior, mostrando a grande diferença entre os resultados.

Figura 44 – Taxa de dissipação da energia cinética turbulenta (y = 10 mm)



Apesar do modelo RSM não utilizar a hipótese de Boussinesq, a viscosidade turbulenta é um parâmetro característico do regime turbulento e, nesse plano, há grandes diferenças entre os valores, conforme pode ser observado na Figura 45. Os baixos valores da viscosidade turbulenta implicam em baixa difusão por parte das tensões turbulentas. O principal efeito da difusão é a diminuição dos gradientes das propriedades do escoamento, porém, no caso dos modelos com *swirler*, a difusão foi subestimada e os gradientes sofreram decaimentos menos

acentuados. Esse efeito é nítido ao observar as Figuras 37 a 43, nas quais os gradientes dos modelos com domínio completo são muito mais elevados aos demais.

A baixa difusividade do modelo também explica a predição equivocada da componente axial da velocidade sobre a linha de centro. A quantidade de movimento que é transportada para a linha de centro em planos próximos ao *swirler* é menor do que a observada no experimento e, portanto, a velocidade na linha de centro só se torna positiva a uma distância maior do que a esperada, implicando na superestimativa das dimensões e velocidades da recirculação.

Figura 45 – Viscosidade Turbulenta (y = 10 mm)

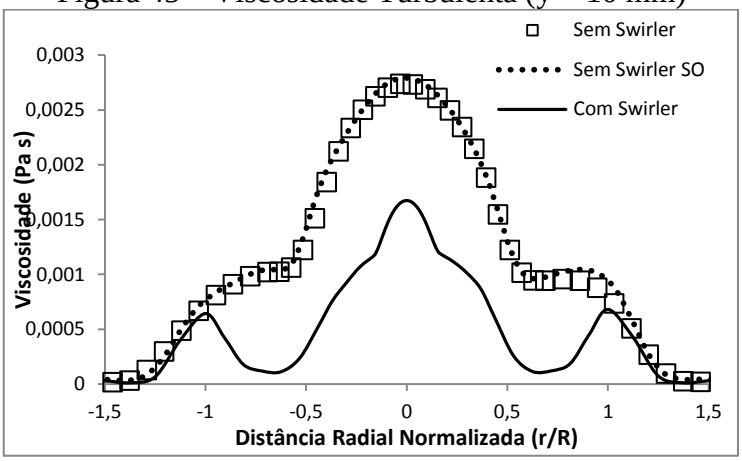
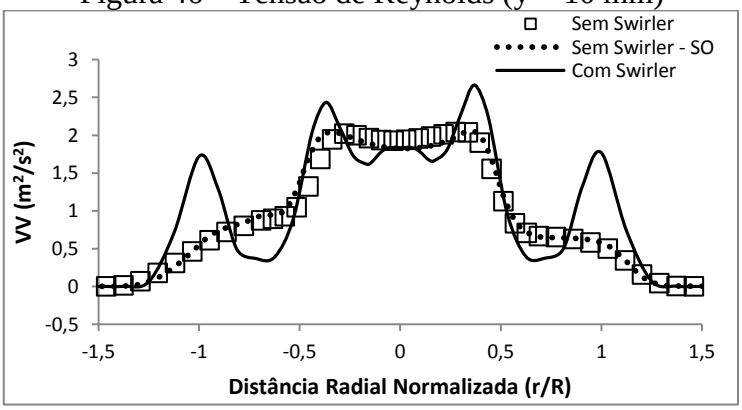


Figura 46 – Tensão de Reynolds (y = 10 mm)



As distribuições dessas propriedades em um plano a 40 mm do *swirler*, apresentadas nas Figuras 47, 48 e 49 ratificam as conclusões obtidas para o plano mais próximo. Os valores de ε foram superestimados, chegando a ser 4 vezes maiores. Essa superestimação da taxa de dissipação leva a uma baixa estimativa da viscosidade turbulenta, atenuando o processo de difusão das propriedades do escoamento. Neste plano, há um aumento das diferenças entre os

valores para a tensão de Reynolds VV. Entretanto, as diferenças da taxa de dissipação ainda são mais significativas, uma vez que as tensões chegam a ser 2 vezes maiores para os casos com *swirler*, enquanto as taxas de dissipação têm diferenças relativas muito maiores.

Figura 47 – Taxa de dissipação da energia cinética turbulenta (y = 40 mm)

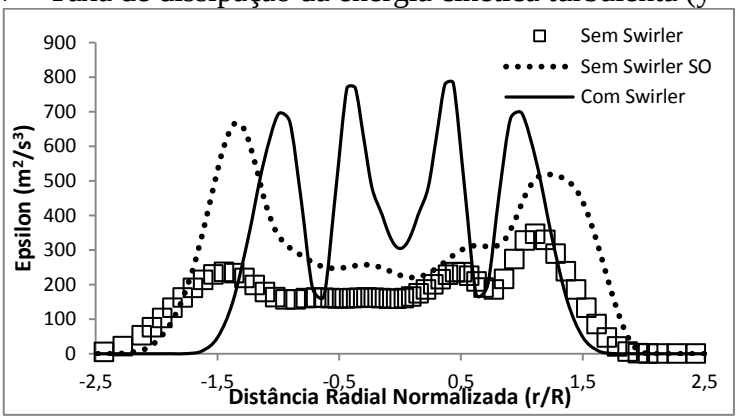


Figura 48 – Viscosidade Turbulenta (y = 40 mm)

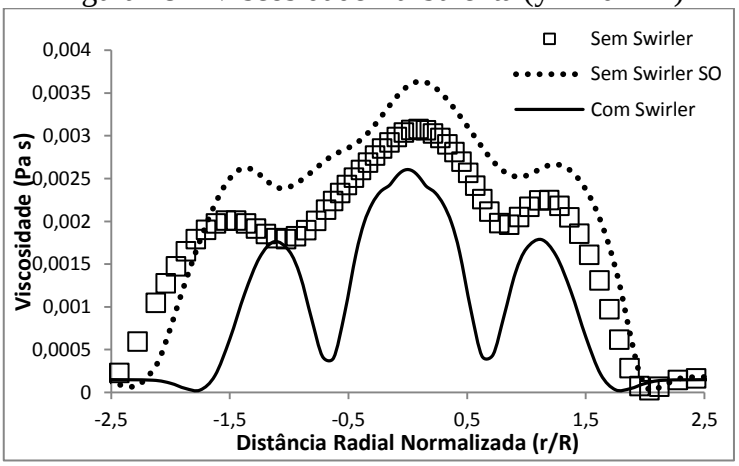
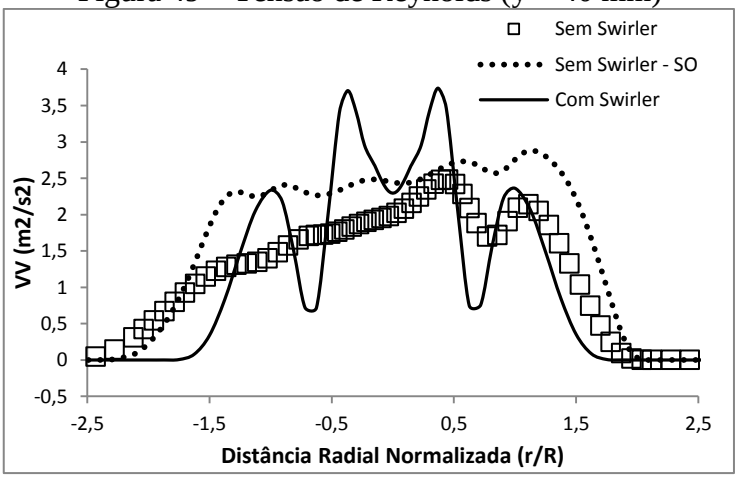


Figura 49 – Tensão de Reynolds (y = 40 mm)



Resumindo, a análise desses parâmetros turbulentos permitiu concluir que o modelo de turbulência não foi capaz de descrever o regime turbulento do escoamento no *swirler*. Conforme salientado na literatura (Versteeg e Malalasekera, 2007 e Wilcox, 1993), a taxa de dissipação da energia cinética turbulenta, ε, foi a principal fonte de problemas do modelo de turbulência. A superestimação dessa propriedade alterou a distribuição das tensões de Reynolds, que, por sua vez, atenuaram a difusividade do modelo numérico com domínio completo, levando as grandes diferenças observadas nas distribuições de velocidades na seção 4.1.3.

4.2. Escoamento reativo

O escoamento reativo introduz a fase líquida na simulação numérica, a qual será responsável pela inserção do combustível. Após a discussão do escoamento isotérmico, adotou-se o método de discretização *Upwind* de segunda ordem e a constante padrão da equação da taxa de dissipação da energia cinética turbulenta (ε) para o modelo RSM. Todas as simulações reativas foram realizadas com o domínio completo, apesar dos problemas discutidos na seção 4.1.3.

Os resultados para a fase líquida serão comparados com resultados experimentais obtidos em Fukumasu et al (2013). A caracterização experimental da fase líquida foi feita através do método PDPA (*Phase Doppler Particle Anemometry*), que disponibilizou informações de diâmetro médio de Sauter (*Sauter Mean Diameter*) das gotas e a velocidade das gotas.

Todas as simulações reativas foram desenvolvidas com o domínio completo. Conforme é descrito na seção 4.2.1, as medições foram feitos em um plano a 2 mm do plano de descarga *swirler*. Esta condição não poderia ser imposta na simulação com o domínio simplificado, uma vez que foram impostas as velocidades medidas pelo PIV começaram a uma altura de 3 mm acima do plano de injeção. Portanto, a simulação do escoamento reativo com o domínio simplificado não pode ser desenvolvida.

4.2.1. Condições de contorno

As condições de contorno da fase gasosa são as mesmas que foram apresentadas para o escoamento isotérmico (seção 4.1.2).

As condições de contorno da fase líquida foram obtidas de dados experimentais obtidos por Fukumasu et al. (2013). A imprecisão de medição do método PDPA para o diâmetro das gotas

foi de 0,1 μm, enquanto para a velocidade foi de 0,1 m/s. Esses valores foram obtidos diretamente do manual do fornecedor dos instrumentos de medição e servem como parâmetros para avaliação das diferenças entre o modelo numérico e os dados experimentais.

A descrição da fase líquida é extremamente sensível às condições de contorno do modelo, conforme salientado por Faeth (1983). Logo, uma definição robusta das condições de contorno é um ponto crucial para o desenvolvimento de modelos numéricos representativos do escoamento real.

Os dados experimentais de velocidade e diâmetro das gotas estão representados na Figura 50 e Figura 51, respectivamente, em função das coordenadas cartesianas x e z, perpendiculares a direção axial da configuração experimental e a uma distância de 2 mm do *swirler*. Apenas medições da componente axial da velocidade da gota foram medidas, portanto assumiu-se que as demais componentes eram desprezíveis. As medições pelo método PDPA disponibilizaram duas estimativas diferentes para o diâmetro das gotas: o diâmetro médio de Sauter, D_{32}, e o diâmetro médio obtido diretamente pelo PDPA, D_{10}. O diâmetro médio de Sauter define o diâmetro de acordo com a relação entre volume e área das gotas, enquanto o segundo método estima o diâmetro a partir da maior dimensão medida pelo PDPA para a gota. Neste trabalho, optou-se por utilizar o diâmetro médio de Sauter exatamente pelo fato dessa variável ser definida pela relação entre área e volume, parâmetros que serão considerados na descrição do processo evaporativo. É importante salientar que os dados apresentados nas Figura 50 e 51 são os dados brutos e não o método como as condições de contorno foram implantadas no software ANSYS FLUENT®.

Figura 50 – Distribuição das velocidades das gotas em plano horizontal distante 2 mm do *swirler*

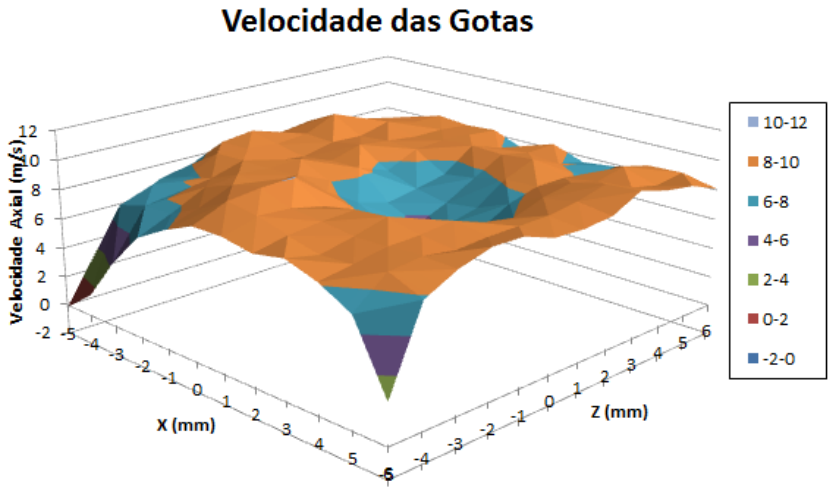
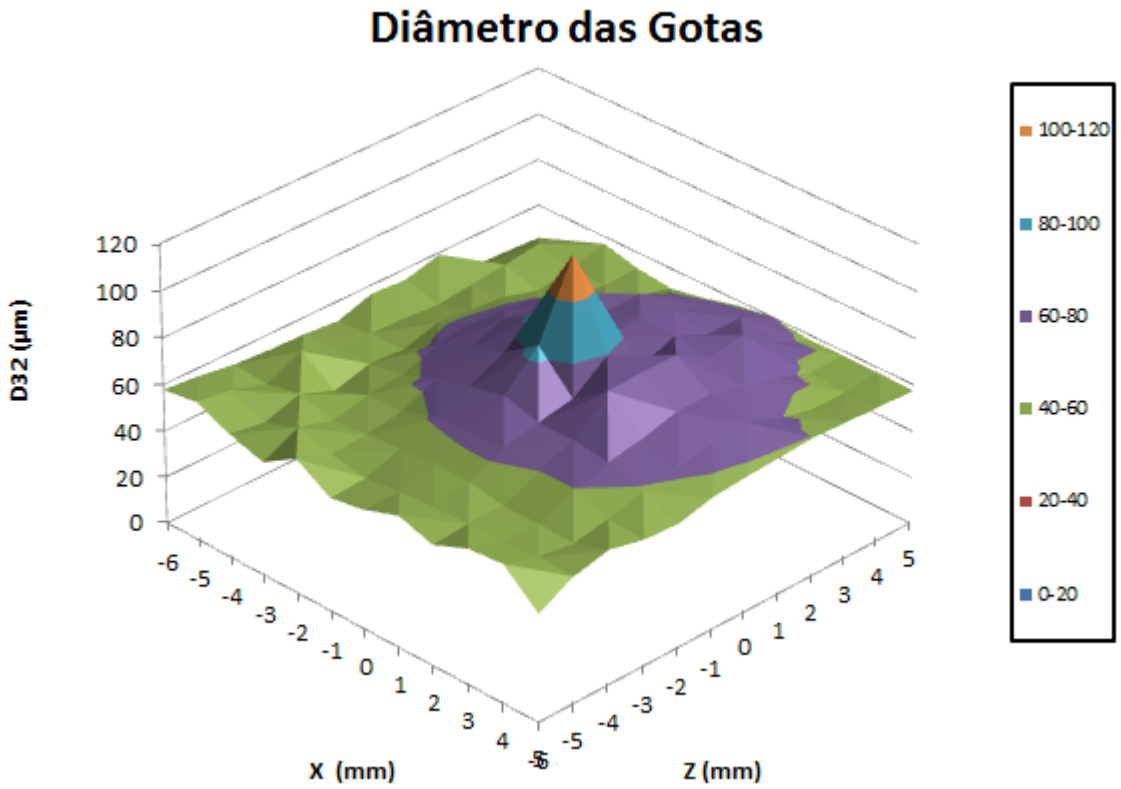


Figura 51 – Distribuição do diâmetro médio de Sauter (SMD) das gotas em plano horizontal distante 2 mm do *swirler*



A partir dos dados experimentais, foram definidos dois métodos para a injeção da fase gasosa. Os dois métodos impuseram superfícies a partir das quais as partículas são injetadas no domínio de controle. O primeiro definiu 9 superfícies com características distintas de injeção, enquanto o segundo definiu 25 superfícies.

A posição do primeiro método com 9 superfícies está apresentada na Figura 52. As definições das condições de contorno para cada uma das superfícies são apresentadas na Tabela 11. A posição do segundo método com 25 superfícies é apresentada pela Figura 53. Enquanto as condições de contorno são apresentadas na Tabela 12.

As Tabela 11 e Tabela 12 mostram os diâmetros médios considerados para cada superfície de injeção. Este trabalho desconsiderou uma distribuição de diâmetros para a injeção das gotas, o que terá impacto nos resultados obtidos para a fase líquida.

Neste trabalho, utilizou-se a hipótese de que a vazão mássica é igualmente distribuída pelas superfícies. Para cada uma das superfícies do primeiro método, foi especificada a vazão de 48,5 mg/s para cada uma das superfícies. Para cada uma das superfícies do segundo método, foi especificada a vazão de 17,5 mg/s. A falta de informações levou a essa simplificação, a qual não representa precisamente o experimento e o impacto dessa hipótese será avaliado pelos resultados apresentados na seção 4.2.2.

Figura 52 – Representação gráfica das superfícies (primeiro método) – Unidades em mm

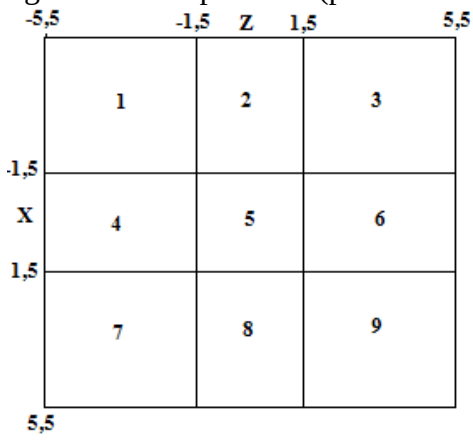


Figura 53 – Representação gráfica das superfícies (segundo método) – Unidades em mm

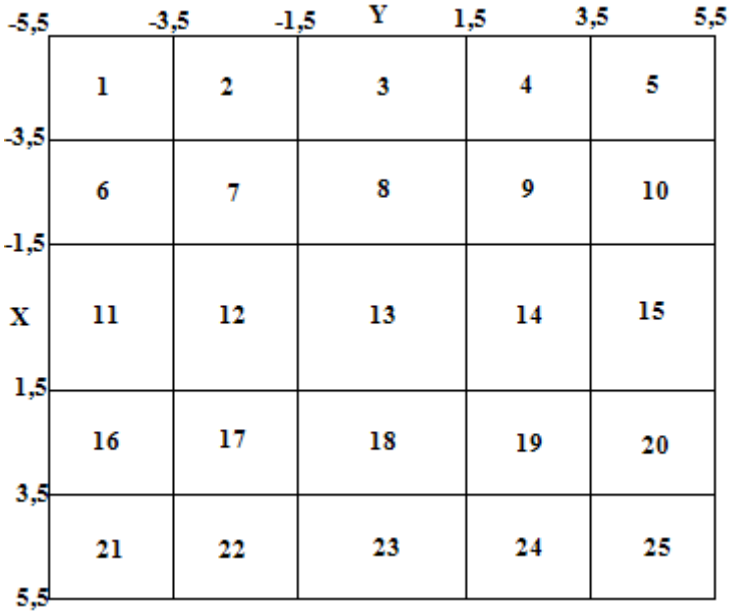


Tabela 11 – Condições de contorno das superfícies de injeção (primeiro método)

Superficie	Diâmetro (μm)	Velocidade Axial (m/s)
1	55,1	7,2
2	60,4	8,4
3	55,1	8,3
4	59,1	9,0
5	79,7	6,5
6	66,6	8,1
7	55,8	8,8
8	65,6	8,3
9	60,9	8,6

Tabela 12 – Condições de contorno das superfícies de injeção (segundo método)

Superfície	Diâmetro (μm)	Velocidade Axial (m/s)
1	55,1	7,9
2	57,9	8,7
3	55,1	8,7
4	60,0	8,7
5	70,7	7,9
6	60,0	8,7
7	55,1	8,7
8	60,0	8,3
9	70,7	8,7
10	79,7	8,7
11	70,7	8,7
12	60,0	8,3
13	55,1	6,5
14	60,0	8,3
15	70,7	8,7
16	60,0	8,7
17	55,1	8,7
18	57,9	8,7
19	55,1	8,7
20	60,0	8,7
21	55,1	7,9
22	57,9	8,7
23	60,0	8,7
24	55,1	8,7
25	57,9	7,9

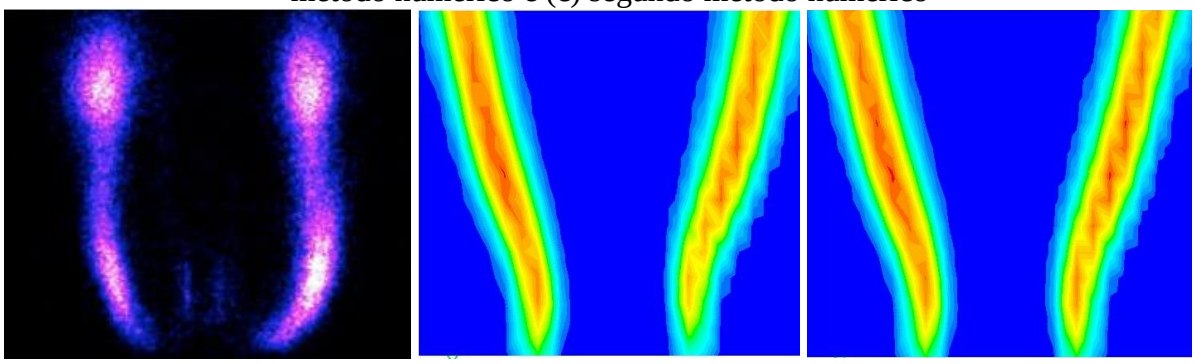
4.2.2. Resultados

Os resultados serão discutidos através da comparação com resultados experimentais obtidos por Fukumasu et al. (2013). Através dos métodos LIF-OH e PDPA, foram disponibilizados resultados d a formação de OH e da caracterização da velocidade axial e diâmetro médio de Sauter, D_{32}. Outros parâmetros serão discutidos de forma qualitativa, baseados nos modelos empregados, sem validação experimental.

O método LIF-OH localiza as regiões de maior concentração de OH através da radiação luminosa característica emitida por essa espécie química. Fukumasu et al. (2013) obteve esses resultados para uma janela de medição de 80 mm na direção horizontal e 80 mm na direção vertical. O método LIF obtém imagens instantâneas do escoamento, entretanto os resultados numéricos apresentam resultados médios. Para permitir a comparação qualitativa entre os resultados, os resultados numéricos foram comparados com uma imagem média definida pela composição de imagens instantâneas obtidas pelo método LIF-OH. Os resultados experimentais e numéricos para essa região do escoamento estão apresentados na Figura 54.

Os métodos numéricos caracterizam de forma semelhante a formação de OH nessa região, mostrando que, neste ponto, não houve diferença de representatividade entre os modelos. Entretanto, a comparação entre os resultados numéricos e os resultados experimentais permite concluir que a região próxima ao *swirler* apresenta descrições bem diferentes. Logo, após a seção de descarga, a região de formação da espécie OH está próxima do diâmetro interno do *swirler* tanto no experimento quanto nos resultados do modelo numérico. Entretanto, no experimento, essa região se desloca na direção radial logo após a entrada do ar, enquanto, no resultado numérico, isso começa a ser observado a uma distância axial maior e com menor intensidade.

Figura 54 – Resultados de fração mássica de OH para (a) método LIF-OH, (b) primeiro método numérico e (c) segundo método numérico



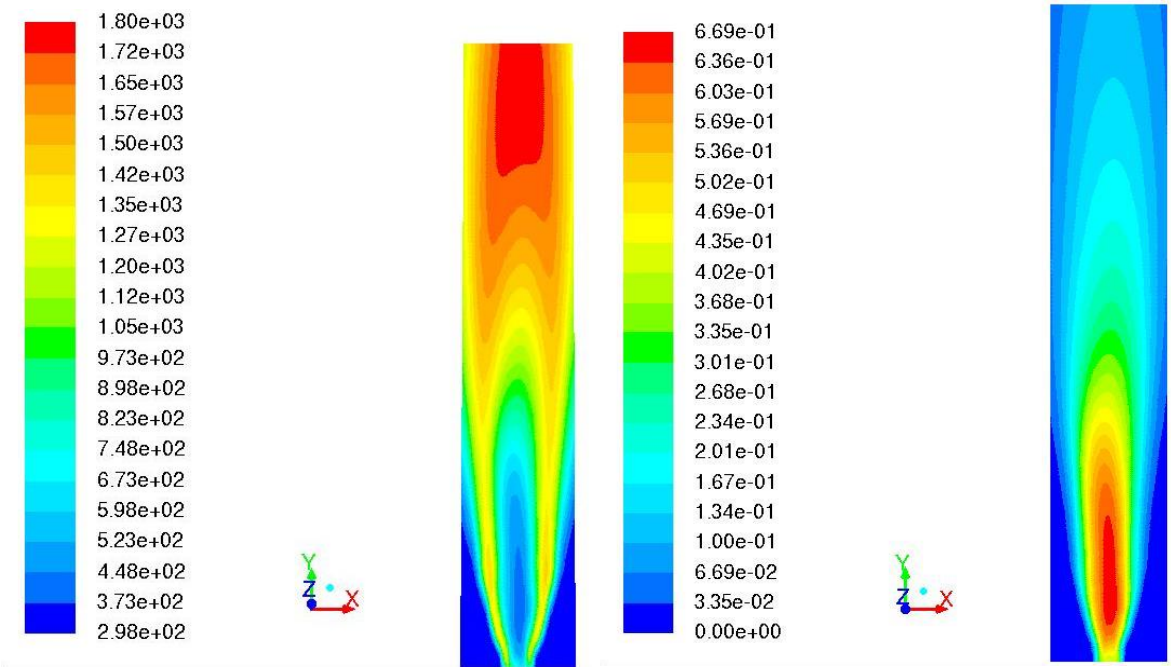
As diferenças são principalmente atribuídas aos problemas observados para a descrição numérica do escoamento da fase gasosa. As análises feitas na seção 4.1.3 mostraram que o modelo de turbulência foi incapaz de caracterizar precisamente o campo de velocidades de forma adequada, devido a baixa difusividade descrita pela modelo. A baixa difusividade tem impacto na distribuição da fração de mistura, a qual caracteriza o processo e também terá sua difusividade subestimada. Portanto, é esperado que, devido à baixa difusividade, a região de fração de mistura estequiométrica não seja bem representada.

Além disso, a hipótese de vazão igualmente distribuída entre as superfícies de injeção e a injeção de partículas com diâmetro constante não caracterizaram corretamente a distribuição do spray, o que leva a um erro na estimativa da evaporação da gota e, portanto, nos termos fontes das equações de transporte da fase gasosa.

Logo, a deficiência na descrição da formação da espécie química OH pode ser atribuída à incapacidade do modelo de turbulência em descrever corretamente o escoamento isotérmico e às simplificações assumidas nas condições de contorno da fase líquida.

As distribuições de temperatura e fração de mistura para o primeiro método são apresentadas na Figura 55. A distribuição de fração de mistura está coerente, pois há um núcleo rico em combustível na região da linha de centro, mostrando que o modelo de evaporação das gotas está funcionando corretamente e que a simulação pode ser aproximada por um modelo de chama difusiva. A distribuição de temperatura tem duas regiões bem distintas. A parte superior tem temperaturas elevadas, enquanto a região inferior, próxima à região do núcleo do spray, é menor. Essa diferença é explicada pelo modelo de combustão utilizado. O modelo *flamelet* não-adiabático é descrito em função das variáveis fração de mistura, entalpia e taxa de dissipação. Os valores de temperatura na zona de reação decrescem com aumento da troca de calor da fase gasosa para a fase líquida e com aumento da taxa de dissipação.

Figura 55 – Distribuições de: (a) temperatura; (b) fração de mistura



A Figura 56 apresenta os valores de taxa de dissipação para uma isossuperfície de fração de mistura estequiométrica. A taxa de dissipação é maior na região próxima ao *swirler* e, portanto, são esperadas temperaturas menores nessa região.

A Figura 57 apresenta a transferência de calor da fase líquida para a fase gasosa. Os valores positivos representam transferência de calor da fase líquida para a fase gasosa, enquanto os valores negativos representam transferências da fase gasosa para a fase líquida. Há predominância da transferência de calor da fase gasosa para a fase líquida, sendo que a maior transferência de calor ocorre na região inferior da chama. De fato, esse resultado era esperado,

pois essa é a região de alta concentração do spray, na qual o resfriamento evaporativo é mais intenso e, portanto, a região onde a chama transferi mais calor para a evaporação do spray.

Figura 56 – Distribuição de taxa de dissipação sobre a zona de reação para: (a) primeiro método; (b) segundo método

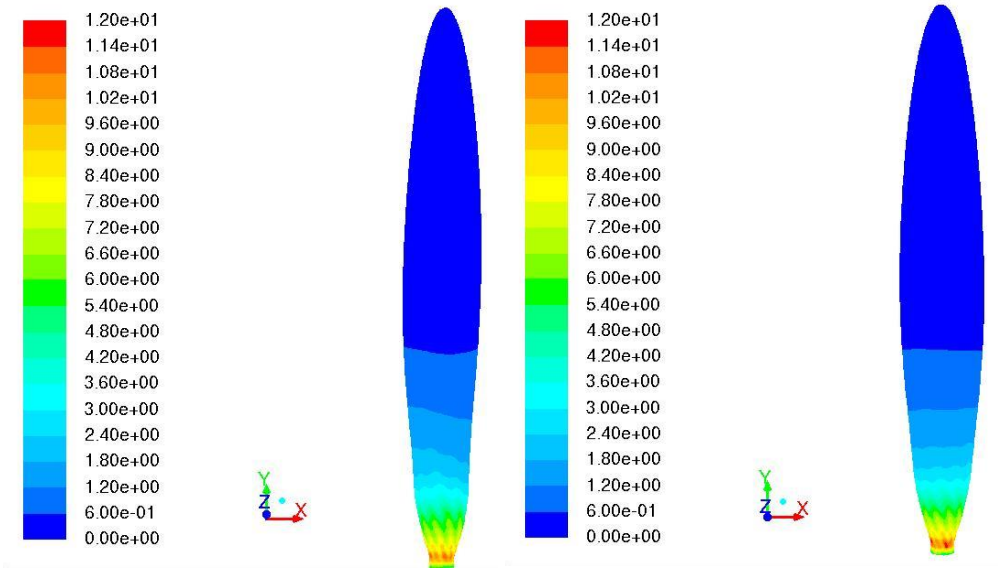
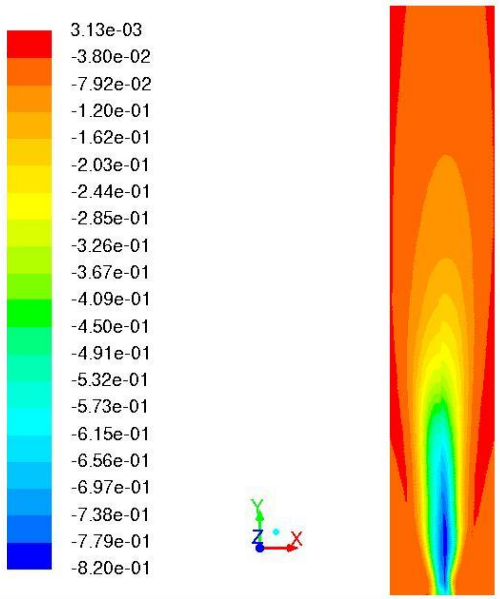


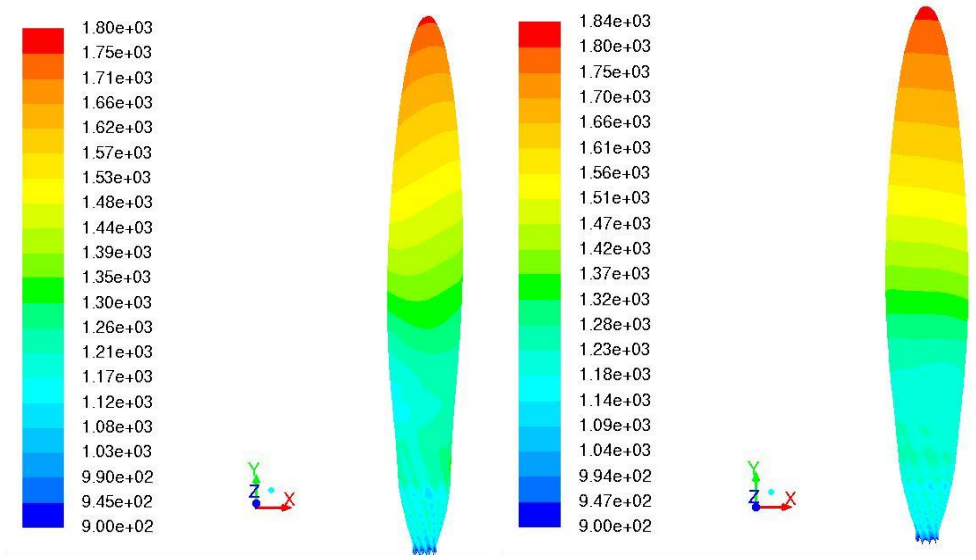
Figura 57 – Transferência de calor da fase líquida para a fase gasosa



A combinação de alta transferência de calor para a fase líquida e de maiores taxas de dissipação levaram a menores temperaturas na região inferior da zona de reação. As temperaturas próximas à zona de reação estão apresentadas na Figura 58. De fato são observadas menores temperaturas na parte inferior da chama, comprovando que o modelo de combustão funciona de acordo com o proposto. Entretanto, não podem ser avaliadas as

imprecisões e deficiências do modelo, uma vez que não estão disponíveis dados experimentais de temperatura e frações mássicas das espécies químicas, além do método LIF–OH.

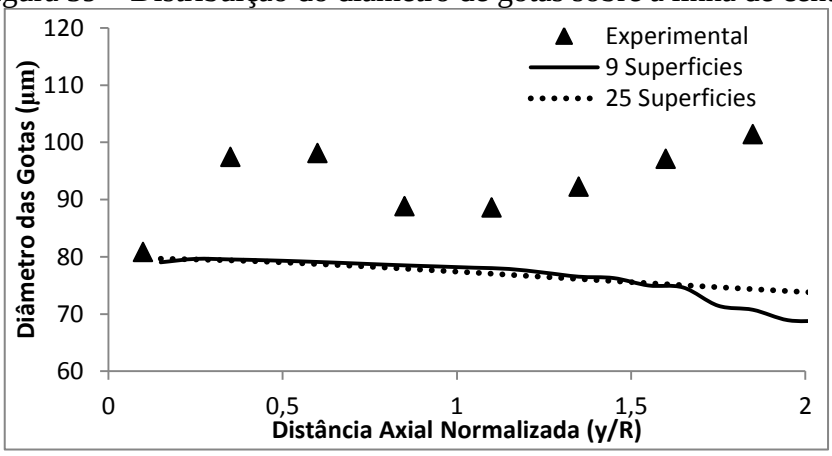
Figura 58 – Distribuição de temperatura sobre a zona de reação para: (a) primeiro método; (b) segundo método



Os métodos experimentais PDPA (*Phase Doppler Particle Anemometry*) permitem avaliar a velocidade axial e o diâmetro médio de Sauter das partículas, D_{32}, nos pontos de aquisição. Neste caso, foram disponibilizados os dados experimentais para a linha de centro do domínio, e dois planos distantes 10 e 20 mm da face de descarga do *swirler*.

A Figura 59 apresenta a distribuição dos diâmetros médios das gotas para o método numérico e para o experimental sobre a linha de centro.

Figura 59 – Distribuição do diâmetro de gotas sobre a linha de centro



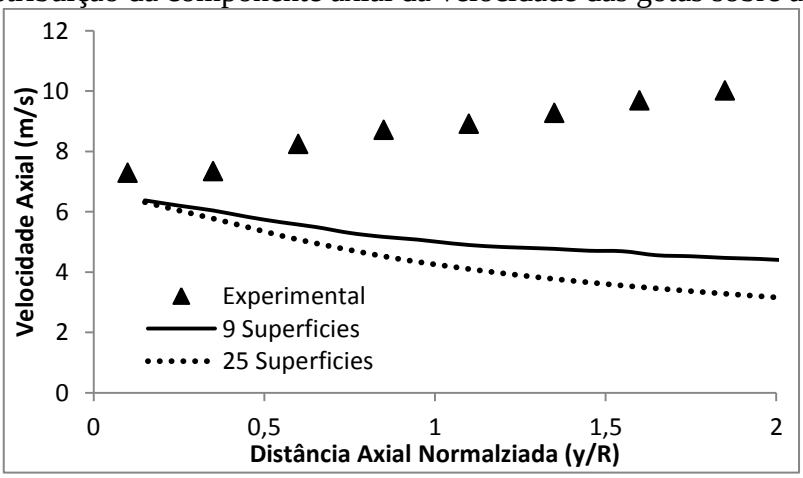
Os dois modelos numéricos apresentam resultados semelhantes e condizentes com as hipóteses utilizadas. Os diâmetros médios das gotas diminuem conforme se distanciam da face de injeção. Esse comportamento é explicado pelo processo de evaporação das gotas, que fazem com que o diâmetro de uma gota diminua de tamanho com o incremento do seu tempo de residência. Entretanto, os resultados experimentais mostram o comportamento oposto, pois o diâmetro médio das gotas aumenta com a coordenada axial na nessa região.

De fato, o diâmetro de uma gota diminui com a distância na direção axial no experimento. Entretanto, as gotas de menor diâmetro evaporam rapidamente e não contribuem mais para o cálculo da média. Logo, a média aumenta, apesar do diâmetro de cada gota diminuir. Esse fenômeno não pode ser observado nos resultados numéricos, pois não foi imposta uma distribuição de diâmetros nas condições de contorno da fase gasosa.

As simplificações aplicadas durante a definição das condições de contorno tiveram grande impacto na simulação, a qual não descreveu o mesmo comportamento do experimento. Isso é claramente observável ao comparar os resultados experimentais com as condições de contorno. As condições de contorno foram fixadas em um diâmetro médio, sem considerar uma distribuição de diâmetros. Ao analisar os resultados experimentais, observa-se que há diâmetros maiores do que os impostos na simulação numérica, o que não poderia ser previsto pela simulação numérica que permite apenas a diminuição do diâmetro médio através do resfriamento evaporativo. Desta forma, fica evidente a necessidade da imposição de distribuição de diâmetros ao invés de apenas um diâmetro médio.

A Figura 60 apresenta a distribuição da componente axial da velocidade das gotas sobre a linha de centro.

Figura 60 – Distribuição da componente axial da velocidade das gotas sobre a linha de centro



A distribuição da componente axial da velocidade das partículas mostra comportamento oposto entre os resultados experimentais e numéricos.

O método numérico emite gotas de diâmetro constante com velocidade prescrita. A velocidade dessas gotas diminui com a coordenada axial devido à ação da força de arrasto entre as duas fases nos regiões próximas aos planos de injeção. Essa queda da velocidade é esperada, uma vez que o sentido da velocidade axial das gotas é oposto ao da fase gasosa, e também é esperada uma superestimação dessa queda no modelo numérico também, pois há uma superestimação da recirculação da fase gasosa sobre a linha de centro. Conforme analisado na Figura 24, entre as coordenadas axiais normalizadas 0 e 2, os módulos das velocidades axiais são muito maiores do que no experimento, mais especificamente há uma diferença média de 2,5 m/s. Portanto, pode se afirmar que, até a posição 0,5, de fato o arrasto é maior e explica a diferença entre resultados medidos e previstos numericamente. Entretanto, para as regiões mais afastadas, o modelo numérico apresenta arrasto menor do que o experimento, uma vez que as velocidades relativas são menores. Logo, este é apenas um dos fatores que determinam a diminuição da velocidade ao longo da linha de centro.

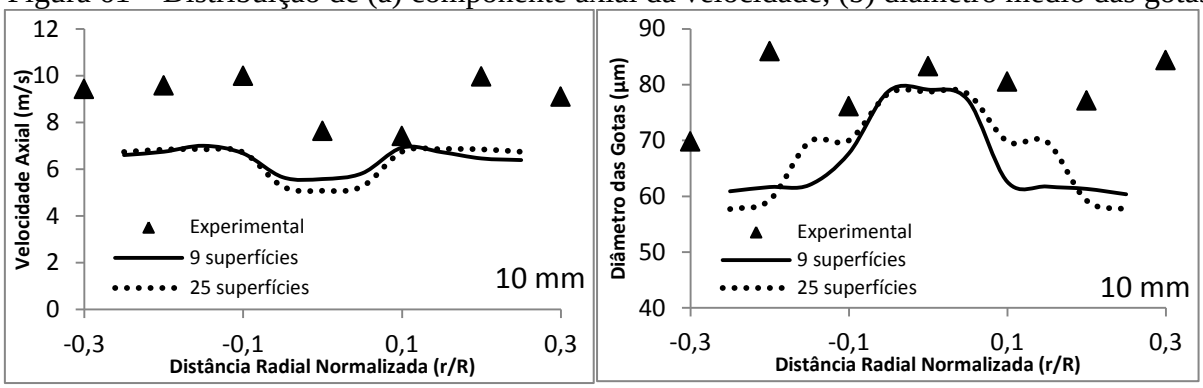
Outro fator provém dos resultados de Fukumasu et al. (2013). As partículas do spray, no experimento, têm diferentes velocidades e as partículas emitidas com maior velocidade têm maior penetração no domínio de cálculo e, portanto, as partículas de menor velocidade ficam mais tempo na região próxima ao *swirler*, podendo até ficar retidas nessa região. Entretanto, ao ficarem retidas nessa região, diminuem a velocidade média das partículas nessa região, enquanto as velocidades médias para maiores coordenadas axiais consideram apenas as partículas com velocidades maiores e com maior penetração.

A discussão acima propõe que a grande dificuldade do modelo é vinculada à simplificação da condição de contorno que limita a prescrição de apenas uma velocidade média e não considera uma possível distribuição de velocidades.

A Figura 61 apresenta os resultados da distribuição da componente axial da velocidade e da distribuição do diâmetro médio das gotas em um plano horizontal distante 10 mm da seção de descarga do *swirler*.

A componente axial da velocidade é menor próxima à linha de centro. A componente axial da velocidade das gotas é menor nos modelos numéricos. Conforme observado para a Figura 60, essas diferenças são atribuídas às deficiências na descrição da fase gasosa, que superestimaram o arrasto da fase líquida, e as simplificações adotadas para ascondições de contorno da fase líquida.

Figura 61 – Distribuição de (a) componente axial da velocidade, (b) diâmetro médio das gotas

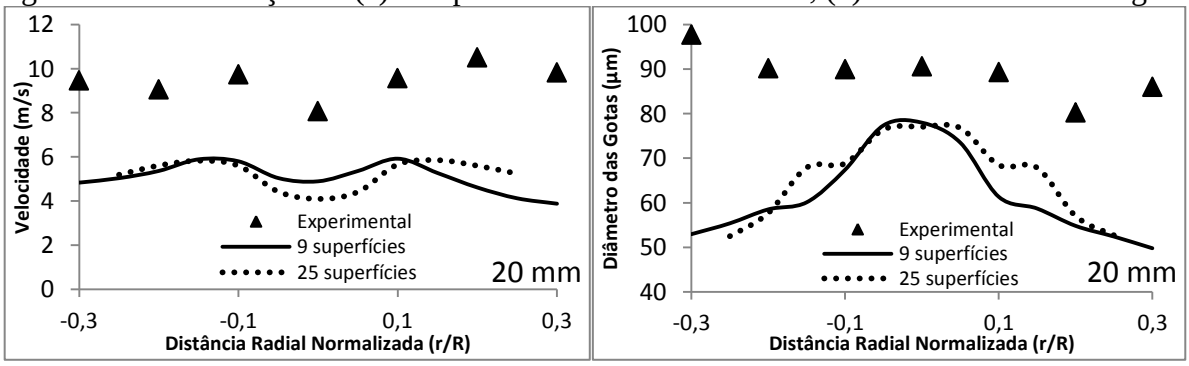


A distribuição do diâmetro médio das partículas está mais próxima da distribuição obtida pelos resultados experimentais na região próxima à linha de centro, entretanto, conforme observado na Figura 59, há uma diferença significativa. A diferença entre o modelo numérico utilizando o segundo método e o experimento para a coordenada normalizada igual a 0 é de 8%. Entretanto, ao se afastar dessa região, as diferenças entre os resultados experimentais e os resultados numéricos aumentam, fato observado nas abscissas -0,2 e 0,2, nos quais as diferenças chegam a ter 30% e 23 % respectivamente.

A forma discreta das condições de contorno da fase líquida parece influenciar sobre os resultados da distribuição de gotas no domínio, conforme pode ser observado na Figura 61. Isso é evidente pela diferença entre as curvas obtidas para cada método. Porém, os dois métodos apresentam diferenças elevadas em relação ao experimento nas regiões do spray mais afastadas da linha de centro. Já, para a velocidade axial das gotas, a alteração do método de especificação das condições de contorno teve pouca influência.

A Figura 62 apresenta os resultados da distribuição da componente axial da velocidade e da distribuição do diâmetro médio das gotas em um plano horizontal distante 20 mm da seção de descarga do *swirler*.

Figura 62 – Distribuição de (a) componente axial da velocidade, (b) diâmetro médio das gotas



Assim, como observado para o plano 10 mm distante do *swirler*, a componente axial da velocidade das gotas é menor na região da linha de centro. Entretanto, a diferença entre as velocidades medidas e as velocidades previstas é ainda maior, apresentando em média um erro de 45%. A superestimação da velocidade da fase gasosa na região próxima à linha de centro superestima a força de arrasto nos planos próximos ao plano de injeção das partículas. As partículas em planos mais afastados tem maior tempo de residência e, portanto, tem maior desaceleração, o que explica o maior desvio encontrado nesse plano.

A distribuição do diâmetro apresenta o mesmo comportamento que observado no plano a 10 mm do *swirler*.

Os resultados da Figura 62 apenas corroboram as conclusões sobre o método de imposição de contorno das condições de contorno da fase líquida, já destacadas ao analisar os resultados apresentados na Figura 61.

5. Conclusões

Esta dissertação objetivou a descrição de chamas de spray de etanol utilizando elemento de chama laminar e modelo de transporte das tensões de Reynolds.

A opção pelo modelo do transporte das tensões de Reynolds fundamentou-se nas características do escoamento do experimento, o qual é helicoidal (*swirling flows*). A utilização do modelo k-ε padrão não era apropriada para a descrição deste escoamento, por isso utilizou-se o RSM, o qual é caracterizado por ser o modelo com maior potencial de descrição dentre os modelos RANS (Versteeg e Malalasekera, 2007).

A modelagem do spray foi feita através do método SSF, o qual considera a influência das flutuações da turbulência sobre a fase líquida. O modelo DRW foi escolhido como o método de dispersão turbulenta para descrever a interação entre a flutuação da fase gasosa e a dispersão da fase líquida. O processo de evaporação foi modelado por um modelo de estágios híbrido, em que se considera que a evaporação pode ser descrita por 3 estágios distintos.

O modelo de elementos de chama laminar (modelo *flamelet*) se apresenta como uma evolução dos modelos *flamesheet* e de equilíbrio, uma vez que considera um mecanismo de reação química. Esse modelo apresenta uma vantagem significativa em relação aos demais citados, é possível a comparação direta com resultados experimentais de LIF-OH e não indiretamente pela temperatura.

O estudo do escoamento isotérmico permitiu concluir que o modelo de turbulência RSM não descreveu adequadamente o escoamento no *swirler*. As diferenças dos resultados numéricos utilizando o domínio completo e o domínio simplificado mostraram que a taxa de dissipação da energia cinética turbulenta foi superestimada o que afetou a difusividade do modelo numérico. Como decorrência dessa deficiência, o modelo numérico com domínio completo superestimou a recirculação sobre a linha de centro, o que fica evidente pelas altas velocidades do modelo numérico em relação aos resultados experimentais pelo método PIV.

A alteração dos métodos de discretização para métodos de maior ordem avaliaram a difusividade numérica e permitiu concluir que a difusividade numérica não alterou significativamente os resultados. Foi proposta uma alteração no coeficiente $C_{2,\varepsilon}$ da equação da taxa de dissipação de energia cinética turbulenta. Essa alteração também não alterou substancialmente os resultados.

Desta forma, atribuíram-se as deficiências na descrição do escoamento isotérmico à incapacidade do modelo de turbulência em descrever este tipo de escoamento, mais

especificamente o escoamento na região do *swirler*, onde a taxa de dissipação foi superestimada.

Os resultados numéricos para o escoamento reativo foram comparados com resultados experimentais. O método LIF foi utilizado para comparar as regiões de formação de OH. A comparação entre os resultados mostrou que o modelo numérico representou uma região de formação de OH diferente da experimental. As diferenças observadas foram atribuídas aos problemas na descrição do escoamento isotérmico e das simplificações das condições de contorno da fase gasosa. Entretanto, não foi possível definir qual deles foi o fator preponderante.

A discussão qualitativa do modelo de combustão definiu que a chama tem temperaturas menores próximas à seção de descarga do spray. Este fato á atribuído ao efeito do resfriamento evaporativo e das taxas de dissipação escalar. Nessa região, são observadas as maiores taxas de transferência de calor entre as fases líquida e gasosa e as maiores taxas de dissipação escalar, ambos contribuem para a diminuição das temperaturas da chama. Desta forma, é possível concluir que o modelo de elementos de chama laminar aplicado é coerente e o resfriamento evaporativo foi empregado de forma correta. Entretanto, a precisão do modelo não pôde ser avaliada, pois não há dados da temperatura da chama e as imagens do método LIF-OH permitem avaliações qualitativas.

As comparações entre resultados experimentais obtidos pelo método PDPA e os dos modelos numéricos demonstraram que a distribuição uniforme de diâmetro das gotas como condição de contorno era insuficiente e não permitia a descrição do escoamento do spray com maior precisão. Portanto, a precisão do modelo numérico para escoamentos reativos foi principalmente limitada pela simplificação das condições de contorno da fase líquida.

A seguir, são sugeridos temas e tópicos para maior desenvolvimento dos tópicos estudados neste trabalho.

5.1. Sugestões de continuação deste trabalho

Dentro de seu escopo o trabalho apresentou duas grandes dificuldades: a representação dos fenômenos turbulentos através do RSM e a modelagem da combustão de sprays turbulentos através do modelo *flamelet*.

O RSM não se mostrou adequado para caracterizar o escoamento estudado e, portanto, sugere-se a utilização de modelos filtrados (LES) para melhor representação do escoamento desta chama. Outra sugestão é um estudo específico do escoamento isotérmico com o mesmo

modelo de turbulência, o RSM. Porém, propõe-se um estudo para verificar a sensibilidade do modelo as constantes de ajuste e alteração da modelagem da dissipação. Foi possível concluir que a modelagem da taxa de dissipação não foi adequada. Portanto, propõe-se o estudo comparativo entre as duas principais modelagens da dissipação da energia cinética, equação de transporte de ε e equação de transporte de ω.

Em relação ao modelo de combustão, sugere-se que seja realizado um estudo comparativo entre os modelos FGM (Chrigui et al. 2012) e de elementos de chamas laminares. Essa comparação, juntamente com dados experimentais, permitiria avaliar as diferenças entre os modelos e verificar a validade dos modelos a chamas de etanol.

Neste trabalho, utilizou-se a função β-PDF para definição dos valores médios das variáveis reativas. Ge e Gutheil (2008b) defendem que a utilização do método das PDF's transportadas apresentam melhores resultados. Portanto, um estudo comparativo entre os métodos para a chama estudada é uma proposta para a continuação desse trabalho.

O impacto da turbulência sobre as taxas de transporte entre as fases é negligenciado na maioria dos trabalhos desenvolvidos até hoje. Alguns trabalhos, como o de Apte et al (2009), tentam modelar esse efeito, mas apenas para escoamentos evaporativos e não reativos. Portanto, é uma área que ainda precisa de estudos para descrever melhor processos evaporativos e processos de combustão turbulentos.

Seguem propostas de temas de trabalhos que proporcionariam avanços na área de modelagem de sprays turbulentos de etanol:

- Avaliação Paramétrica do Modelo das Tensões de Reynolds Aplicado a Escoamentos Helicoidais
- Simulação de escoamentos helicoidais aplicando Modelo das Tensões de Reynolds e diferentes modelagens para a taxa de dissipação da energia cinética turbulenta
- Simulação das Grandes Escalas de Escoamentos Helicoidais
- Simulação das Grandes Escalas de Sprays de Etanol utilizando o método das β-PDF e o método das PDF's transportadas
- Simulação das Grandes Escalas de Sprays de Etanol utilizando o modelo de combustão FGM
- Modelagem de sprays turbulentos de etanol utilizando o modelo de combustão FGM
- Modelagem de sprays turbulentos considerando o impacto da turbulência sobre as taxas de transporte entre as fases

6. 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.

ANSYS FLUENT, 2012, "User's guide". User's guide of the software FLUENT version 13.0

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.

BAXTER, L. L., SMITH, P. J., 1993, "Turbulent dispersion of particles: the STP model", Energy & Fuels, Vol 7, pp 852-859.

BIROUK, M., GÖKALP, I., 2006, "Current status of droplet evaporation in turbulent flows", Progress in Energy and Combustion Science, Vol 32, pp. 408-423.

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, 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., 2005, "Eulerian-lagrangian approach for modeling and simulations of turbulent reactive multi-phase flows under gas turbine combustor conditions", Tese (Doutorado) – Universidade Técnica de Darmstadat, Darmstadt, Alemanha.

CHRIGUI, M., J., HAGE, M., DREIZLER, A., SADIKI, A., JANICKA, J., 2009, "Experimental and numerical analysis of spray dispersion and evaporation in a combustion chamber", Atomization and Sprays, Vol.19, pp. 929-955.

CHIRGUI M., GOUNDER, J., SADIKI, A., MASRI, A., JANICKA, J. 2012, “Partially premixed reacting acetone spray using LES and FGM tabulated chemistry”, Combustion and Flame, Vol 159, pp 2718-2741

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.

CROWE, C. T., TROUTT, T. R., CHUNG, J. N., 1996, “Numerical models for two-phase turbulent flows”, Journal of Fluid Mechanics, Annual Review, Vol. 28, pp. 11 -43.

CUENOT, B., POINSOT, T., 1994, “Effects of curvature and unsteadiness in diffusion flames. Implications for turbulent diffusion combustion”, 25th International Symposium on Combustion/The Combustion Institute, pp 1383-1390

DALY, B. J., HARLOW, F. H., 1970, “Transport equations in turbulence”, Physics of Fluids, Vol 13, pp 2634-2649.

DEMÉTRIO, M. J. E., 2013, “Desenvolvimento de Mecanismos Cinéticos Reduzidos para Combustão de Etanol”, Dissertação (Mestrado) - Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, Brasil.

DIXON-LEWIS, G., 1990, “Structure of laminar flames”, 23th International Symposium on Combustion/The Combustion Institute, pp 305-324.

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.

ECHEKKI, T., MASTORAKOS, E., 2011, “Turbulent combustion modeling”, Springer, Nova York, USA, 490p.

FAETH, G. M., 1977, “Current status of droplet and liquid combustion”, Progress in Energy and Combustion Science, Vol.3, pp. 191-224.

FAETH, G. M., 1983, “Evaporation and combustion of sprays”, Progress in Energy and Combustion Science, Vol.9, pp. 1-76.

FAETH, G. M., 1987, “Mixing transport and combustion in sprays”, Progress in Energy and Combustion Science, 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, 2013. Disponível em< http://www.sandia.gov/TNF/DataArch/FlameD.html > Acessado em 05 de abril de 2013

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.

FUKUMASU, N. K., FILHO, G. C. K., YANAGIHARA, J. I., 2013, “Experimental characterization of ethanol pulsed flames on an open swirler burner”, 6th European Combustion Meeting, 2013, Malmo, Suécia.

GE, H.-W., GUTHEIL, E., 2008a “Simulation of a turbulent spray flame using coupled PDF gas phase and spray flamelet modeling” Combustion and Flames, Vol 153, pp. 173-185.

GE, H.-W.,GUTHEIL, E., 2008b, “Joint PDF Modeling of non-reacting and reacting turbulent spray flows”, 19th National ISHMA T-ASME Heat and Mass Transfer Conference, paper UG-017, pp. 1-10.

GE, H. W., YOUNG, H., GUTHEIL, E., 2012: “Joint gas-phase velocity-scalar PDF modeling for turbulent evaporating spray flows”, Combustion Science and Technology, Vol1 84: pp. 1664-1679

GOUNDER, J. D., STARNER, S. H., MASRI, A. R., 2006, “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 and Fuels, Vol. 15, pp. 1207 – 1212.

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.

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”, International Symposium on Combustion, Vol. 17, pp. 421-430.

JONES, W. P., WHITELAW, J. H., 1982, “Calculation of turbulent reacting flows: A review”, Combustion and Flame, Vol. 48, pp. 1-26.

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.

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.

LAUNDER, B. E., SPALDING, D. B., 1974, “The numerical computations of turbulent flows”, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, Vol. 3, pp. 269-289.

LEPLAT, N., DAGAUT, P., TOGBÉ, C., VANDOOREN, J., 2011, “Numerical and experimental study of ethanol combustion and oxidation in laminar premixed flames and jet-stirred reactor”, Combustion and Flames, Vol. 158, pp 705-725.

LI, K., ZHOU, L. X., 2012, “Studies of the effect of spray inlet conditions on the flow and flame structures of ethanol-spray combustion by large-eddy simulation”, Numerical Heat Transfer, Part A: Applications: An International Journal of Computation and Methodology, Vol 62, pp. 44-59

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 kinectics mechanism for high temperature ethanol oxidation”, Journal of Chemical Kinectics, Vol.31, pp. 183-220.

MASRI, A. R., GOUNDER, J. D., 2009, “Turbulent spray flames of acetone and ethanol approaching extinction”, Combustion Science and Technology, Vol 182, pp 702-715.

MUNTEAN, S., RUPRECHT, A., SUSAN-RESIGA, R., 2005a, “A numerical investigation of the 3D swirling flow in a pipe with constant diameter. Part 1: inviscid computation”, Workshop on Vortex Dominated Flows, Timisoara, Romênia, pp 77-86.

MUNTEAN, S., RUPRECHT, A., SUSAN-RESIGA, R., 2005b, “A numerical investigation of the 3D swirling flow in a pipe with constant diameter. Part 2: turbulent computation”, Workshop on Vortex Dominated Flows, Timisoara, Romênia, pp 87-96.

PETERS, N., 1984, “Laminar diffusion flamelet models in non-premixed turbulent combustion”, Progress in Energy and Combustion Science, Vol 10, pp 319-339.

PETERS, N., 1986, “Laminar flamelet concepts in turbulent combustion”, 21th International Symposium on Combustion/The Combustion Institute, pp 1231-1250.

PETERS, N., 2000, "Turbulent combustion", 1ª Edição, University Press Cambridge, Cambridge, United Kingdom.

PITSCH, H., CHEN, M., PETERS, N., 1998, “Unsteady flamelet modeling of turbulent hydrogen-air diffusion flames”, 27th International Symposium on Combustion/The Combustion Institute, pp 1057-1064

PITSCH, H., PETERS, N., 1998, “A consistent flamelet formulation for non-premixed combustion considering differential diffusion”, Combustion and Flame, Vol 114, pp 24-40

PILETTI, M., PILETTI, C., 1997, “História e vida: da idade moderna à atualidade”, 17ª Edição, Editora Ática, São Paulo, Brasil

POINSOT, T., VEYNANTE, D., 2001, "Theoretical and numerical combustion", 1ª Edição, Edwards, Philadelphial, PA, USA.

POLING, B. E., PRAUSNITZ. J.M.,O'CCONNELL, J. P., 2004. "The properties of gases and liquids".5ª edição, McGraw-Hill, New York, EUA.

POPE, S. B., 2000. "Turbulent flows". Cambridge University Press, Nova Iorque, EUA.

POPE, S. B., 1978. "An explanation of the turbulent round-jet/plane-jet anomaly", AIAA Journal, Vol. 16, No. 3, pp. 279-281.

ROCHAYA, D., 2007, "Numerical simulation of spray combustion using bio-mass derived liquid fuels". Tese (Doutorado) – Cranfield University, England, 292p.

SACOMANO FILHO, F. L., 2011, "Simulações de chamas turbulentas de etanol com modelo de turbulência k-ε", Dissertação (Mestrado) – Escola Politécnica da Universidade de São Paulo, São Paulo, 149p.

SHAMANI, K. K., BIROUK, M., 2008, "Assessment of the performance of RANS models for simulating swirling flows in a can-combustor", The Open Aerospace Engineering Journal, pp-8-27.

SIRIGNANO, W. A, 1984, "Fuel droplet vaporization and spray combustion theory", Progress in Energy and Combustion Science, Vol 9, pp 291- 322.

SIRIGNANO, W. A., 2010, "Fluid dynamics and transport of droplets and sprays", Cambridge University Press, New York, United States of America, 462p.

TENNEKES, H., LUMLEY, J. L., 1972, "A first course in turbulence", MIT Press, Cambridge, Massachusetts, EUA.

TURNS, S. R., 2000, "An introduction to combustion: concepts and applications", McGraw-Hill, Singapore, 676p.

VERSTEEG, H. K. and MALALASEKERA, W., 2007, "An introduction to computational fluid dynamics: the finite volume method", Pearson Education Limited, Harlow, England, 503p.

VILLANUEVA, J. J. C., 2013 "Estudo experimental da combustão turbulenta de sprays de etanol usando PLIF-OH, PIV e shadowgraphy". Dissertação (Mestrado) – Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, Brasil, 130p.

YUEN, M. C., CHEN, L. W., 1976, “On drag of evaporating liquid dDroplets”, Combustion Science and Technology, Vol.14, pp. 147-154.

WHITE, F. M., 2002, “Mecânica dos fluidos”, 4ª Ed. McGraw Hill, Rio de Janeiro, 570 p.

WILCOX, D.C., 1993, “Turbulence modeling for CFD”. DCW Industries Inc., La Cañada, California, USA, 1993.

APÊNDICE A – Descrição da fase contínua: equações de conservação

O escoamento da fase contínua é descrito pelas leis clássicas da mecânica dos fluidos. As equações de transporte se baseiam no princípio da conservação de uma propriedade dentro de um volume de controle. As equações de transporte têm uma forma padrão que está explicitada na equação (132).

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\psi) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho\psi u_j) = \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\Gamma_\psi \frac{\partial \psi}{\partial x_j}\right) + S_\psi, \tag{132}$$

em que ψ corresponde a uma propriedade qualquer do escoamento, ρ à massa específica do fluido, t ao tempo, u_j à componente da velocidade na direção j, x_j à coordenada na direção j, Γ_ψ ao coeficiente de difusão da propriedade ψ e S_ψ é o termo fonte associado a ψ.

As equações pertinentes a este estudo serão apresentadas em notação indicial e coordenadas cartesianas. Nesta seção, serão discutidas a equação da continuidade, a equação da quantidade de movimento linear, equação de energia e equação das espécies químicas. Todas essas equações serão escritas para um fluido Newtoniano.

A compressibilidade é negligenciada, pois se considera que o escoamento tem número de Mach menor do que 0,3. Entretanto, no APÊNDICE B, será aplicada a decomposição de Favre, a qual considera a variação da densidade devido ao processo de combustão.

A equação da continuidade é dada por

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j) = 0. \tag{133}$$

O primeiro termo determina a variação local da massa e o segundo determina o fluxo líquido de massa devido ao transporte advectivo. É comum utilizar a hipótese de regime permanente ou estatisticamente estacionário, anulando o termo de variação local. Desta forma, os fluxos advectivos em todas as direções se anulam.

As equações de conservação da quantidade de movimento são descritas por

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_i u_j) = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \rho g_i + \frac{\partial \tau_{ji}}{\partial x_j}, \tag{134}$$

onde p é a pressão, g_i é a componente aceleração da gravidade na direção i, τ_{ji} é a tensão de das forças viscosas do fluido e u_i é a componente da velocidade na direção i. É comum utilizar a hipótese de fluido Newtoniano-Stokesiano, que permite utilizar a seguinte relação para as forças viscosas

$$\tau_{ij} = 2\mu S_{ij} - \frac{2}{3}\delta_{ij}\left(\mu\frac{\partial u_k}{\partial x_k}\right), \tag{135}$$

na qual S_{ij} é o tensor das deformações,

$$S_{ij} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j}\right), \tag{136}$$

onde δ_{ij} é o tensor delta de Kronecker, μ é a viscosidade dinâmica do fluido.
Aplicando essa hipótese, obtêm-se as equações de Navier-Stokes

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_i u_j) = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \rho g_i + \frac{\partial}{\partial x_j}\left[2\mu S_{ij} - \frac{2}{3}\delta_{ij}\left(\mu\frac{\partial u_k}{\partial x_k}\right)\right]. \tag{137}$$

Os termos do lado esquerdo correspondem à variação local de quantidade de movimento e ao fluxo líquido da quantidade de movimento devido ao transporte advectivo, respectivamente. Os dois primeiros termos do lado direito correspondem à variação da quantidade de movimento devido à diferença de pressão estática do fluido e à ação do empuxo. Os termos dentro do colchete podem ser associados à ação das forças viscosas e à dilatação do fluido.
Em escoamentos reativos, as equações da energia e das espécies químicas tem papel importante. Elas definem a estrutura da chama e, portanto, seus termos devem ser descritos com a atenção necessária.
A equação de conservação das espécies químicas deriva da conservação de massa, uma vez que a conservação da massa tem de ser garantida. Assim como a da energia, a equação da conservação das espécies químicas pode ser representada por diferentes propriedades como concentrações das espécies e frações mássicas e molares. No caso, as espécies químicas serão caracterizadas pela respectiva fração mássica. A equação de conservação da fração mássica é dada por

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_k) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho Y_k u_j) = \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\rho D_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_j}\right) + \dot{\omega}_k, \tag{138}$$

na qual Y_k corresponde à fração mássica da espécie química k, D_k corresponde ao coeficiente de difusão da espécie k e $\dot{\omega}_k$ é o termo fonte da fração mássica da espécie química k.

A derivada parcial em relação ao tempo representa a variação local. O segundo termo do lado esquerdo da equação corresponde ao fluxo líquido advectivo da fração mássica. O primeiro termo do lado direito da equação corresponde ao fluxo molecular difusivo e o último corresponde ao termo fonte da espécie química. Este último é determinado pela taxa de consumo ou formação da espécie química k, decorrência da cinética química do processo reativo.

A equação da energia pode ser apresentada através da entalpia, da temperatura e energia interna. Neste trabalho, optou-se por representá-la pela entalpia absoluta da mistura. A entalpia absoluta da mistura é definida como

$$h = \sum_{k=1}^{K} Y_k h_k, \tag{139}$$

onde h é a entalpia absoluta da mistura, h_k é a entalpia absoluta da espécie química k.

Por sua vez, a entalpia absoluta da espécie química é

$$h_k = h_k^0 + \int_{T_0}^{T} c_{p,k} dT, \tag{140}$$

na qual h_k^0 é a entalpia de formação da espécie química k, T_0 é a temperatura definida para a entalpia de formação, 25ºC, T é a temperatura da mistura, $c_{p,k}$ é o calor específico à pressão constante da espécie k, em função da temperatura do sistema.

A equação de conservação da entalpia absoluta da mistura é definida por

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho h) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j h) = \frac{\partial}{\partial x_j}\left[\frac{\mu}{\sigma_k}\frac{\partial h}{\partial x_j} + \mu\left(\frac{1}{Sc_k} - \frac{1}{\sigma_h}\right) h_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_j}\right], \tag{141}$$

na qual Sc_k é o número adimensional de Schmidt da espécie química k e σ_h corresponde ao número de Prandtl.

O número adimensional de Schmidt relaciona as taxas de transporte difusivo da quantidade de movimento pela ação da viscosidade molecular e de difusão mássica através da equação

$$Sc_k = \frac{\mu}{\rho D_k}. \tag{142}$$

O número adimensional de Prandtl relaciona as taxas de difusão da quantidade de movimento e de difusão térmica

$$\sigma_h = \frac{c_p \mu}{\lambda}, \tag{143}$$

onde λ é a condutividade térmica da mistura e c_p é o calor específico à pressão constante da mistura.

A equação (141) apresenta quatro termos distintos. O primeiro corresponde à variação local, o segundo corresponde ao fluxo líquido de energia pelo transporte advectivo da mistura, o terceiro corresponde às taxas de transporte pela difusão térmica e o último termo corresponde ao fluxo líquido de entalpia absoluta como consequência da difusão mássica das espécies químicas.

Introduzindo o número adimensional de Lewis que relaciona as taxas de difusão térmica e de difusão mássica,

$$Le_k = \frac{\lambda}{\rho c_p D_k}, \tag{144}$$

e supondo que os coeficientes de difusão de todas as espécies sejam iguais, obtém-se que:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho h) + \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\rho u_j h\right) = \frac{\partial}{\partial x_j}\left[\frac{\mu}{\sigma_k}\frac{\partial h}{\partial x_j} + \mu\left(\frac{1}{Le} - 1\right) h_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_j}\right]. \tag{145}$$

Conforme salientado por Poinsot e Veynante (2000) é comum utilizar a hipótese de número de Lewis unitário, o que simplifica a equação de energia para

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho h) + \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\rho u_j h\right) = \frac{\partial}{\partial x_j}\left[\frac{\mu}{\sigma_k}\frac{\partial h}{\partial x_j}\right]. \tag{146}$$

Desta forma, a equação de conservação da entalpia absoluta apresenta apenas os termos relacionados aos transportes difusivos, advectivos e variação local.

APÊNDICE B – Decomposições de Reynolds e de Favre e equações de transporte médias

A decomposição de Reynolds propõe a decomposição de uma variável Φ do escoamento em duas parcelas: o valor médio da variável e a flutuação turbulenta, como pode ser observado na equação (147)

$$\phi = \bar{\phi} + \phi', \tag{147}$$

na qual Φ é o valor instantâneo da variável, $\bar{\Phi}$ é seu valor médio e Φ' é a flutuação turbulenta da variável.

O valor médio temporal pode ser utilizado como estimador da média estatística da variável Φ e é dado por

$$\bar{\phi} = \frac{1}{\Delta t}\int_0^{\Delta t} \phi \, dt, \tag{148}$$

na qual Δt é um determinado intervalo de tempo.

A decomposição de Reynolds e a subsequente aplicação do operador de média definem as seguintes propriedades

$$\overline{f + g} = \bar{f} + \bar{g}, \tag{149}$$

$$\overline{af} = a\bar{f}, \tag{150}$$

$$\overline{f'} = 0, \tag{151}$$

$$\bar{\bar{f}} = \bar{f}, \tag{152}$$

$$\overline{f'\bar{g}} = 0, \tag{153}$$

onde f e g são propriedades quaisquer do escoamento e a é um valor constante qualquer.

A decomposição de Reynolds é amplamente empregada para escoamentos em que a massa específica é constante e, portanto, a decomposição de Reynolds não se aplica a essa variável. Todavia, a modelagem de escoamentos reativos turbulentos necessita de uma modelagem que

considere a variação da massa específica. A aplicação da decomposição de Reynolds em escoamentos com massa específica variável implicaria na introdução de novos termos desconhecidos, conforme exemplificado em Versteeg e Malalasekera (2007) e Jones e Whitelaw (1982). Como solução a esse problema, é proposta outra decomposição fundamentada na ponderação das variáveis do escoamento pelo valor médio da massa específica. Essa decomposição é denominada decomposição de Favre e é definida como

$$\phi = \tilde{\phi} + \phi", \tag{154}$$

na qual Φ é o valor instantâneo da variável, $\widetilde{\Phi}$ é o seu valor médio, segundo a decomposição de Favre, e $\phi"$ é a flutuação turbulenta de Favre.

A grande diferença entre as decomposições é a definição do valor médio. A decomposição de Favre define que o valor médio ponderado pela massa específica média é dado por

$$\tilde{\phi} = \frac{\overline{\rho\phi}}{\bar{\phi}}. \tag{155}$$

As propriedades da média temporal da decomposição de Favre são

$$\overline{f"} \neq 0, \tag{156}$$

$$\overline{\rho f} = \bar{\rho}\tilde{f}, \tag{157}$$

$$\overline{\rho f"} = 0. \tag{158}$$

Em escoamentos reativos é necessário descrever as flutuações da densidade como decorrência do processo de reação. Logo, para esse tipo de escoamento, é necessária a aplicação da decomposição de Favre e subsequente aplicação da média temporal para obtenção das equações de transporte das propriedades médias da fase dispersante.

As equações (159) a (162) são as equações de conservação da massa, da quantidade de movimento, das espécies químicas e da energia, posteriormente após a aplicação da decomposição de Favre e do operador de média

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\bar{\rho}\widetilde{u_i}) = 0, \tag{159}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\widetilde{u_i}) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}\widetilde{u_i}\widetilde{u_j}) = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j}\left(2\mu\widetilde{S_{ij}} - \frac{2}{3}\delta_{ij}\mu\frac{\partial u_k}{\partial x_k} - \bar{\rho}\widetilde{u''_i u''_j}\right) + \bar{\rho}g_i, \tag{160}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\tilde{h}) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}\tilde{h}\widetilde{u_j}) = \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\frac{\mu_t}{\sigma_k}\frac{\partial \tilde{h}}{\partial x_j}\right), \tag{161}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\widetilde{Y_k}) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}\widetilde{Y_k}\widetilde{u_j}) = \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\bar{\rho}D_k\frac{\partial \widetilde{Y_k}}{\partial x_j}\right) + \widetilde{\dot{\omega}_k}. \tag{162}$$

Nota-se o aparecimento do tensor de segunda ordem $-\bar{\rho}\widetilde{u''_i u''_j}$ na equação da quantidade de movimento, denominado tensor das tensões turbulentas ou tensor das tensões de Reynolds. O objetivo dos modelos com base na média é a modelagem desse termo, o qual é desconhecido por se tratar da média da multiplicação de duas flutuações. No modelo k-ε padrão, utiliza-se a hipótese de Boussinesq, que define uma analogia entre o tensor das tensões viscosas e o tensor das tensões turbulentas. Assim, o tensor das tensões turbulentas é dado por

$$\widetilde{\tau_{ij}} = -\bar{\rho}\widetilde{u''_i u''_j} = 2\mu_t\widetilde{S_{ij}} - \frac{2}{3}\bar{\rho}k\delta_{ij}, \tag{163}$$

na qual μ_t é a viscosidade turbulenta (*eddy viscosity*), k é a energia cinética turbulenta e $\widetilde{S_{ij}}$ é o tensor médio das deformações

$$\widetilde{S_{ij}} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial \widetilde{u_j}}{\partial x_i} + \frac{\partial \widetilde{u_i}}{\partial x_j}\right). \tag{164}$$

A hipótese de Boussinesq introduz uma nova variável, a viscosidade turbulenta (*eddy viscosity*), a qual é dada por (Pope, 2000 e Versteeg e Malalasekera, 2007)

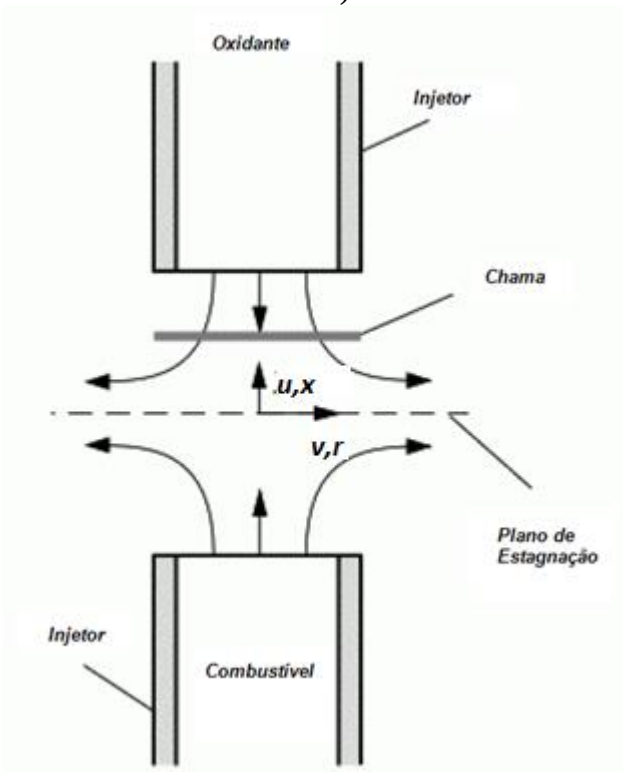
$$\mu_t = \bar{\rho}C_\mu\frac{k^2}{\varepsilon}, \tag{165}$$

onde a constante C_μ do modelo é igual a 0,09 e ε é a taxa de dissipação da energia cinética turbulenta.

APÊNDICE C – Equações de chamas de jatos opostos

A configuração de chama de jatos opostos é amplamente utilizada, tanto em experimentos quanto em simulações numéricas, visando à descrição de chamas de difusão, pois tem uma característica muito importante. Adotadas certas hipóteses, a estrutura da chama se torna unidimensional (Peters, 2000). A Figura 63 apresenta um exemplo de configuração experimental de chamas opostas.

Figura 63 – Esquema da configuração experimental de Chamas Opostas (adaptado de Peters, 2000)



A Figura 63 pode representar uma configuração axissimétrica de jatos ou uma configuração plana de jatos. Independente de qual configuração seja empregada, o equacionamento de ambas leva a uma estrutura de chama unidimensional. Neste trabalho será descrita a modelagem da configuração axissimétrica.

Primeiro, escrevem-se as equações da continuidade e de Navier-Stokes em coordenadas cilíndricas para regime permanente

$$\frac{\partial}{\partial x}(r\rho u) + \frac{\partial}{\partial r}(r\rho v) = 0, \tag{166}$$

$$u\frac{\partial(\rho u)}{\partial x}+v\frac{\partial(\rho u)}{\partial r}=-\frac{\partial p}{\partial x}+\frac{\partial}{\partial x}\left(\mu\left(\frac{4}{3}\frac{\partial u}{\partial x}-\frac{2}{3r}\frac{\partial(rv)}{\partial r}\right)\right)+\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(\mu r\left(\frac{\partial v}{\partial x}+\frac{\partial u}{\partial r}\right)\right), \quad (167)$$

$$u\frac{\partial(\rho v)}{\partial x}+v\frac{\partial(\rho v)}{\partial r}=-\frac{\partial p}{\partial r}+\frac{\partial}{\partial r}\left(\mu\left(2\frac{\partial v}{\partial r}-\frac{2}{3}\frac{\partial u}{\partial x}-\frac{2}{3r}\frac{\partial(rv)}{\partial r}\right)\right)+\frac{\partial}{\partial x}\left(\mu\left(\frac{\partial v}{\partial x}+\frac{\partial u}{\partial r}\right)\right)+\frac{2\mu}{r}\left(\frac{\partial v}{\partial r}-v/r\right), \quad (168)$$

onde u é a componente da velocidade na direção axial, x é a coordenada na direção axial, v é a componente da velocidade na direção radial e r é a coordenada na direção radial.

Nota-se que os termos relativos à direção tangencial foram negligenciados. A simetria do problema permite que tal hipótese seja feita.

Dixon-Lewis (1990) utiliza a hipótese de que o escoamento pode ser descrito como um escoamento potencial e define a função de corrente ψ do escoamento

$$\psi(x,r)=r^2U(x), \quad (169)$$

onde U(x) é uma função da coordenada x. Peters (2000) afirma que as distâncias da frente de chama e do plano de estagnação em relação às seções de descarga de oxidante e de combustível devem ser grandes o suficiente de forma que as origens dos escoamentos potenciais sejam em $y=+\infty$ e $y=-\infty$, repsectivamente.

Utilizando a função de corrente definida, obtém-se

$$\frac{\partial\psi}{\partial r}=r\rho u=2rU \quad (170)$$

e

$$-\frac{\partial\psi}{\partial x}=r\rho v=-r^2\frac{dU}{dx}. \quad (171)$$

A partir da definição da função de corrente, observa-se que a equação da continuidade é satisfeita.

Dixon-Lewis (1990) considera que a temperatura (T), as frações mássicas das espécies (Y_k) e densidade são funções apenas da coordenada axial x, implicando que os fluxos radiais são nulos e que os coeficientes de transporte difusivos são funções apenas de x. A partir dessas hipóteses, conclui-se que a componente axial velocidade (u) é função apenas da posição axial e que a componente tangencial (v) aumenta linearmente com a coordenada radial r.

Além dessas, são feitas as hipóteses de:

- Baixo número de Mach (fluido incompressível);
- Forças de campo são negligenciadas;

Aplicando as hipóteses e a função de corrente nas equações (167) e (168), obtém-se

$$\frac{\partial p}{\partial x} = -4U\frac{d}{dx}(U/\rho) - 2\mu\frac{d}{dx}\left(\frac{1}{\rho}\frac{dU}{dx}\right) + \frac{4}{3}\frac{d}{dx}\left(\mu\left(2\frac{d}{dx}\left(\frac{U}{\rho}\right) + \frac{1}{\rho}\frac{dU}{dx}\right)\right) \tag{172}$$

e

$$\frac{1}{r}\frac{\partial p}{\partial r} = \frac{d}{dx}\left(\frac{2U}{\rho}\left(\frac{dU}{dx}\right)\right) - \frac{3}{\rho}\left(\frac{dU}{dx}\right)^2 - \frac{d}{dx}\left(\mu\frac{d}{dx}\left(\left(\frac{1}{\rho}\right)\frac{dU}{dx}\right)\right). \tag{173}$$

Os termos do lado esquerdo das equações (172) e (173) são funções da coordenada axial x e, portanto, conclui-se que

$$\frac{\partial^2 p}{\partial x \partial r} = 0 \tag{174}$$

e

$$\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial p}{\partial r}\right) = 0. \tag{175}$$

Da equação acima, escreve-se que $\frac{1}{r}\frac{\partial p}{\partial r}$ é um valor constante e autovalor do escoamento. Este autovalor será representado pela variável J.

A partir da equação (171) pode ser definida a função F(x):

$$F(x) = -\frac{1}{\rho}\frac{dU}{dx} = \frac{v}{r}. \tag{176}$$

Esta função pode ser substituída nas equações (167) e (168). Assim, obtém-se

$$\frac{dU}{dx} + 2\rho F = 0 \tag{177}$$

e

$$2U\left(\frac{dF}{dx}\right) = \frac{d}{dx}\left(\mu\left(\frac{dF}{dx}\right)\right) - J - \rho F^2. \tag{178}$$

Dixon-Lewis (1990) observa que tomadas hipóteses análogas para as espécies químicas, obtém-se

$$2U\frac{dY_i}{dx} = \frac{d}{dx}\left(\frac{-j_i}{M_k}\right) + \dot{\omega}_i, \tag{179}$$

onde j_k é o fluxo difusivo e R_k é a taxa de formação da espécie k. A partir das equações para da cada uma das espécies, pode ser escrita a equação para a fração de mistura,

$$2U\frac{dz}{dx} = \frac{\partial}{\partial x}\left(\rho D\frac{\partial z}{\partial x}\right). \tag{180}$$

As equações (177), (178), (179) e (180) podem ser reescritas como

$$\frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + 2\rho F = 0, \tag{181}$$

$$\rho u\frac{\partial F}{\partial x} = -\rho F^2 + J + \frac{\partial}{\partial x}\left(\mu\frac{\partial F}{\partial x}\right), \tag{182}$$

$$\rho u\frac{\partial z}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x}\left(\rho D\frac{\partial z}{\partial x}\right), \tag{183}$$

$$\rho u\frac{\partial Y_k}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x}\left(\rho D_i\frac{\partial Y_k}{\partial x}\right) + \dot{\omega}_i. \tag{184}$$

Peters (2000) utiliza a hipótese de que o gradiente da pressão pode ser escrito em função da taxa de deformação (a) do fluido, o que satisfaz a necessidade de ser um autovalor do escoamento.

$$J = \rho_\infty a^2 \tag{185}$$

Definidas as equações a serem resolvidas e o autovalor do gradiente de pressão, são definidas as condições de contorno.

Conforme salientado por Peters (2000), a formulação de dois escoamentos potenciais opostos só pode ser utilizada se as duas correntes estão distante o suficientes do plano de estagnação e se as velocidades das correntes forem grandes o suficiente. Isso implica em impor condições de contorno para em duas singularidades: coordenada axial tendendo ao infinito (escoamento potencial do oxidante) e ao menos infinito (escoamento potencial do combustível).

As condições de contorno para o escoamento potencial do oxidante são dadas por

$$x \to \infty: \quad u_\infty = -ax, \;\; F_\infty = a. \tag{186}$$

Nota-se que o gradiente da velocidade foi prescrito e é dado por

$$a = -\frac{\partial u_\infty}{\partial x}. \tag{187}$$

A prescrição do mesmo ponto de estagnação para as correntes requer que as condições de contorno para o combustível sejam

$$x \to -\infty: \quad u_{-\infty} = -\left(\frac{\rho_\infty}{\rho_{-\infty}}\right)^{\frac{1}{2}} ax, \;\; F_{-\infty} = a\frac{\rho_\infty}{\rho_{-\infty}}. \tag{188}$$

Essas condições de contorno são apenas para a equação de quantidade de movimento. As condições de contorno para a equação da fração de mistura são

$$x \to -\infty: \quad z = 1 \tag{189}$$

$$x \to \infty: \quad z = 0. \tag{190}$$

A equação da fração de mistura pode ser integrada utilizando essas condições de contorno, através do método da separação de variáveis. Considerando

$$z' = \rho D \frac{dZ}{dx}, \tag{191}$$

a equação da fração de mistura pode ser reescrita como

$$\frac{d(\ln z\prime)}{dx} = \frac{v}{D}. \tag{192}$$

Esta pode ser integrada duas vezes o que leva a solução

$$z = c_1\, I(x) + c_2, \tag{193}$$

na qual

$$I(y) = \int_0^x \frac{1}{\rho D} exp\left\{\int_0^x \frac{v}{D}\, dx\right\} dx. \tag{194}$$

Aplicando as condições de contorno, obtém-se

$$z = \frac{I(\infty) - I(x)}{I(\infty) - I(-\infty)}. \tag{195}$$

Utilizando a hipótese de densidade constante, obtém-se uma solução aproximada, na qual a relação

$$F = a \tag{196}$$

satisfaz a equação (182). Esta relação simplifica a integral para

$$I(x) = \int_0^x \frac{1}{\rho^2 D} exp\left\{-2a \int_0^x \frac{1}{\rho^2 D}\, x' dx'\right\} dx', \tag{197}$$

na qual

$$x' = \int_0^x \rho\, dx. \tag{198}$$

Utilizando a aproximação de Chapman (Peters, 2000), introduz-se a coordenada adimensional

$$\eta = \left(\frac{2a}{D_\infty}\right)^{\frac{1}{2}} \int_0^x \frac{\rho}{\rho_\infty}\, dx, \tag{199}$$

Que, após ser aplicada na equação da fração de mistura, resulta em

$$z = \frac{1}{2} erfc\left(\frac{\eta}{\sqrt{2}}\right), \tag{200}$$

na qual erfc(x) é a função complementar de erro de Gauss, definida como

$$erfc(x) = 1 - erf(x) = 1 - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-t^2} dt. \tag{201}$$

Partindo da definição da taxa de dissipação escalar (equação 62), obtém-se

$$\chi(z) = \frac{a2}{\pi} exp(-2[erfc^{-1}(2z)]^2). \tag{202}$$

As equações (200) e (202) são utilizadas para a formação das tabelas *flamelet*. A taxa de dissipação escalar é descrita em função da taxa de deformação e, portanto, varia conforme o aumento da taxa de deformação, ou seja, com o aumento das velocidades dos jatos.