

HAMILTON FERNANDO DE SOUZA ARAÚJO

MODELAGEM DE UMA CHAMA DE DIFUSÃO
UTILIZANDO-SE A TÉCNICA DE SIMULAÇÃO DE
GRANDES ESTRUTURAS TURBULENTAS

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

CONSULTA
FD-4409
Ed.rev.

São Paulo
2006

OK

HAMILTON FERNANDO DE SOUZA ARAÚJO

**MODELAGEM DE UMA CHAMA DE DIFUSÃO
UTILIZANDO-SE A TÉCNICA DE SIMULAÇÃO DE
GRANDES ESTRUTURAS TURBULENTAS**

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

Área de Concentração:
Engenharia Mecânica

Orientador:
Prof. Doutor
Guenther Carlos Krieger Filho

São Paulo
2006

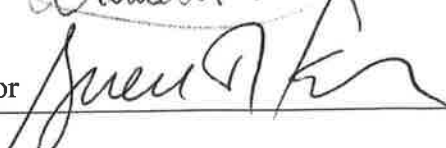
Este exemplar foi revisado e alterado em relação à versão original, sob responsabilidade do autor e com a anuência de seu orientador.

São Paulo, 04 de julho de 2006

Assinatura do autor



Assinatura do orientador



FICHA CATALOGRÁFICA

Araújo, Hamilton Fernando de Souza

Modelagem de uma Chama de Difusão Utilizando-se a Técnica de Simulação de Grandes Estruturas Turbulentas. São Paulo, 2006. Edição Revisada.

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

1. Combustão 2. Gás Natural 3. Metano 4. Chama Difusiva
5. Grandes Estruturas Turbulentas 6. Turbulência 7. Chamas Turbulentas.

*God grant me the serenity to
accept the things I cannot
change, the courage to change
the things I can, and the
the wisdom to know the difference.*

Reinhold Niebuhr

AGRADECIMENTOS

Ao amigo e orientador Prof. Dr. Guenther Carlos Krieger Filho, por sua enorme colaboração e constante incentivo na compilação desta dissertação.

Ao Newton Fukumasu pela inclusão das rotinas de MPI no código do CFD, as quais contribuíram muito com a redução do tempo das simulações, além do aperfeiçoamento de geração da malha computacional.

A minha esposa Marina por seu apoio e compreensão e ao meu recém chegado filho Fernando.

Ao amigo e mestre Ian Faccio (*in memorium*) por lembrar-me sempre da importância do crescimento acadêmico em busca do conhecimento.

Ao meu pai Ademar pela iniciação no mundo da combustão.

A todos que tiveram sua parcela de contribuição neste trabalho, direta ou indiretamente.

RESUMO

O presente trabalho versa sobre a modelagem de uma chama turbulenta difusiva usando a técnica de simulação de grandes estruturas turbulentas (LES), juntamente com o modelo termo-químico de folha de chama (*flame sheet model*) e o conceito de fração de mistura como escalar conservativo. Este trabalho também é pioneiro de utilização de LES com reação química no Brasil, podendo colaborar para o desenvolvimento desta técnica na área de combustão.

O trabalho consiste na construção e validação das rotinas computacionais de um código CFD, baseado em LES e com flexibilidade para uma futura utilização de cinética química detalhada de combustão (EDC/ISAT), para casos complexos onde modelos mais simples, como a fração de mistura, são falhos.

O programa será validado em uma chama de difusão turbulenta não-confinada de metano (CH_4), para a qual existem dados experimentais na literatura [61, 62] e utilizados pela comunidade acadêmica em excelência (Stanford, TU-Darmstadt, Imperial College, Cornell University etc). As características da implementação numérica do código permitirão sua expansão futura para outras aplicações em: queima de combustíveis líquidos, combustão em câmaras fechadas e fornalhas com a inclusão de modelo de radiação.

ABSTRACT

The present work is about modeling a diffusive turbulent flame using the Large-Eddy Simulation approach (LES) and the Flame Sheet model as the chemical model with the mixture fraction concept as the conservative scalar. This work is pioneer in the sense of using LES and reactive flow in Brazil, making possible the development for LES techniques in the combustion area.

The work is intended to construct and validate a CFD code based on LES and with future flexibility for a more detailed combustion chemical model (EDC/ISAT) for complex flows, where simple models are failed, like the mixture fraction.

The program will be validated for a turbulent diffusion methane (CH_4) flame not confined, which there are some experimental data on the specialized literature [61, 62], and commonly used by the academic community (Stanford, TU-Darmstadt, Imperial College, Cornell University etc). The features of the numerical code implementation will make possible future expansion of its use in other applications: liquid fuel burning, combustion chambers and ovens with the radiation model inclusion.

Conteúdo

Sumário	vii
Lista de Figuras	ix
Lista de Tabelas	xii
Lista de Abreviaturas e Siglas	xiii
Lista de Símbolos	xv
1 INTRODUÇÃO	1
2 TEORIA DO MODELO FÍSICO	8
2.1 Equações de Transporte	8
2.2 Equações de Transporte Filtradas	10
2.3 Modelos Termo-Químicos de Combustão Turbulenta	14
2.3.1 Fração de Mistura	14
2.3.2 Equilíbrio Químico	19
2.3.3 <i>Flamelets</i> - Elementos de Chama	21
3 IMPLEMENTAÇÃO NUMÉRICA	25
3.1 Discretização das Equações	25
3.1.1 Método dos Volumes Finitos	25

3.1.2	Discretização das Equações de Transporte	26
3.1.3	Discretização das Integrais de Volume e Superfície	26
3.1.4	Malha Computacional	27
3.1.5	Discretização dos Fluxos Difusivos	28
3.1.6	Discretização dos Fluxos Convectivos	29
	<i>Central Differencing Scheme</i>	30
	<i>Upwind Differencing Scheme</i>	31
	<i>Total Variation Diminishing</i>	31
	<i>Efeito de diferentes esquemas convectivos</i>	32
3.1.7	Transporte Conservativo	34
3.2	Discretização da Derivada Temporal	36
3.2.1	Integração no Tempo	36
3.2.2	Limites para o Tamanho do Passo no Tempo	38
3.2.3	Acoplamento Pressão-Velocidade	39
3.3	Condições de Contorno	40
3.4	Implementação Computacional	41
3.4.1	C++ e Programação Orientada a Objetos	42
3.4.2	Paralelização com MPI - <i>Message Passing Interface</i>	43
4	RESULTADOS E CONCLUSÃO	48
4.1	Validação Básica	49
4.1.1	Condução unidimensional em uma barra	49
4.1.2	Condução unidimensional em uma placa com geração interna de calor	50
4.1.3	Condução unidimensional em uma barra em regime transitório	51
4.1.4	Condução unidimensional em um cilindro com geração interna de calor	52

<i>CONTEÚDO</i>	ix
4.1.5 Problema de convecção/difusão	53
4.1.6 Conclusões dos problemas de Condução e Convecção/Difusão	53
4.2 Validação da Equação de Navier-Stokes para Escoamento Laminar . .	54
4.2.1 Escoamento laminar em tubo	54
4.2.2 Jato laminar não-confinado	56
4.2.3 Conclusões da validação das equações de Navier-Stokes para escoamento laminar	58
4.3 Validação Turbulenta com Modelo Termo-Químico	58
4.3.1 Validação do Escoamento Turbulento com LES	59
4.3.2 Validação da Chama de Difusão com LES	60
4.3.3 Conclusões da validação turbulenta com modelo termo-químico	62
4.4 Discussão e Conclusão	62
Apêndice	65
Bibliografia	74

Lista de Figuras

1.1	Representação esquemática de escoamento turbulento	3
2.1	Espectro de turbulência	11
2.2	Relação funcional entre a fração de mistura e frações mássicas	17
2.3	Relação funcional entre a fração de mistura e temperatura	20
2.4	Descrição física de uma estrutura <i>flamelet</i>	22
3.1	Volume de controle C	27
3.2	Esquema da malha cilíndrica	28
3.3	Esquema da malha cartesiana nos planos axial e transversal	29
3.4	Volume Finito <i>Ghost</i>	30
3.5	Nomenclatura das células vizinhas para interpolação	30
3.6	Comparação entre esquemas convectivos (<u>Caso 1</u>)	35
3.7	Comparação entre esquemas convectivos (<u>Caso 2</u>)	36
3.8	Domínio computacional cilíndrico	41
3.9	Diagrama de Classes para Volumes e Domínios	46
3.10	Comparação dos tempos de simulação devido ao uso de processamento paralelo	47
4.1	Condução numa Barra Unidimensional	49
4.2	Condução numa Placa com Geração Interna de Calor	50
4.3	Condução numa Barra em Regime Transitório	52

4.4	Condução num Cilindro com Geração Interna de Calor	53
4.5	Escoamento Laminar Tridimensional em Tubo Circular ($Re=20$) - distribuição da velocidade axial normalizada ao longo do raio normalizado	55
4.6	Escoamento Laminar Tridimensional em Tubo Seção Quadrada ($Re=20$) - distribuição da velocidade axial normalizada ao longo do raio normalizado	56
4.7	Jato Laminar Tridimensional Cilíndrico ($Re=1,5$) - velocidades axiais ao longo do raio na saída do bocal e na saída do domínio	57
4.8	Jato Laminar Tridimensional Cilíndrico ($Re=1,5$) - decaimento da velocidade axial normalizada ao longo do comprimento do domínio normalizado	58
4.9	Jato Turbulento Cilíndrico 3D LES ($Re=22.400$) - decaimento da velocidade axial ao longo da linha de centro	60
4.10	Jato Turbulento Cilíndrico 3D LES ($Re=22.400$) - decaimento da velocidade axial no plano radial $x/D=0$	60
4.11	Jato Turbulento Cilíndrico 3D LES ($Re=22.400$) - decaimento da fração de mistura no plano radial $x/D=0$	61
4.12	Chama Difusiva Turbulenta Cilíndrica 3D LES ($Re=22.400$) - variação da fração de mistura ao longo do eixo de simetria axial normalizada	61
4.13	Chama Difusiva Turbulenta Cilíndrica 3D LES ($Re=22.400$) - variação da temperatura ao longo do eixo de simetria axial	62

Lista de Tabelas

1.1	Avaliação dos métodos RANS, DNS e LES para combustão	4
3.1	Funções Delimitadoras de Fluxo	33
3.2	Comparação entre esquemas convectivos (<u>Caso 1</u>)	34
3.3	Comparação entre esquemas convectivos (<u>Caso 2</u>)	34
3.4	Condições de Contorno para a Chama Difusiva	41
3.5	Tabela das principais classes do CFD	44

Lista de Abreviaturas e Siglas

ASM	Algebraic Stress Model
CDS	Central Differencing Scheme
CFD	Computational Fluid Dynamics
CFL	Número de Courant Friedrich Levy
DMS	Distributed Memory Systems
DNS	Direct Numerical Simulation
FDM	Finite Difference Method
FEM	Finite Element Method
FORTTRAN	Formula Translation
FMD	Filtered Mass Density Function
FVM	Finite Volume Method
ILDMM	Intrinsic Low-Dimensional Manifold Model
ISAT	In Situ Adaptive Tabulation
LDE	Lado Direito da Equação
LES	Large Eddy Simulation
LFM	Lagrangian Flamelet Model
MPI	Message Passing Interface
MPICH	Mathematics and Computer Science Division
PC	Personal Computer
PDE	Partial Differential Equation
PDF	Probability Density Function
PRIME	Pressure Implicit Momentum Explicit

RANS	Reynolds Average Numerical Simulation
RSM	Reynolds Stress Model
SGS	Subgrid scale
SIMPLE	Semi Implicit Linked Equations
TDMA	Tri-diagonal Matrix Algorithm
TV	Total Variation
TVD	Total Variation Diminishing
UDS	Upwind Differencing Scheme
UML	Unified Modeling Language

Lista de Símbolos

$B(r)$	Função limitadora do gradiente r
c_p	Calor específico a pressão constante
C_S	Constante do modelo de Smagorinsky
D	Diâmetro do jato/bocal
D_i	Coefficiente de difusão na direção i
f	Fração de mistura
f_{est}	Fração de mistura estequiométrica
F_j^{sgs}	Pequena escala da convecção do fluxo escalar
h	Entalpia
h	Função filtro
k	Energia cinética turbulenta
L	Comprimento típico
p	Pressão
$P()$	Probabilidade
r	Posição na direção radial
R	Raio do jato/bocal
Re	Número de Reynolds
Re_t	Número de Reynolds turbulento

S_ϕ	Termo de fonte volumétrico da quantidade ϕ
S_{ij}	Tensor deformação
t	Tempo
T	Temperatura
u	Velocidade axial
u_i	Componente da velocidade na direção i
v	Velocidade radial
x	Posição na direção axial
x_i	Coordenada na direção i
y	Posição na direção radial
w	Velocidade circunferencial
z	Posição na direção circunferencial
ϕ	Escalar genérico
δ_{ij}	Delta de Kronecker
Δt	Tamanho do passo no tempo
ΔV	Volume
η	Escala de Kolmogorov
μ	Viscosidade dinâmica
ν	Viscosidade cinemática
ν_t	Viscosidade cinemática turbulenta
τ_{ij}	Tensão na superfície normal i na direção j
τ_{ij}^{sgs}	Tensão da submalha
ρ	Densidade
M_α	Peso molecular da espécie α

Subescritos

i, j, k	Direção
α, β	Indicadores de espécies químicas

Superescritos

—	Média espacial
~	Média de Favre
'"	Corresponde a reagente ou produto respectivamente
f, b	Corresponde a reação química direta ou reversa respectivamente

Capítulo 1

INTRODUÇÃO

A crescente demanda mundial de energia impõe à sociedade o uso de petróleo e gás natural até que outras formas de energia primária se tornem economicamente viáveis (biomassa, solar, eólica) ou ambientalmente aceitáveis (carvão, nuclear). Aliado a esses fatores, pressões sociais para um desenvolvimento sustentável têm dado ênfase ao uso eficiente da energia, não sendo aceitável o seu desperdício.

Por se tratar do combustível fóssil de menor impacto ambiental, a aplicação do gás natural no Brasil surge como uma alternativa atraente. Além disso, é público o objetivo estratégico do governo brasileiro de fazer com que o gás natural atinja a participação de 12% na matriz energética até o fim do ano 2010. Isso exigirá, sobretudo, intensa atividade de pesquisa na área tecnológica que viabilize a participação pretendida.

O objetivo principal do presente trabalho é o desenvolvimento de um modelo computacional consistente para processos de combustão com chamas turbulentas difusivas de metano. Como finalidade última e prática do código está a simulação de chamas industriais com gás natural, que é composto em sua maior parte por metano, tendo, entretanto, também a presença de etano e propano em menores quantidades.

No gás natural da bacia de Campos/RJ as percentagens volumétricas destes componentes são 89,44; 6,70; e 2,26 respectivamente. Para o gás natural proveniente da Bolívia os percentuais são 90,74; 6,06 e 1,21 [1]. No presente trabalho, o código computacional será validado com dados experimentais referentes a uma chama turbulenta difusiva de metano [61].

A compreensão de escoamentos turbulentos reativos é fundamental para o desenvolvimento de muitos equipamentos e máquinas, como queimadores, fornos, caldeiras, turbinas a gás e motores de combustão interna. De acordo com Bardina et al. [2], os métodos para predição de escoamentos turbulentos podem ser divididos nas seguintes

categorias:

- o uso de correlações como o fator de atrito em função dos números de Reynolds ou Nusselt;
- o uso de equações integrais obtidas através da integração das equações de movimento em uma ou mais coordenadas;
- o uso de equações obtidas através da média das equações de movimento no tempo, também conhecidas como equações médias de Reynolds (*Reynolds Average Numerical Simulation* ou RANS);
- simulação de grandes estruturas turbulentas (*Large Eddy Simulation* ou LES), que resolve apenas as grandes escalas do escoamento e modela as pequenas escalas;
- simulação numérica direta (*Direct Numerical Simulation* ou DNS), onde as equações de Navier-Stokes são resolvidas para todas as escalas de comprimento e tempo do escoamento turbulento.

Destas categorias, apenas os métodos RANS, LES e DNS são utilizados normalmente para simulação numérica de escoamentos turbulentos. Os outros métodos são de aplicação restrita e não utilizam técnicas de mecânica dos fluidos computacional [2].

A abordagem tradicional de modelagem de escoamentos turbulentos é baseada no modelo clássico das equações médias de Reynolds (RANS). Esta abordagem necessita de modelos de turbulência para que as equações médias possam ser resolvidas. Dos modelos de turbulência mais difundidos pode-se citar: o modelo do comprimento de mistura (*mixing length*), o modelo $k-\epsilon$, o modelo das tensões de Reynolds (*Reynolds Stress Model* ou RSM) e o modelo das tensões algébricas (*Algebraic Stress Model* ou ASM). Os dois primeiros modelos possuem um maior número de validações experimentais e têm uma implementação computacional mais simples, enquanto que os dois últimos, apesar de pouco validados e de custos computacionais mais expressivos, são potencialmente os mais genéricos, podendo calcular melhor alguns escoamentos específicos, como escoamentos livres e rotacionais, onde os modelos $k-\epsilon$ e comprimento de mistura mostram um fraco desempenho.

Atualmente, a grande maioria dos pacotes comerciais para CFD (*Computational Fluid Dynamics*) é baseada no modelo das equações médias de Reynolds (RANS), empregando um dos modelos de turbulência mencionados acima.

A abordagem mais precisa para simulação de escoamentos turbulentos é a resolução das equações de Navier-Stokes sem médias ou aproximações, além daquelas necessárias às discretizações numéricas, onde os erros podem ser estimados e controlados. Esta abordagem é o método da simulação numérica direta (DNS). A técnica resolve todas as escalas de comprimento e tempo, presentes num escoamento em regime turbulento. Entretanto, escoamentos com grande número de Reynolds implicam em esforços computacionais inviáveis para resolução por DNS. Isto porque, à medida que o número de Reynolds cresce, o espectro de energia associado ao escoamento também aumenta, implicando em altas frequências ou estruturas viscosas muito pequenas e contribuindo para o aumento do número de escalas.

Como ilustração, no ano de 2000, o maior número de Reynolds para o qual era possível resolução por DNS era de 1.700, que correspondia a resolução de 20 milhões de equações simultâneas [47]. Assim, apesar de DNS ser a solução mais exata para problemas de turbulência, o método ainda está restrito a escoamentos de baixo número de Reynolds e geometrias simples.

A Técnica de Simulação de Grandes Estruturas Turbulentas (LES) oferece um meio de eliminar parte das deficiências dos métodos baseados em RANS e DNS, buscando um compromisso entre estas duas abordagens. O lado esquerdo da Fig. 1.1 mostra um esquema da grande faixa de tamanhos de estruturas que podem ser encontrados num escoamento, ilustrando as grandes e as pequenas escalas. O lado direito da mesma figura mostra a evolução temporal de uma componente do campo velocidade em um ponto do escoamento.

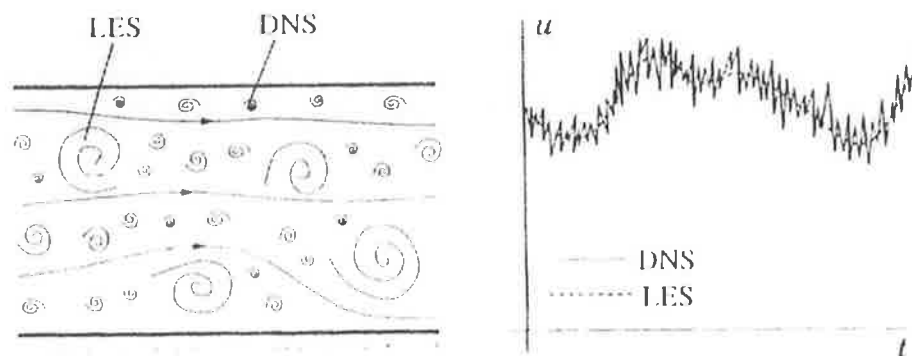


Figura 1.1: Representação esquemática de escoamento turbulento [11]

As grandes escalas contêm muito mais energia cinética da turbulência que as menores, e por isso, pode-se dizer, que estas são responsáveis pelo transporte das propriedades

conservadas. As pequenas escalas, que são usualmente mais fracas, realizam uma fração muito pequena deste transporte de propriedades.

LES é uma técnica de simulação que resolve apenas as escalas maiores (estruturas turbulentas transportadoras de quantidade de movimento, energia e espécies) com maior exatidão, como no método DNS, e modela as pequenas escalas (estruturas menores, homogêneas e isotrópicas onde os processos moleculares são dominantes) através de um modelo de submalha. A maior vantagem do método LES sobre RANS está na maior precisão das propriedades calculadas, mostrando o escoamento com mais detalhes e permitindo o cálculo direto de fenômenos transientes, como por exemplo, as instabilidades em um escoamento reativo ou instabilidades no processo de combustão. Contudo, LES revela alguns obstáculos para sua total substituição sobre o modelo RANS. O primeiro trata da parametrização dos movimentos do fluido em regiões próximas a paredes por apresentarem uma natureza altamente anisotrópica e o segundo é a dependência de um grande recurso computacional exigido para malhas tridimensionais. Outros desafios físicos incluem a grande disparidade entre comprimento de escalas dominantes em diferentes regiões dentro de um mesmo fluxo, a significativa contribuição de modelos de submalha (*subgrid scale* ou SGS) em fluxos com altos valores de número de Reynolds e a dificuldade de prescrever a dependência do tempo através das condições de contorno sem reduzir o grau de precisão da solução do problema [52].

Na Tabela 1.1¹, avaliam-se as principais características dos três métodos apresentados (RANS, DNS e LES) para modelagem de escoamentos turbulentos.

Tabela 1.1: Avaliação dos métodos RANS, DNS e LES para combustão

	RANS	DNS	LES
Exatidão da solução	●●	●●●●	●●●
Resolução de escoamentos complexos	●●	●	●●●
Tempo de simulação	●●●	●	●●
Custos com recursos computacionais	●●●	●	●●
Potencial de progresso	●	●●	●●●●

Alguns problemas, como escoamentos em transição, nas proximidades de paredes e transporte inverso de energia, das escalas menores para as maiores, ocasionados pelos modelos de submalha, estão sendo parcialmente resolvidos pela introdução de uma

¹(● = fraco; ●● = regular; ●●● = bom; ●●●● = ótimo)

modelagem dinâmica [52, 63].

Para a área de combustão, as vantagens da aplicação de LES ao invés de RANS, além da maior precisão na solução, podem ser incluídas a resolução parcial do problema de transporte do contra-gradiente, onde propriedades do escoamento são transportadas contra o gradiente *médio*, e a obtenção de algumas propriedades de difícil medida experimental. Acrescente-se ainda a capacidade de LES resolver os regimes transitórios, como oscilações de pressão (instabilidades), inerentes aos processos de combustão. Em relação ao DNS, LES tem a vantagem de um custo computacional mais acessível, mantendo os resultados para escoamentos transitórios.

Recentemente, tem crescido o interesse do uso de LES na predição de escoamentos reativos turbulentos. Em princípio, isto implica que soluções para as equações de transporte das espécies espacialmente filtradas devem ser obtidas. Estas equações contêm um termo de fonte que contabiliza a taxa de produção ou destruição de espécies devido às reações químicas, que são muito difíceis de tratar tanto em LES quanto em RANS. Para combustão sem pré-mistura, o tratamento do termo de fonte química pode ser evitado utilizando-se um formalismo de conservação de escalar. Com a ajuda de algumas hipóteses simplificadoras, uma equação de transporte para a conservação de um único e restrito escalar pode ser obtida das equações de transporte de fração mássica de espécies e entalpia.

Deste escalar, a fração de mistura, o estado termoquímico do fluido pode ser obtido de um modelo de reação, por exemplo, por abordagens de equilíbrio químico ou *laminar flamelet* [7]. O formalismo da conservação do escalar é uma aproximação razoável das condições encontradas em muitos equipamentos térmicos, como caldeiras, fornos e turbinas a gás. Devido ao fato das chamas serem basicamente controladas pela taxa na qual combustível e comburente se misturam, uma descrição precisa da mistura turbulenta na grande escala é de importância crucial na simulação de tais chamas. LES oferece a possibilidade de melhoria nesta área, pois fornece uma descrição da dinâmica das grandes escalas mais precisa que a abordagem com RANS.

Atualmente, os cinco grupos de trabalho que têm se destacado na área de aplicação de modelos com LES em chamas turbulentas de combustão são:

- TU-Darmstadt (Alemanha), com J. Janicka.
- Stanford University (EUA), com H. Pitsch.

- Delft University of Technology (Holanda), com B. J. Boersma.
- Imperial College of Medicine, Science and Technology (Reino Unido), com M. A. Leschziner.
- Cornell University (EUA), com S. B. Pope.

De acordo com os últimos trabalhos publicados destes grupos, seguem algumas considerações.

TU-Darmstadt Utilizam os modelos simplificados de mistura com equilíbrio químico e *flamelets*. Recentemente publicaram no 29th Symposium on Combustion, no Japão, um trabalho agrupando o código próprio de LES com um modelo químico baseado em um tabela ILDM (*Intrinsic Low-Dimensional Manifold Model*) para metano-ar [10, 22]. A tabela realiza a parametrização das frações mássicas de CO_2 e H_2O com base na fração de mistura. A validação de resultados experimentais é realizada com base na chama parcialmente pré-misturada chamada “Sandia-D” [61].

Stanford University Também utilizam dados experimentais da chama “Sandia-D” para validação de resultados computacionais [61, 62]. Este grupo mantém a abordagem de resolução da equação de conservação das espécies químicas com um modelo de mistura mais avançado, ou seja, utilizam o LFM (*Lagrangian Flamelet Model*) [39, 40]. Através deste modelo, o tempo de cada *flamelet* é determinado por uma variável estatística não-estacionária. Os resultados deste modelo mostram melhor correlação com os dados experimentais, mas com duas importantes ressalvas: um tempo computacional maior e uma pequena superestimativa do consumo de reagentes.

Delft University of Technology Realizam um trabalho em convênio com a Universidade de Sidney (Austrália) através de Masri [32]. Seus últimos resultados também foram apresentados no 29th Symposium on Combustion, no Japão. Consideram o efeito não-linear das reações químicas de combustão com um modelo particular, o FMDF (*Filtered Mass Density Function*) [46]. Este modelo incorpora uma abordagem híbrida entre Euler e Lagrange, relacionando a PDF (*Probability Density Function*) das variáveis escalares presentes na malha filtrada com o modelo de turbulência LES.

Imperial College of Medicine, Science and Technology Lideram um consórcio no Reino Unido para aplicação de LES na combustão. Os últimos trabalhos, além de LES, consideram também o modelo com DNS. Contudo, a grande maioria das aplicações é para chamas turbulentas pré-misturadas para turbinas a gás [32], o que não é objetivo direto do presente trabalho. Também apresentam estudos computacionais para chamas difusivas, onde consideram condições de contorno especiais para sobrepor a dependência da variável temporal.

Cornell University Realizaram vários estudos para solução da equação de transporte da função densidade de probabilidade (PDF) utilizando o método para implementar reações químicas eficientemente em códigos de CFD chamado ISAT (*In Situ Adaptive Tabulation*) [41, 63, 46]. Os trabalhos publicados por esse grupo têm uma abordagem mais fundamental, com formulação de equações tipo filtro, aplicadas ao modelo LES. Os algoritmos desenvolvidos naquele projeto em conjunto com o método de PDF serão utilizados agora em conjunto com o modelo de turbulência LES. Desta forma pretende-se obter a vantagem da modelagem turbulenta LES consorciada com a possibilidade de descrição de cinética química detalhada, pela utilização do algoritmo ISAT já disponível no grupo de pesquisa.

A simulação numérica de combustão com modelo de turbulência LES e cinética química detalhada confere a este trabalho um pioneirismo no Brasil, pois apenas trabalhos com escoamentos não-reativos foram desenvolvidos até o momento no país [47].

Capítulo 2

TEORIA DO MODELO FÍSICO

A metodologia que será adotada no presente trabalho consiste resumidamente de:

- Revisão bibliográfica pertinente à modelagem de combustão turbulenta e modelo LES;
- Formulação teórica das equações que descrevem o problema de chamas de difusão turbulentas no âmbito do modelo LES com descrição do modelo químico;
- Formulação do método de implementação numérica dos algoritmos;
- Implementação numérica das rotinas que compõem o modelo LES e modelo químico;
- Validação das rotinas com resultados experimentais da literatura e resultados numéricos obtidos com *softwares* comerciais disponíveis na escola;
- Interpretação e consolidação dos resultados obtidos.

A seguir é apresentada a fundamentação teórica do método de LES para turbulência. Serão mostrados também modelos de combustão turbulenta normalmente utilizados e o modelo proposto no presente trabalho. Finalmente será mostrado o arcabouço da implementação numérica pretendida.

2.1 Equações de Transporte

O fenômeno de combustão turbulenta é descrito pelas equações de conservação de massa, quantidade de movimento, energia e transporte de espécies químicas. Adi-

cionalmente é necessário um modelo termo-químico que relacione as espécies químicas com entalpia, pressão e temperatura da mistura. O modelo de cinética química dá a taxa de produção/consumo das espécies químicas do modelo termo-químico. As equações de conservação de massa e conservação do *momentum* são dadas por:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j) = 0 \quad (2.1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_i u_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} \rho \nu \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) - \frac{2}{3} \rho \nu \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} - \frac{\partial p}{\partial x_i} + \rho g_i \quad (2.2)$$

A equação geral para transporte de um escalar é dada por:

$$\underbrace{\frac{\partial \phi}{\partial t}}_{\text{acumulação}} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_j} (\phi u_j)}_{\text{convecção}} = \underbrace{\frac{\partial D_j(\phi)}{\partial x_j}}_{\text{difusão}} + \underbrace{S_\phi}_{\text{fonte}} \quad (2.3)$$

Para a modelagem de chamas, a mistura de combustível, oxidante e produtos da combustão devem ser incluídos numa equação de transporte das espécies. Estas equações podem ser escritas em função da fração mássica Y_α , que descreve a relação entre a massa m_α de uma espécie α em relação a massa total $m = \sum_{\beta=1}^{N_\alpha} m_\beta$, de todas as espécies β .

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho Y_\alpha) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho Y_\alpha u_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho D_\alpha \frac{\partial Y_\alpha}{\partial x_j} \right) + S_{Y_\alpha} \quad (2.4)$$

Nesta equação, D_α é o coeficiente de difusividade das espécies α . O termo S_{Y_α} representa a taxa volumétrica de produção ou consumo da espécie α . Este termo é dado pelo mecanismo cinético adotado.

Alguns modelos de combustão, como por exemplo equilíbrio químico e *flamelets*, utilizam o conceito de escalar conservativo, que são grandezas escalares sem termo de fonte/sumidouro em sua equação de transporte. Para o processo de combustão, este é o caso da equação da energia, desprezando-se efeitos de radiação, e para os elementos químicos (C, H, O e N) que se conservam nas reações de combustão. Introduzindo-se

o termo fração de mistura f para um escalar conservativo, através da substituição de Y_α por f e D_α por D_f na equação acima, obtém-se a equação para o escalar conservativo:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho f) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho f u_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho D_f \frac{\partial f}{\partial x_j} \right) \quad (2.5)$$

Pode-se também obter a equação de transporte da entalpia h (equação da energia), desprezando-se os efeitos de radiação:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho h) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho h u_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\lambda}{c_p} \frac{\partial h}{\partial x_j} \right) \quad (2.6)$$

Na seção 2.3 serão discutidos em mais detalhes os modelos que utilizam as eqs. (2.5) e (2.6) no conceito de escalares conservativos.

2.2 Equações de Transporte Filtradas

As vantagens da utilização do modelo de turbulência LES em relação a RANS e DNS já foram apresentadas no Capítulo 1. A seguir serão mostradas as equações de transporte adaptadas ao modelo LES.

LES resolve escoamentos turbulentos transitórios através de um compromisso com uma malha computacional satisfatória. Então, parte da flutuação turbulenta fica indeterminada. Deste modo, um modelo deve ser implementado para descrever a influência dos efeitos das pequenas escalas sobre as grandes. Assim, LES representa uma abordagem onde os esforços computacionais podem ser dimensionados para a precisão que se queira obter.

LES baseia-se no fato de que a maior parte da energia cinética turbulenta se concentra nas estruturas de grandes escalas. No espectro de energia cinética turbulenta em função das escalas de comprimento podem ser observadas três regiões: a região que contém energia das grandes escalas, a região onde energia é dissipada pelos pequenos vórtices, e a região intermediária chamada de inercial, onde os vórtices médios transferem energia da grande para a pequena escala. Para um modelo LES viável, parte da região

inercial deve ser resolvida, enquanto que a região de dissipação pode ser modelada inteiramente. As regiões descritas acima podem ser vistas na Fig. 2.1.

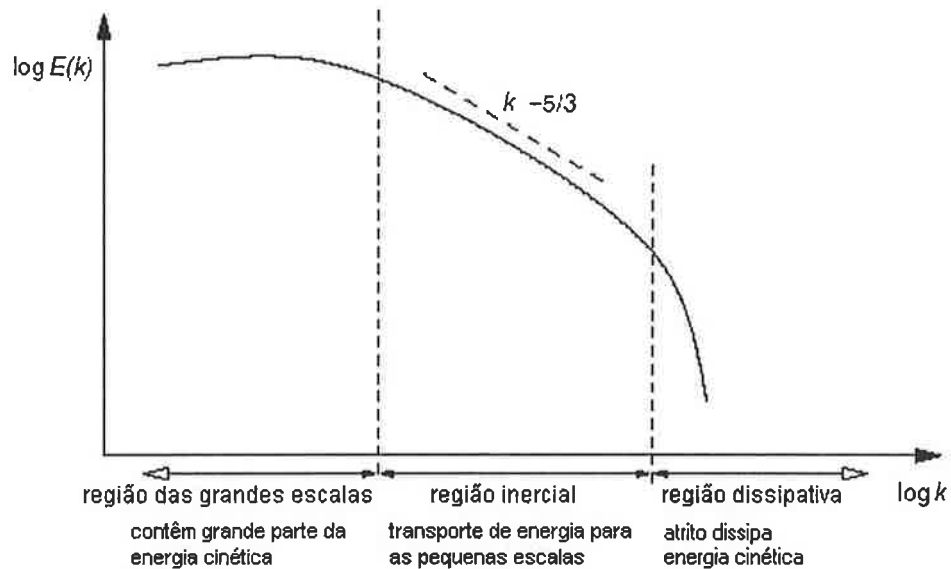


Figura 2.1: Espectro de turbulência

As equações governantes (2.1), (2.2), (2.4), (2.5) e (2.6) compreendem o espectro de todas as escalas. Deste modo, as equações devem ser alteradas para resolver apenas as grandes escalas [47]. Isto é feito através da aplicação de uma função filtro h , do tipo passa-baixa, nas equações governantes. Este filtro remove as menores flutuações de modo que as equações filtradas descrevem os campos espaciais filtrados, também chamados de médias espaciais. No modelo LES as escalas de tempo do escoamento turbulento são resolvidas diretamente, assim não há necessidade de modelagem do escoamento médio no tempo, como acontece em RANS. O campo filtrado $\overline{\phi(x_j, t)}$ é determinado pela convolução com a função filtro $h(x_j - x'_j)$. Como resultado do produto do filtro local e o campo ϕ , obtém-se o valor da variável ϕ filtrada $\overline{\phi(x_j, t)}$ espacialmente:

$$\overline{\phi(x_j, t)} = \iiint_{-\infty}^{\infty} \phi(x_j - x'_j) h(x'_j) dx'_1 dx'_2 dx'_3 \quad (2.7)$$

A diferença entre o campo filtrado $\overline{\phi}$ (porção da grande escala de ϕ) e o campo original ϕ é chamado de sua porção da pequena escala ou submalha de ϕ .

$$\phi - \bar{\phi} = \phi' \Leftrightarrow \phi = \underbrace{\bar{\phi}}_{\text{grande escala}} + \underbrace{\phi'}_{\text{pequena escala}} \quad (2.8)$$

A filtragem das equações governantes gera o aparecimento de termos de difícil modelagem envolvendo a densidade e a propriedade ϕ . Entretanto, isto pode ser evitado através da aplicação do *filtro de Favre*, um filtro de densidade ponderada.

Aplicando o filtro de Favre no campo ϕ , resulta em $\tilde{\phi}$ mais a contribuição da estrutura fina ϕ'' definida na eq. (2.9). Com o filtro de Favre, a correlação $\overline{\rho\phi}$ é igual a $\overline{\rho}\tilde{\phi}$.

$$\tilde{\phi} = \frac{\overline{\rho\phi}}{\overline{\rho}} \quad \text{onde} \quad \phi = \tilde{\phi} + \phi'' \quad (2.9)$$

Da aplicação do filtro de Favre às equações governantes, obtém-se para a equação da conservação da massa, quantidade de movimento e variável conservada as equações abaixo respectivamente.

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{\rho u_j}) = 0 \Leftrightarrow \frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_j) = 0 \quad (2.10)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{u}_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j) = & \quad (2.11) \\ \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\bar{\rho} \left(\nu \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} + \nu \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} \right) - \frac{2}{3} \bar{\rho} \nu \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right] - \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \bar{\rho} g_i \end{aligned}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{f}) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{f} \tilde{u}_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\bar{\rho} \widetilde{D_f} \frac{\partial \tilde{f}}{\partial x_j} + \bar{\rho} F_j^{\text{sgs}} \right) \quad (2.12)$$

A eq. (2.11) ainda inclui termos desconhecidos. O termo difusivo pode ser aproximado, com pequeno erro (ver [24]), por

$$\nu \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \approx \tilde{\nu} \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \quad (2.13)$$

e a correlação $\tilde{u}_i \tilde{u}_j$ pode ser dividida entre a escala resolvida $\widehat{u}_i \widehat{u}_j$ e a contribuição das pequenas estruturas τ_{ij}^{sgs} :

$$\widetilde{u_i u_j} = \widetilde{u_i} \widetilde{u_j} + \tau_{ij}^{\text{sgs}} \quad (2.14)$$

A contribuição das pequenas estruturas τ_{ij}^{sgs} é conhecida como o tensor das tensões da submalha, representativo das tensões de cisalhamento do movimento turbulento não resolvido. Na modelagem de combustão, este tensor não pode ser desprezado devido ao fato que todas as reações entre as espécies químicas se processam na pequena escala.

Com as eq. (2.13) e eq. (2.14), a eq. (2.11) pode ser alterada para ser resolvida nos termos filtrados analogamente a equação não-filtrada. A única diferença é a adição das tensões de submalha no termo de difusão:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\overline{\rho u_i}) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{\rho u_i u_j}) = & \quad (2.15) \\ \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\overline{\rho} \tilde{\nu} \left(\frac{\partial \widetilde{u_j}}{\partial x_i} + \frac{\partial \widetilde{u_i}}{\partial x_j} \right) - \frac{2}{3} \overline{\rho} \tilde{\nu} \frac{\partial \widetilde{u_k}}{\partial x_k} \delta_{ij} + \overline{\rho} \tau_{ij}^{\text{sgs}} \right] - \frac{\partial \overline{p}}{\partial x_i} + \overline{\rho} g_i \end{aligned}$$

Analogamente a τ_{ij}^{sgs} , o termo F_j^{sgs} da eq. (2.12) refere-se ao termo de fluxo do escalar conservativo no movimento turbulento não resolvido.

Este fluxo das pequenas escalas é parte do termo convectivo $\overline{\rho} \widetilde{f u_j}$, juntamente com o termo da grande escala $\widetilde{f u_j}$:

$$\widetilde{f u_j} = \widetilde{f} \widetilde{u_j} + F_j^{\text{sgs}} \quad (2.16)$$

Com as equações filtradas para continuidade eq. (2.10), quantidade de movimento eq. (2.11) e fração de mistura eq. (2.12), tem-se um conjunto de equações diferenciais que descrevem o escoamento para as grandes escalas. Excetuando-se os termos da submalha τ_{ij}^{sgs} e F_j^{sgs} , estas equações (para as quantidades filtradas $\overline{\rho}$, $\widetilde{u_j}$ e \widetilde{f}) remetem às equações para as quantidades não-filtradas ρ , u_j and f (eq. (2.1), eq. (2.2) e eq. (2.5)).

O termo da submalha τ_{ij}^{sgs} é modelado pela adição da viscosidade turbulenta ν_t a viscosidade molecular ν , resultando na viscosidade efetiva: $\nu_{ef} = \nu + \nu_t$.

A viscosidade turbulenta ν_t é então calculada pelo modelo de Smagorinsky, um modelo simples com bons resultados numéricos, porém que tende a dissipar muita energia cinética. O modelo de Smagorinsky relaciona a viscosidade turbulenta ν_t com a largura Δ do filtro LES e o tensor deformação \widetilde{S}_{ij} :

$$\nu_t = (C_s \Delta)^2 \left| \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \widetilde{u}_j}{\partial x_i} + \frac{\partial \widetilde{u}_i}{\partial x_j} \right) \right| \quad \text{ou} \quad \nu_t = (C_s \Delta)^2 |\widetilde{S}| \quad (2.17)$$

$$\text{onde} \quad \widetilde{S}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \widetilde{u}_j}{\partial x_i} + \frac{\partial \widetilde{u}_i}{\partial x_j} \right) \quad \text{e} \quad |\widetilde{S}| = \sqrt{2 \widetilde{S}_{ik} \widetilde{S}_{lk}} \quad (2.18)$$

onde C_s é o coeficiente do modelo que varia entre 0,1 e 0,3 em função da malha ou largura do filtro Δ . A escala de comprimento $C_s \Delta$ é escolhida como sendo proporcional a largura da célula do CFD, que é coerente com a idéia de que as estruturas não-resolvidas (menores que a largura da célula) serão modeladas.

2.3 Modelos Termo-Químicos de Combustão Turbulenta

A seguir serão apresentados modelos de combustão turbulenta já amplamente utilizados pela comunidade de pesquisa em modelagem de combustão. Este trabalho fará uso do modelo de folha de chama (*flame sheet model*) junto com a fração de mistura, não obstante serem os modelos de equilíbrio químico e *flamelets* descritos para uma futura melhoria do código CFD, no que se refere à cinética química.

2.3.1 Fração de Mistura

A fim de reduzir os esforços para simulação de combustão sem pré-mistura, utiliza-se o conceito de fração de mistura como escalar conservativo. Detalhes desta formulação podem ser encontrados em [55]. Este modelo é amplamente utilizado na literatura e também será utilizado neste trabalho, como uma abordagem simplificada do problema de combustão em chamas de difusão turbulentas. A equação de transporte do escalar conservativo utiliza o formalismo de Shvab-Zel'dovich, que se baseia nas seguintes hipóteses:

- Não há fluxos de calor devido ao gradiente de concentração de espécies (efeito Dufour);
- Não há difusão causada por gradientes de pressão;
- Não há transporte de espécies devido ao gradiente de temperatura (efeito Soret);
- Não há fluxos difusivos devido a forças externas;

- Não há transferência de calor por radiação;
- Não há difusão preferencial. Há uma difusividade comum para todas as espécies;
- O número de Lewis (difusão de calor/difusão de massa) é unitário;
- A pressão é constante (baixo número de Mach).

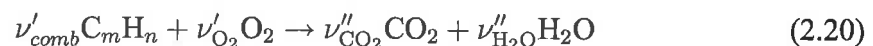
Com as hipóteses acima, as equações para as espécies eq. (2.4) e entalpia eq. (2.6) podem ser representadas por uma única equação, que é a equação de transporte para a fração de mistura eq. (2.5).

Na maioria das chamas sem pré-mistura, uma corrente de combustível (*comb*) é misturada com oxidante (*ox*). Neste caso de mistura de duas espécies, a fração de mistura para casos reativos para uma espécie α é dada por:

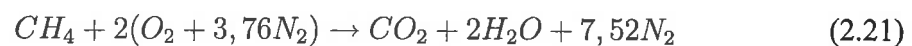
$$f_{\alpha} = \frac{Y_{\alpha} - Y_{\alpha,ox}}{Y_{\alpha,comb} - Y_{\alpha,ox}} \quad (2.19)$$

Esta definição relaciona a fração mássica Y_{α} da espécie α com as frações mássicas $Y_{\alpha,comb}$ e $Y_{\alpha,ox}$ da mesma espécie nas correntes de combustível e oxidante. Uma definição análoga pode ser também obtida com os valores da entalpia da mistura na corrente de combustível e no ar ou meio oxidante.

Para exemplificar o cálculo da variável fração de mistura, considere-se uma reação de combustão de um hidrocarboneto genérico



Para considerar a presença do N_2 na reação global de queima de metano, deve-se modificar a expressão para a fração de mistura. Com a inclusão do N_2 , a reação global é escrita como:



A partir da definição de fração de mistura como sendo a razão entre massa de material vindo da corrente de combustível e massa da mistura [55] num determinado volume de

controle, pode-se chegar às relações funcionais entre a fração de mistura e as frações mássicas da mistura gasosa. Detalhes deste equacionamento podem ser encontrados também em [14] e não serão reproduzidos aqui por razão de espaço. Deve-se ressaltar, entretanto, que neste formalismo o N_2 é sempre considerado como inerte. As implicações desta hipótese no presente trabalho são discutidas logo a seguir.

O valor da fração de mistura estequiométrica para a combustão de metano, considerando o N_2 presente no ar é

$$f_{est} = \frac{1}{\nu + 1} = \frac{1}{17,16 + 1} = 0,055 \quad (2.22)$$

onde ν é o coeficiente estequiométrico da reação global escrita em base mássica.

Na Fig. 2.2, o valor de f_{est} é indicado pela linha vertical. As relações funcionais entre as frações mássicas de CH_4 , O_2 , N_2 , H_2O e CO_2 podem ser resumidas como segue.

Para toda a faixa de variação da fração de mistura $0,0 \leq f \leq 1,0$ valem para a fração mássica de N_2 e de H_2O e CO_2 as relações:

$$Y_{N_2} = 0,766(1 - f_{est}) \quad (2.23)$$

$$Y_{pr} = Y_{CO_2} + Y_{H_2O} = 1 - Y_{N_2} - Y_{CH_4} - Y_{O_2} \quad (2.24)$$

onde Y_{pr} significa a soma das frações mássicas dos produtos H_2O e CO_2

$$Y_{CO_2} = \frac{Y_{pr}}{1,818} \quad (2.25)$$

$$Y_{H_2O} = Y_{pr} - Y_{CO_2} \quad (2.26)$$

Na região $0,0 \leq f \leq 1,0$ valem as relações:

$$Y_{CH_4} = 0 \quad (2.27)$$

$$Y_{O_2} = Y_{O_{2,2}} \left(1 - \frac{f}{f_{est}} \right) \quad (2.28)$$

onde $Y_{O_{2,2}}$ é o valor da fração mássica de O_2 no ar e vale, para fração molar de 21%, 0,233. Na região $0, 0 \leq f \leq 1, 0$ valem as relações:

$$Y_{O_2} = 0, 0 \quad (2.29)$$

$$Y_{CH_4} = \frac{f - f_{est}}{(1 - f_{est})} \quad (2.30)$$

Com as eqs. (2.22) a (2.30) pode-se construir a Fig. 2.2.

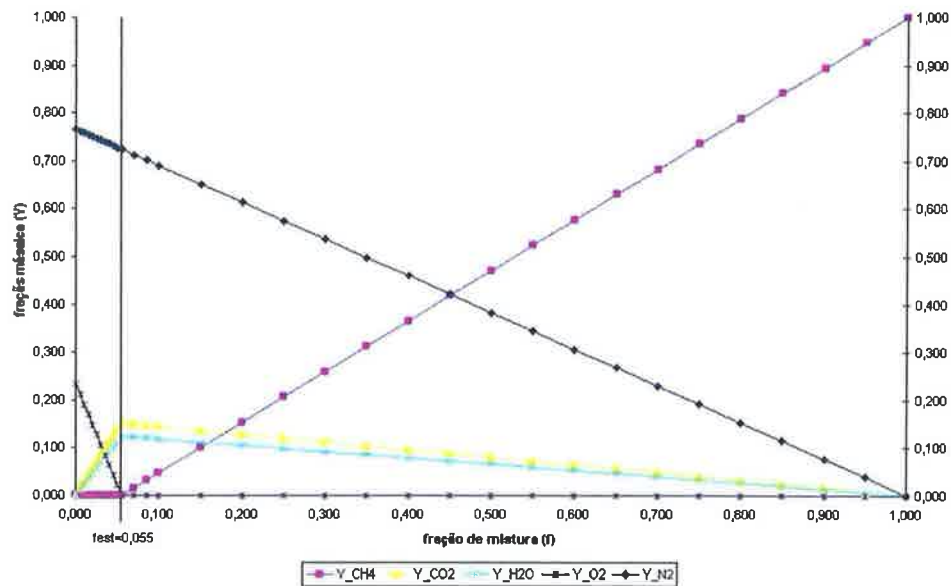


Figura 2.2: Relação funcional entre a fração de mistura e frações mássicas

A grande vantagem da utilização do modelo de fração de mistura ou *Flame Sheet Model* é o fato da equação de transporte desta grandeza não possuir termo de fonte [55]. Na verdade, a fração de mistura é uma grandeza conservada. Pode se mostrar [59] que a equação de transporte da fração de mistura é análoga a uma equação de transporte de um elemento químico (C, H ou O), cuja massa se conserva durante as reações de combustão e também da equação da energia, sem termo de radiação e com normalização conveniente da entalpia da mistura.

Desta forma, modelos fundamentados na fração de mistura reduzem o problema de chamas não pré-misturadas a um problema de mistura laminar ou turbulenta, conforme o regime do escoamento. Assim sendo, resolve-se uma única equação de transporte que representa tanto o processo de transporte de espécies quanto o de energia. Isto faz com que o modelo de combustão fundamentado na fração de mistura seja de rápida implementação numérica.

A temperatura da mistura pode ser determinada em função da fração de mistura e de uma equação calorífica de estado ($u = u(T, v)$, $h = h(T, P)$). Conforme Spalding [48], assume-se que:

1. o calor específico de cada espécie (combustível, oxidante e produtos) são constantes e iguais: $c_{p,comb} = c_{p,ox} = c_{p,pr} \equiv c_p$.
2. as entalpias de formação do oxidante e dos produtos são nulas: $h_{f,ox}^0 = h_{f,pr}^0 = 0$. Isto resulta na entalpia de formação do combustível ser igual a seu poder calorífico.

Com as hipóteses acima, a entalpia da mistura pode ser escrita como:

$$h = \sum Y_i h_i = Y_{comb} \Delta h_c + c_p (T - T_{ref}) \quad (2.31)$$

onde Δh_c é o poder calorífico e T_{ref} é a temperatura de referência, ou ao longe, para a mistura.

Utilizando-se o conceito de entalpia adimensional h^* :

$$h^* \equiv \frac{h - h_{ox,\infty}}{h_{comb,s} - h_{ox,\infty}} \quad (2.32)$$

onde $h_{ox,\infty}$ é a entalpia do oxidante ao longe e $h_{comb,s}$ é a entalpia do combustível na saída do jato.

Sustituindo a eq. (2.31) na eq. (2.32), e tendo em vista que a similaridade entre as equações de transporte para escalares (entalpia, temperatura, espécies químicas, etc.), $h^* = f$, obtém-se:

$$h^* = \frac{Y_{comb}\Delta h_c + c_p(T - T_{ox,\infty})}{\Delta h_c + c_p(T_{comb,s} - T_{ox,\infty})} \equiv f \quad (2.33)$$

onde as definições $h_{ox,\infty} \equiv c_p(T_{ox,\infty} - T_{ref})$ e $h_{comb,s} \equiv c_p(T_{comb,s} - T_{ref})$ foram previamente substituídas. Resolvendo a eq. (2.33) para T , obtém-se a relação $T = T(f)$, sabendo-se que Y_F é também uma função da fração de mistura f :

$$T = (f - Y_{comb}) \frac{\Delta h_c}{c_p} + f(T_{comb,s} - T_{ox,\infty}) + T_{ox,\infty} \quad (2.34)$$

Mais uma vez, com a eq. (2.34) acima, mais as eqs. (2.22) a (2.30), obtém-se a temperatura para toda a faixa de variação da fração de mistura $0, 0 \leq f \leq 1, 0$:

Dentro da chama

$$T(f) = f \left[(T_{comb,s} - T_{ox,\infty}) - \frac{f_{est}}{1 - f_{est}} \frac{\Delta h_c}{c_p} \right] + T_{ox,\infty} + \frac{f_{est}}{(1 - f_{est})c_p} \Delta h_c \quad (2.35)$$

Na chama e fora da chama

$$T(f) = f \left(\frac{\Delta h_c}{c_p} + T_{comb,s} - T_{ox,\infty} \right) + T_{ox,\infty} \quad (2.36)$$

A Fig. 2.3 mostra como a temperatura da mistura varia linearmente com f nas regiões interna e externa da chama, com um máximo na chama. É interessante notar que a temperatura na chama dada pela eq. (2.36) é idêntica a *temperatura de chama adiabática*, para combustível e oxidante com temperaturas iniciais $T_{comb,s}$ e $T_{ox,\infty}$, respectivamente. No caso do metano (Fig. 2.3), para $T_{comb,s} = T_{ox,\infty} = 20^\circ C$, $f_{est} = 0,055$, $c_p = 1.200 J/kgK$ e $\Delta h_c = 50.010 J/kgK$, obtém-se uma temperatura adiabática de chama de $2.293^\circ C$.

2.3.2 Equilíbrio Químico

Este modelo de combustão turbulenta utiliza uma abordagem mais simples que corresponde à hipótese de que todas as reações se processam instantaneamente, resultando

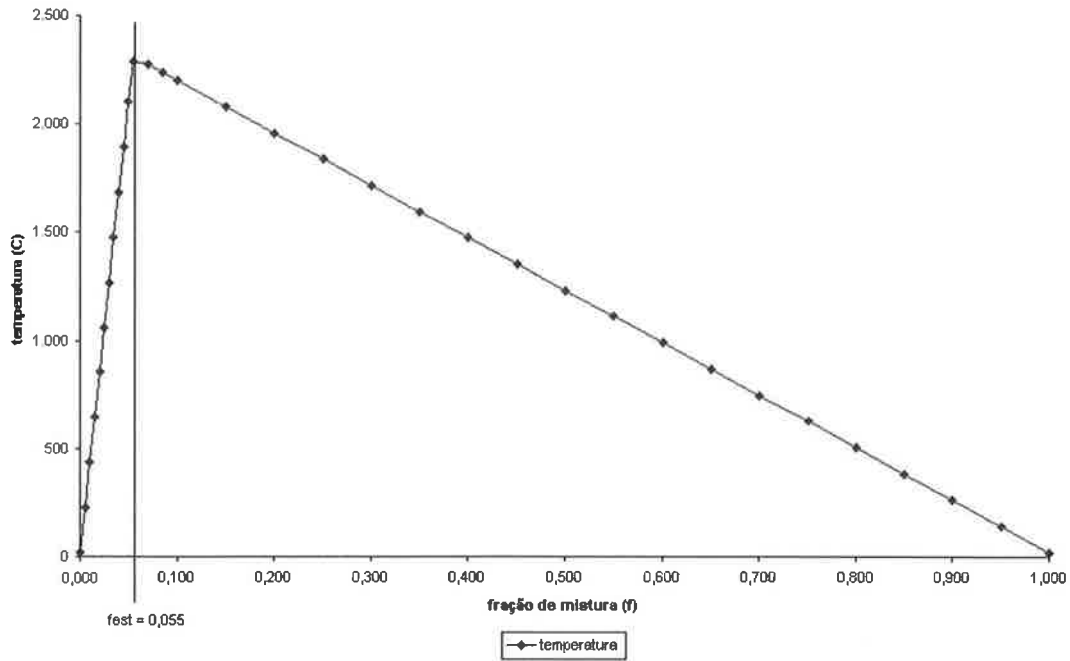


Figura 2.3: Relação funcional entre a fração de mistura e temperatura

em um regime permanente estável. Aqui, toda cinética de reação química é desprezada e todos os escalares dependentes ϕ (temperatura, concentração das espécies químicas, densidade e outros) tornam-se uma função, $\phi(f)$, da fração de mistura f . Assim, o “estado” químico para toda a faixa da fração de mistura ($0 \leq f \leq 1$) pode ser colocado em uma tabela, sem a necessidade de ser calculado em cada passo de tempo da simulação [25]. Desta forma, durante a simulação, a tabela informa os valores das respectivas variáveis.

Como em LES apenas o valor filtrado \bar{f} da fração de mistura é conhecido, a distribuição na submalha deve ser modelada. Caso contrário, a utilização do valor filtrado - média espacial - como entrada na tabela $\phi(f)$ levaria a valores médios com grande erro, devido às não linearidades no modelo termo-químico. A distribuição de f na submalha é descrita por uma função densidade de probabilidade (PDF), que é uma medida da probabilidade de ocorrência de uma certa fração de mistura. Com esta PDF, a probabilidade $P(f_1 < f < f_2)$ de uma fração de mistura entre f_1 e f_2 é dada por:

$$P(f_1 < f < f_2) = \int_{f_1}^{f_2} p(f) df \quad (2.37)$$

Com $p(f)$, os escalares filtrados $\overline{\phi(f)}$ são definidos como:

$$\overline{\phi(f)} = \int_0^1 \phi(f) p(f) df \quad (2.38)$$

Sendo a PDF da fração de mistura uma função conhecida, os escalares filtrados dependentes $\overline{\phi(f)}$ podem ser computados com precisão. Entretanto, esta informação nas pequenas estruturas foi eliminada pelo filtro, e para obter os valores de $\overline{\phi(f)}$, a PDF é modelada como uma função da variância da submalha $\widetilde{f''^2}$ da fração de mistura. Esta PDF, então, é presumida ser uma função β [9].

$$p(f) = \frac{f^{a-1}(1-f)^{b-1}}{\int_0^1 f^{a-1}(1-f)^{b-1} df}$$

com

$$a = \widetilde{f} \left(\frac{\widetilde{f}(1-\widetilde{f})}{\widetilde{f''^2}} - 1 \right) \quad (2.39)$$

e

$$b = (1-\widetilde{f}) \left(\frac{\widetilde{f}(1-\widetilde{f})}{\widetilde{f''^2}} - 1 \right)$$

Com a função β , as variáveis dependentes $\overline{\phi(f)}$ são agora uma função da fração de mistura filtrada e de sua variância de submalha $\overline{\phi(f)} = \phi(\widetilde{f}, \widetilde{f''^2})$. Esta função é tabelada, de modo que o estado químico pode ser determinado apenas acessando uma tabela bidimensional. A PDF presumida como uma função é parametrizada pelo valor filtrado da fração de mistura e sua variância. Assim sendo, é necessário resolver duas equações de transporte para a fração de mistura \widetilde{f} e $\widetilde{f''^2}$. Estas equações de transporte têm a forma da eq. (2.11) com diferenças apenas no tensor submalha, que é modelado.

Devido à simplificação de se negligenciar a cinética química, este tipo de modelo possui alguns problemas e limitações, como a má predição da concentração das espécies químicas intermediárias (como H , O e OH) por não distinguir entre gases reagentes e produtos, não permitindo a descrição de efeitos como extinção de chama (*quenching*) ou re-ignição, além de não considerar a pré-mistura do combustível.

2.3.3 Flamelets - Elementos de Chama

Este tipo de modelo é uma abordagem intuitivamente simples, porém melhor do que modelo de equilíbrio químico. O modelo *flamelet* [37] considera uma chama turbulenta

como um conjunto de minúsculas chamas laminares, ou estruturas chamadas *flamelets*,

Como a fração de mistura é dada pela eq. (2.10), a localização da superfície da chama pode ser determinada, pois está localizada nas iso-superfícies de fração de mistura estequiométrica $f = f_{est}$. Ver detalhes na Fig. 2.4.

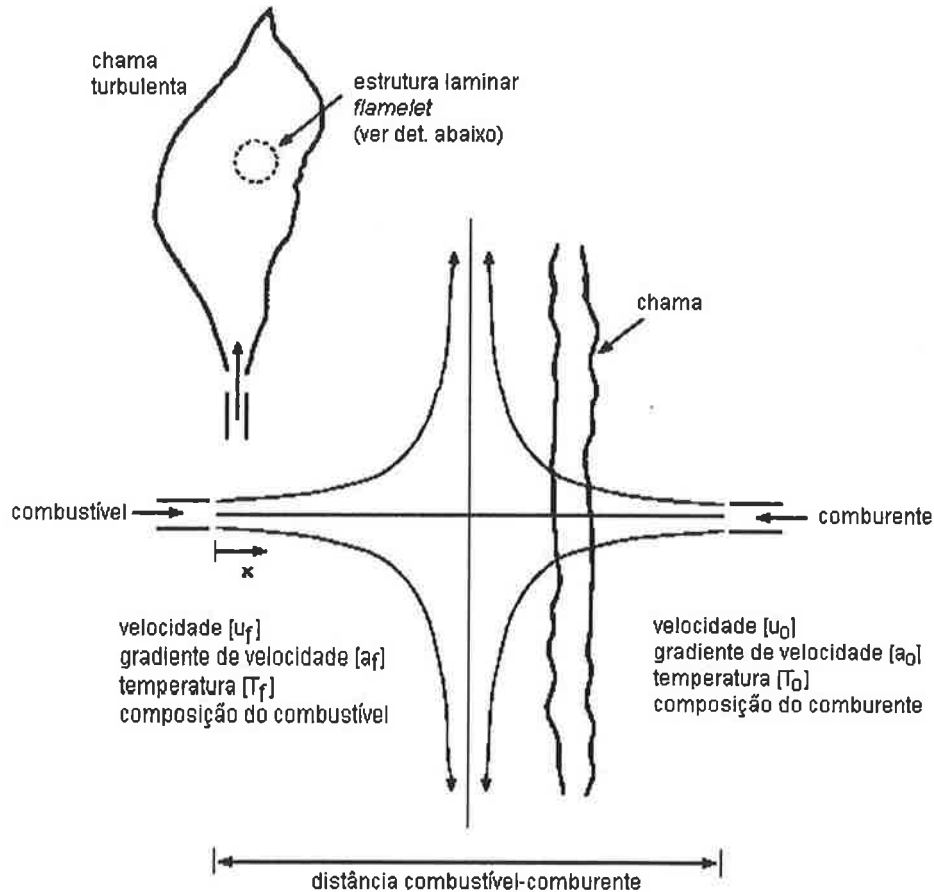


Figura 2.4: Descrição física de uma estrutura *flamelet* [42]

Partindo da equação na forma não conservativa da fração mássica das espécies, para uma espécie α , tem-se:

$$\rho \frac{\partial}{\partial t} (Y_\alpha) + \rho u_j \frac{\partial}{\partial x_j} (Y_\alpha) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho D_\alpha \frac{\partial Y_\alpha}{\partial x_j} \right) + S_{Y_\alpha} \quad (2.40)$$

Uma transformação de coordenadas é aplicada à referência cartesiana (x_1, x_2, x_3) para uma referência combinada de fração de mistura e coordenadas espaciais (f, f_2, f_3) . Aqui, f é normal a superfície da chama. As componentes tangenciais são $f_2 = x_2$ e $f_3 = x_3$, e a regra de transformação é dada por:

$$\frac{\partial}{\partial x_1} = \frac{\partial f}{\partial x_1} \frac{\partial}{\partial f} \quad (2.41)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_2} = \frac{\partial}{\partial f_2} + \frac{\partial f}{\partial x_2} \frac{\partial}{\partial f} \quad (2.42)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_3} = \frac{\partial}{\partial f_3} + \frac{\partial f}{\partial x_3} \frac{\partial}{\partial f} \quad (2.43)$$

Utilizando as equações de transformação acima na eq. (2.41), e para um *flamelet* fino, onde a equação resultante é dominada pelo termo derivativo de segunda ordem na direção de f , de modo que os outros termos podem ser desprezados, com exceção dos termos de difusão e fonte. A equação para *flamelet* se torna

$$\rho \frac{\partial x_\alpha}{\partial t} - \rho D_\alpha \left(\frac{\partial f}{\partial x_j} \frac{\partial f}{\partial x_j} \right) \frac{\partial^2 x_\alpha}{\partial f^2} = S_{x_\alpha} \quad (2.44)$$

Escrevendo a eq. (2.44) em função da taxa de dissipação escalar, χ , tem-se a equação para *flamelet* na sua forma mais conhecida:

$$\rho \frac{\partial x_\alpha}{\partial t} - \rho \frac{\chi}{2} \frac{\partial^2 x_\alpha}{\partial f^2} = S_{x_\alpha} \quad (2.45)$$

onde a taxa de dissipação do escalar é definida por:

$$\chi = 2 D_\alpha \left(\frac{\partial f}{\partial x_j} \right)^2 \quad (2.46)$$

A taxa de dissipação escalar χ é uma medida do inverso da espessura de chama, onde uma fina zona de reação é caracterizada por forte difusão e altas taxas de reação. Se a dissipação do escalar convergir para zero, uma chama fina não pode ser mais observada e a teoria de *flamelet* perde sua base. Para χ elevada, a difusão se torna tão alta que os radicais necessários para a reação são transportados para longe da frente de chama e então ocorre a extinção da chama (*quenching*). Uma vez que as escalas de reação química são pequenas, na maioria dos casos o termo de acumulação pode ser desprezado, simplificando a eq. (2.45) para a equação de *flamelet* em regime permanente:

$$-\rho \frac{\chi}{2} \frac{\partial^2 x_\alpha}{\partial f^2} = S_{x_\alpha} \quad (2.47)$$

A eq. (2.47), juntamente com o mecanismo de reação, pode ser integrada na fração de mistura f , obtendo a concentração da espécie química Y_α como função apenas de f e χ . Este trabalho de integração, devido aos esforços computacionais, é feito antes da simulação para um conjunto de f e χ , obtendo resultados na forma de tabela (tabela de *flamelet*).

Neste modelo, analogamente ao modelo de equilíbrio químico, o escalar filtrado não é apenas função dos parâmetros filtrados de Favre, devendo ser considerada uma PDF de submalha $p(f, \chi)$.

$$\overline{\phi(f, \chi)} = \int_0^1 \int_0^\infty \phi(f, \chi) p(f, \chi) d\chi df \quad (2.48)$$

Na obtenção desta PDF, f e χ são consideradas independentes, tal que $p(f, \chi) = p(f) \cdot p(\chi)$. Aqui $p(f)$ pode ser descrita pelas funções β , $p(f) = \beta(\tilde{f}, \widetilde{f''^2})$.

Capítulo 3

IMPLEMENTAÇÃO NUMÉRICA

Nas seções anteriores foram mostradas as equações que descrevem o processo de combustão de uma chama de difusão turbulenta, no caso em estudo, de metano. O objetivo do presente trabalho é a construção de um código de simulação numérica com o modelo físico proposto. Nos itens a seguir é feita uma descrição breve das técnicas que foram implementadas no código para solução numérica do problema de combustão turbulenta, bem como seus impactos no resultado final.

3.1 Discretização das Equações

As equações que descrevem o processo de combustão turbulenta são equações diferenciais parciais, as quais são precisas em todo o campo do escoamento. Entretanto, não é possível e nem necessário computar uma solução contínua para toda a área de interesse. Ao contrário, o domínio é dividido em número finito de elementos, para os quais as equações são resolvidas. No presente trabalho é utilizado o Método dos Volumes Finitos (FVM) [33, 11, 57], não obstante a possibilidade do Método de Elementos Finitos (FEM), bem como o Método das Diferenças Finitas (FDM) serem aplicados.

3.1.1 Método dos Volumes Finitos

Através desta abordagem, a região de interesse é discretizada em um número finito de volumes. Em cada um destes volumes, as equações governantes são integradas. Os termos nessas equações são simplificados de forma a se obter um conjunto de equações

algébricas *simples* que descrevem o escoamento.

A equação para volumes finitos da equação geral de transporte eq. (3.1) é dada por:

$$\int_{\Delta V} \frac{\partial \phi}{\partial t} dV + \int_{\Delta V} \frac{\partial}{\partial x_j} (\phi u_j) dV = \int_{\Delta V} \frac{\partial D_j(\phi)}{\partial x_j} dV + \int_{\Delta V} S_\phi dV \quad (3.1)$$

3.1.2 Discretização das Equações de Transporte

A eq. (3.1) acima é aplicada em volumes finitos de uma determinada geometria a ser resolvida. A Fig. 3.1 mostra o esquema bidimensional de um domínio que foi particionado em volumes finitos. Na mesma figura, o volume de controle C está cercado pelos volumes vizinhos N, S, E, W . Em três dimensões, há ainda os vizinhos superior e inferior T e B , respectivamente. As superfícies separando duas células são denotadas por A_n, A_s, A_e, A_w, A_t e A_b , e os fluxos associados são F_n, F_s, F_e, F_w, F_t e F_b . Introduce-se, ainda, os valores médios $\phi^{\Delta V}$ e $S_\phi^{\Delta V}$ de ϕ e seu termo fonte S_ϕ , respectivamente, sobre o volume ΔV . Utilizando-se o teorema de Gauss, pode-se reescrever a eq. (3.1) como:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\phi^{\Delta V} \delta V) + \sum_{n,e,\dots} F_{f,C} = \sum_{n,e,\dots} F_{f,D} + S^{\Delta V}(\phi) \delta V \quad (3.2)$$

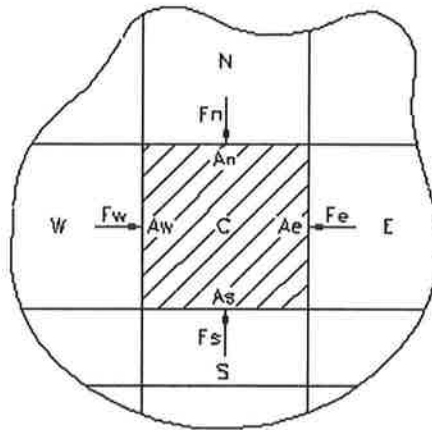
onde $F_{d,C}$ e $F_{d,D}$ denotam os fluxos convectivo e difusivo através de uma face f , respectivamente.

3.1.3 Discretização das Integrais de Volume e Superfície

A integral de volume será aproximada pelo valor no centro da célula (ϕ_C). Então ϕ_C denota o valor médio de $\phi^{\Delta V}$ para toda a célula. Para um esquema global de discretização de segunda ordem, a seguinte equação se faz suficiente:

$$\int_{\Delta V} \phi dV = \phi^{\Delta V} \Delta V \approx \phi_C \Delta V \quad (3.3)$$

Para superfícies, obtém-se uma equação análoga:

Figura 3.1: Volume de controle C

$$\int_{\Delta A_f} \phi dA = \phi^{\Delta A_f} \Delta A_f \approx \phi_f \Delta A_f \quad (3.4)$$

3.1.4 Malha Computacional

O domínio computacional é subdividido em volumes finitos, para os quais as equações governantes são resolvidas. Neste trabalho, tanto uma malha cilíndrica, como uma malha cartesiana são utilizadas no código CFD para diferentes validações. Um esquema da malha cilíndrica utilizada e seu sistema de referência é mostrado na Fig. 3.2. A malha cartesiana cortada nos planos axial e transversal é mostrada na Fig. 3.3. Tanto a malha cilíndrica como a cartesiana podem ser refinadas, produzindo volumes de controle menores onde há um interesse maior no resultado calculado, como no interior da chama, ou volumes maiores, como nas proximidades das fronteiras do domínio computacional.

O domínio computacional utilizado para a modelagem do problema é composto de dois tipos de células ou volumes finitos:

Célula Real que é a unidade básica do domínio que se pretende calcular.

Célula Ghost que é a unidade básica que faz fronteira com o domínio real.

A grande vantagem do uso de células *ghost* é que a solução computacional torna-se mais simples, isto é, as condições de contorno são armazenadas nelas ao invés de ser na fronteira, o que possibilita, por exemplo, escrever uma única equação de transporte

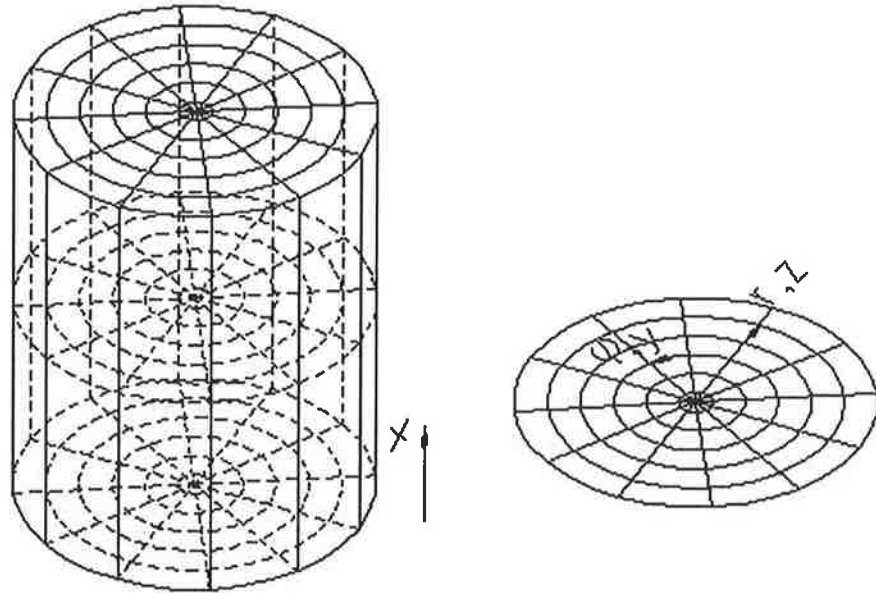


Figura 3.2: Esquema da malha cilíndrica

discretizada para resolver diferentes tipos de condição de contorno.

A Fig. 3.4 mostra um exemplo de uso de células *ghost* numa malha bidimensional 2x2.

3.1.5 Discretização dos Fluxos Difusivos

O seguinte termo de fluxo difusivo deve ser discretizado para cada volume de controle:

$$\int_{\Delta A} D_j(\phi) n_j dS = \sum_{n,e,\dots} F_{f,D} \quad (3.5)$$

Utilizando a equação de discretização para superfície e sabendo que depende proporcionalmente do gradiente de ϕ , obtém-se a expressão do fluxo difusivo $F_{f,D}$ sobre a superfície ΔA_f , assumindo uma malha retangular:

$$F_{f,D} \approx D \frac{\phi_2 - \phi_1}{\Delta x} \Delta A_f \quad (3.6)$$

onde os subscritos 1 e 2 referem-se aos valores de ϕ das células vizinhas.

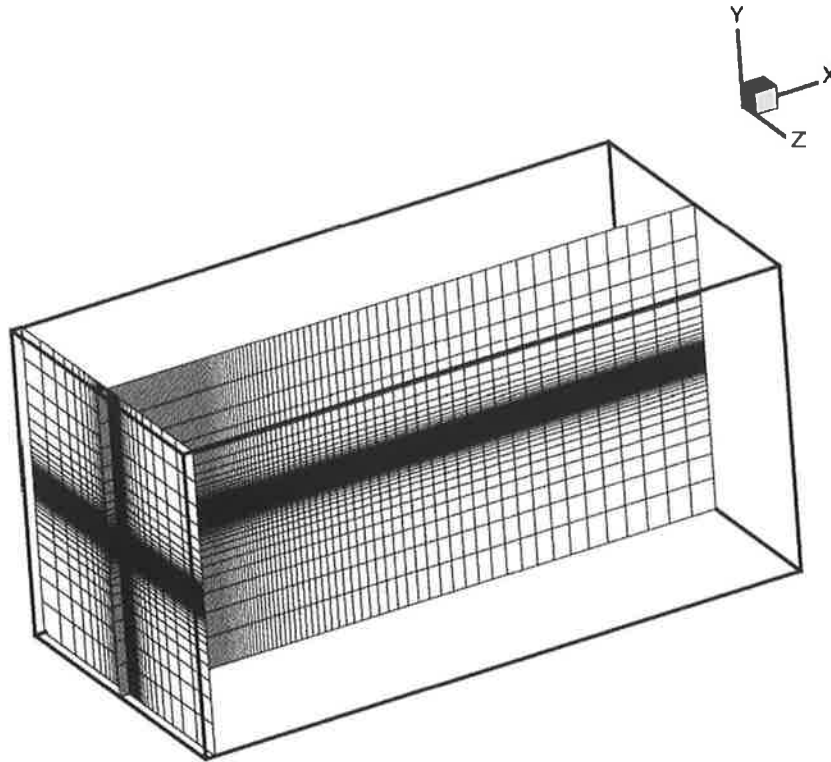


Figura 3.3: Esquema da malha cartesiana nos planos axial e transversal [19]

3.1.6 Discretização dos Fluxos Convectivos

Em escoamentos turbulentos, os fluxos convectivos são dominantes, portanto, o modo de discretização destes fluxos é vital para o trabalho.

O termo de convecção é discretizado para um volume de controle:

$$\int_{\Delta A} (\phi u_j) n_j dA = \sum_{n,e,\dots} F_{f,C} \quad (3.7)$$

Da equação de discretização de superfície e utilizando a componente de velocidade u_f normal a superfície A_f :

$$F_{f,C} \approx \phi_f u_f \Delta A_f \quad (3.8)$$

Na equação acima, u_f e ϕ_f são os valores tomados no centro da face da célula. Para obter ϕ_f , ϕ deve ser interpolado para o centro da superfície de A_f . O tipo de interpo-

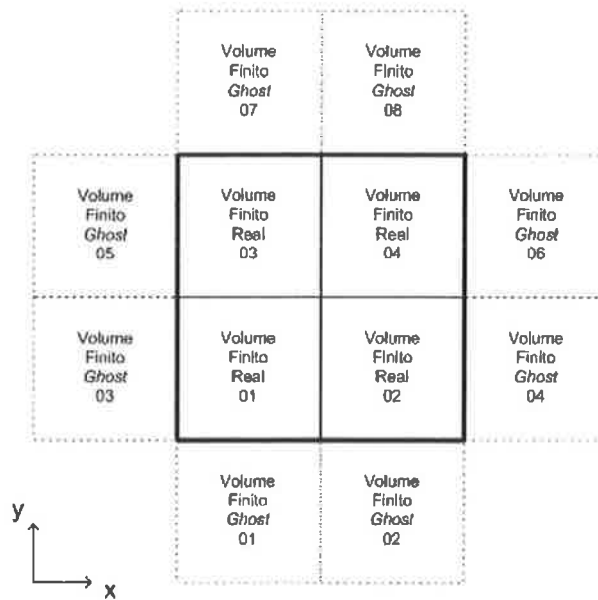


Figura 3.4: Volume Finito *Ghost*

lação utilizada influenciará fortemente a precisão e a estabilidade do método. Abaixo, seguem-se diferentes esquemas para interpolação de ϕ .

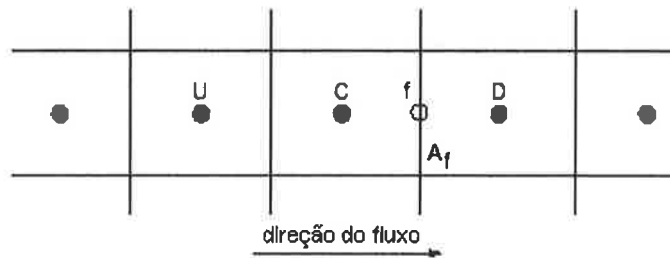


Figura 3.5: Nomenclatura das células vizinhas para interpolação

Central Differencing Scheme

No esquema de diferenças centrais (CDS), uma interpolação linear é feita entre os pontos C e D (ver Fig. 3.5) para obter ϕ_f . Numa malha equidistante, é dado por:

$$\phi_f = \frac{\phi_C + \phi_D}{2} \tag{3.9}$$

Esta discretização é de 2ª ordem, simples e de fácil implementação. Entretanto, apesar da ordem de precisão ser alta, os erros de truncamento introduzem oscilações nos

resultados. Se a difusão é pequena, estas oscilações não são absorvidas, e logo, podem causar instabilidades.

Upwind Differencing Scheme

Com o esquema de diferenças *Upwind* (UDS) a interpolação é de 1^a ordem. O valor de ϕ_f é apenas passado para o ponto a jusante C :

$$\phi_f = \phi_C \quad (3.10)$$

Apesar deste esquema possuir um elevado erro de truncamento, se comparado ao esquema CDS, ele elimina as oscilações numéricas.

Pode ser mostrado que o método *Upwind* é o único esquema que não amplifica as oscilações [24]. Geralmente ele é superior a outros de maior ordem. O problema neste caso, é que o método resulta em alta difusão numérica, isto é, suavização artificial do campo escalar. Se a difusão é o mecanismo governante do sistema, como em chamadas difusivas, o método não é satisfatório, então esquemas não-lineares mais sofisticados são necessários. Da dinâmica dos gases, é de comum conhecimento que se deve tomar cuidado especial para prever convecção de *momentum* e escalar próximo a uma onda de choque, representando uma descontinuidade nos campos de *momentum* e densidade. Em combustão, uma descontinuidade semelhante ocorre no campo de densidade (e então em $\overline{\rho f}$ próximo da chama). Então, a convecção do termo deve ser tratada por métodos provados na dinâmica dos gases, onde esquemas lineares se mostraram ineficazes.

Total Variation Diminishing

O TVD baseia-se no princípio físico, de forma simplificada, de que o valor de uma propriedade, num determinado ponto, delimitado entre um mínimo e um máximo não pode exceder os valores extremos de seus vizinhos. Isto pode ser descrito pela equação unidimensional:

$$\frac{\partial}{\partial t} \text{TV} = \frac{\partial}{\partial t} \int_{V_1} \left| \frac{\partial \phi}{\partial \xi} \right| d\xi \leq 0 \quad (3.11)$$

Segundo a eq. (3.11) acima, a variação total TV de ϕ na direção ξ não deve aumentar com o tempo, no domínio unidimensional V_1 . A abordagem TVD combina os esquemas *Upwind* e diferenças centrais em proporções de modo a se evitar oscilações e manter a difusão numérica baixa. A interpolação de ϕ_f no centro da face da célula é feita com os valores *upwind* ϕ_U e ϕ_C e o valor *downwind* ϕ_D .

$$\phi_f = \phi_C + \frac{B(r)(\phi_C - \phi_U)}{2} \quad (3.12)$$

A função limitadora de fluxo $B(r)$ depende da taxa de gradientes r :

$$r = \frac{\phi_D - \phi_C}{\phi_C - \phi_U} \quad (3.13)$$

As propriedades do esquema de convecção são então determinadas pela função limitadora $B(r)$. Um exemplo de limitador não-linear, o *CHARM* é dado por:

$$B(r) = \begin{cases} \frac{r(3r+1)}{(r+1)^2} & : r > 0 \\ 0 & : r \leq 0 \end{cases} \quad (3.14)$$

A função *CHARM* limitadora tem a vantagem de suavizar, que ajuda a estabilizar o código. Porém, existem outras funções delimitadoras de fluxo que a Tabela 3.1 menciona alguns. Uma breve visão deste limitador pode ser visto na documentação do programa *Phoenics* [38].

Um limitador de interesse particular é o *SUPER-BEE* de Roe [24]. Este pode parecer ser a escolha ideal para combustão sem pré-mistura uma vez que fora determinado por uma análise de estabilidade que resulta no maior $B(r)$ possível, o qual não resulta em oscilações. Então, os resultados se mantêm nos limites físicos e a difusão numérica é minimizada. Entretanto, este limitador é supercompressivo, que significa que gradientes são acentuados. Logo, isto faz do *SUPER-BEE* inaplicável para combustão sem pré-mistura.

Efeito de diferentes esquemas convectivos

Alguns esquemas que descrevem a convecção de escalares em 1D foram apresentados nas subseções anteriores. Esses esquemas foram testados na versão 1D do código CFD

Tabela 3.1: Funções Delimitadoras de Fluxo

Limitador	Definição	Comentários
UDS	$B = 0$	difusivo, limitado
CDS	$B = r$	fortes oscilações
QUICK	$B = (1.5r + 0.5)/2$	não-limitado
VAN LEER	$B = \max(0, \min(2r, 0.5 + 0.5r, 2))$	limitado
MINMOD	$B = \max(0, \min(r, 1))$	limitado
SUPER-BEE	$B = \max(0, \min(2r, 1), \min(r, 2))$	supercompressivo
SMART	$B = \max(0, \min(2r, 0.75r + 0.25, 4))$	limitado
CHARM	$B = r(3r + 1)/(r + 1)^2 \wedge r > 0$	limitado, suave

para um problema de convecção/difusão¹.

Caso 1: neste exemplo, simplifica-se a equação de transporte eq. (2.2) para um problema unidimensional, regime permanente e sem geração interna de calor. Assume-se a velocidade conhecida $u = 0,1 \text{ m/s}$ e verifica-se o transporte de um escalar genérico ϕ de uma extremidade à outra do domínio físico. O escalar assume as condições de contorno $\phi = 1,0$ em $x = 0$ e $\phi = 0$ em $x = L$.

Dados: $u = 0,1 \text{ m/s}$, $L = 1,0$, $\rho = 1$, $\Gamma = 0,1$, $c = 1,0$.

A Tabela 3.2 mostra os erros médios para malhas de 5, 50 e 100 pontos utilizando-se os esquemas convectivos *Upwind*, CDS e Híbrido². Verifica-se, mais uma vez que os erros diminuem com o refinamento da malha.

A Fig. 3.6 mostra a distribuição de ϕ ao longo do domínio físico, calculada com o esquema CDS, em comparação com a solução analítica. Verifica-se a excelente concordância. Os resultados obtidos com os esquemas *Upwind* e Híbrido são semelhantes.

Caso 2: neste exemplo altera-se a velocidade para $u = 2,5 \text{ m/s}$. Para o caso da malha de 5 pontos, o número de Peclet é igual a 5, o que provoca o aparecimento de oscilações no esquema de discretização CDS.

Dados: $u = 2,5 \text{ m/s}$, $L = 1,0$, $\rho = 1,0$, $\Gamma = 0,1$, $c = 1,0$.

¹esta validação faz parte dos resultados obtidos no capítulo 4

²esquema que combina *Upwind* e CDS, levando em consideração o número de Peclet. Ver APÊNDICE I

Tabela 3.2: Comparação entre esquemas convectivos (Caso 1)

Nr. Pontos	Esquema Convectivo	Erro médio	Passo	Tolerância
5	<i>Upwind</i>	0,001921	0,01	10^{-10}
50	<i>Upwind</i>	0,000017	0,01	10^{-10}
100	<i>Upwind</i>	0,000004	0,01	10^{-10}
5	CDS	0,009758	0,01	10^{-10}
50	CDS	0,000100	0,01	10^{-10}
100	CDS	0,000025	0,01	10^{-10}
5	Híbrido	0,048837	0,01	10^{-10}
50	Híbrido	0,004462	0,01	10^{-10}
100	Híbrido	0,002218	0,01	10^{-10}

Este resultado pode ser visto na Fig. 3.7.

O esquema *Upwind*, por tornar o problema mais difusivo, consegue uma solução livre de oscilações, mas com perfil bem mais suave, que é exigido pela solução analítica.

A Tabela 3.3 mostra os erros para os esquemas *Upwind*, CDS, Híbrido e TVD, discutidos anteriormente. O esquema Híbrido alterna entre os esquemas *Upwind* (malha de 5 e 10 pontos) e CDS para a malha de 50 pontos. O esquema TVD apresenta os menores erros.

Tabela 3.3: Comparação entre esquemas convectivos (Caso 2)

Nr. Pontos	Erro			
	<i>Upwind</i>	CDS	Híbrido	TVD
5	0,044348	0,336949	0,044348	0,041158
10	0,022136	0,075194	0,022136	0,018477
50	0,001917	0,002604	0,002604	0,000692

3.1.7 Transporte Conservativo

A equação de transporte para conservação de um escalar ϕ (como ρu_i ou ρf) pode ser escrita na forma integral eq. (3.15). Se esta equação for discretizada por volumes finitos, os termos de fluxo convectivo e difusivo apenas transportam a quantidade ϕdV de

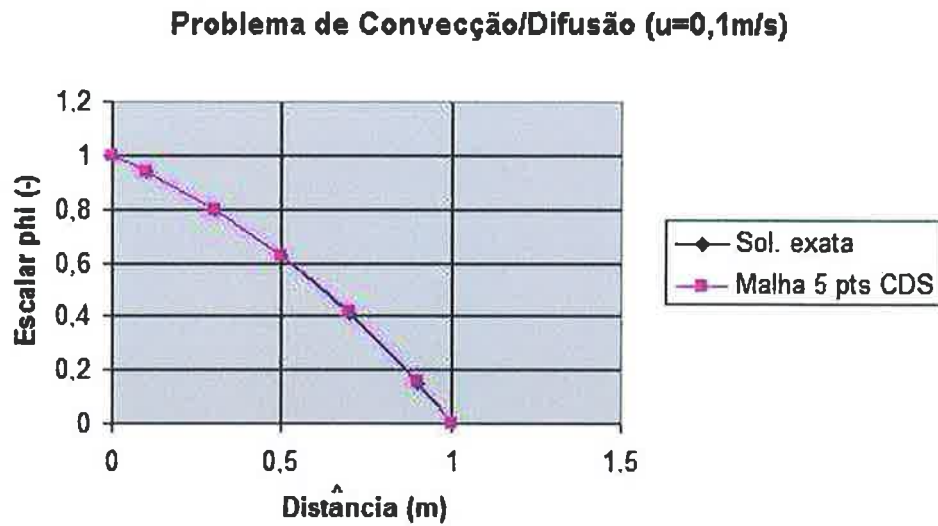


Figura 3.6: Comparação entre esquemas convectivos (Caso 1)

uma célula para outra. Isto pode ser explorado para construir esquemas que conservem totalmente ϕ .

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\int_{\Delta V} \phi dV \right) + \int_{\Delta A} (\phi u_j) n_j dA = \int_{\Delta A} D_j(\phi) n_j dA \quad (3.15)$$

Para um escalar conservativo ϕ , a equação de conservação discretizada eq. (3.2) para a célula C é dada por:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\phi_C^{\Delta V} \delta V_C) + \sum_{n,e,\dots} F_{f,C_C} = \sum_{n,e,\dots} F_{f,D_C} \quad (3.16)$$

e para o vizinho a leste E :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\phi_E^{\Delta V} \delta V_E) + \sum_{n,e,\dots} F_{f,C_E} = \sum_{n,e,\dots} F_{f,D_E} \quad (3.17)$$

Então, o fluxo através da face leste da célula central C é idêntico ao fluxo negativo através da face oeste da célula leste E :

$$F_{e,C_C} = -F_{w,C_E} \quad \wedge \quad F_{e,D_C} = -F_{w,D_E} \quad (3.18)$$

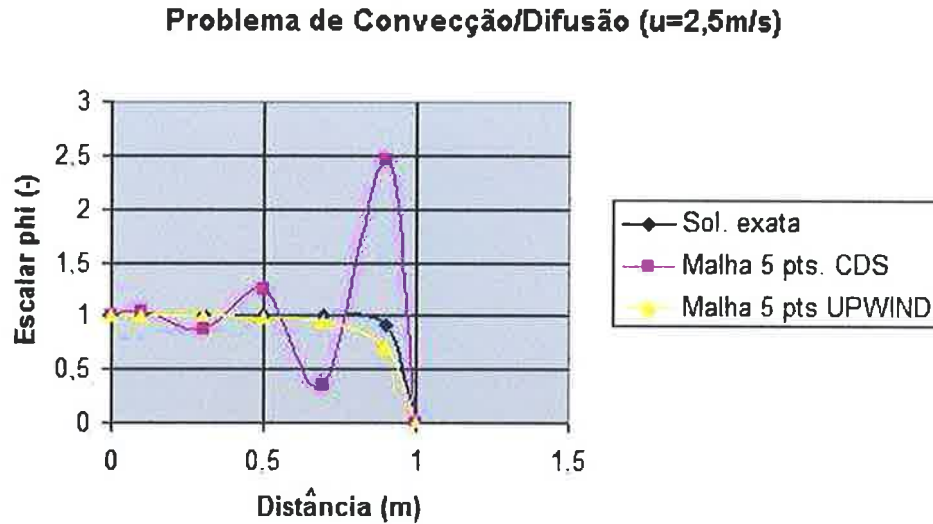


Figura 3.7: Comparação entre esquemas convectivos (Caso 2)

É suficiente então calcular apenas o fluxo de uma face apenas. O valor ϕdV transportado em um passo de tempo, $\Delta t(F_{e,C_C} + F_{e,D_C})$, é então adicionado a célula E e subtraído da célula C . Logo, ϕdV é somente transportado de célula para célula e então, ϕ é conservado.

3.2 Discretização da Derivada Temporal

Nesta seção, discute-se como as equações diferenciais parciais (PDE) são integradas no tempo. Primeiro, introduz-se os conceitos básicos para integração no tempo e então aplica-se para o sistema de equações governantes. Apesar de existir um único sistema de equações, há diferentes abordagens para a sua solução.

3.2.1 Integração no Tempo

As equações de transporte dependentes do tempo para a quantidade ϕ (densidade, *momentum*, fração de mistura) devem ser integradas no tempo:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x_j} (\phi u_j) + \frac{\partial D_j(\phi)}{\partial x_j} + S_\phi \quad (3.19)$$

Substituindo-se o lado direito da equação por $LDE(\phi)$, obtém-se uma forma mais conveniente para a equação:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \text{LDE}(\phi) \quad (3.20)$$

O tempo é discretizado repartindo-o em um número distintos de subintervalos de comprimento Δt^n , chamados de passos. A solução para um novo intervalo de tempo pode ser calculado em função somente do último passo ϕ^n :

$$\phi^{n+1} \approx \phi^n + \Delta t^n \text{LDE}(\phi)^n \quad (3.21)$$

Se $\text{LDE}(\phi)$ é conhecido no passo n , ϕ^{n+1} pode ser calculado explicitamente. Este método é conhecido como *Método Explícito de Euler*, e é de 1ª ordem de precisão. Ademais, é instável com as equações de Navier-Stokes.

Um método de 1ª ordem estável pode ser obtido discretizando-se o termo $\text{LDE}(\phi)$ da eq. (3.21) num novo passo t^{n+1} , usando-se $\text{LDE}(\phi)^{n+1}$ ao invés de $\text{LDE}(\phi)^n$. Este *Método Implícito de Euler* é estável mesmo para grandes passos no tempo. Entretanto, uma solução não pode ser computada progressivamente, mas um sistema de equações algébricas deve ser resolvido. Logo, este método requer um algoritmo mais complicado e mais recursos computacionais para obtenção da solução. Uma vez que este método implícito requer um custo computacional alto para inversão de matriz, pouco ganha-se na tentativa de aumentar a ordem de sua precisão. O Método de Crank-Nicholson de 2ª ordem é obtido aplicando-se diferença central no tempo:

$$\begin{aligned} \phi^{n+1} &\approx \phi^n + \Delta t^n \text{LDE}(\phi)^{n+\frac{1}{2}} \\ &\approx \phi^n + \frac{1}{2} \Delta t^n (\text{LDE}(\phi)^n + \text{LDE}(\phi)^{n+1}) \end{aligned} \quad (3.22)$$

Como mencionado, o método explícito de Euler não é estável com as equações de Navier-Stokes. Porém, métodos explícitos podem ser estabilizados usando-se informação adicional dos subpassos.

Como exemplo, o Método Runge-Kutta de 3ª ordem usado por Williamson [60] para avaliar as propriedades no tempo.

Baseado na solução ϕ^n para o passo n , a nova solução ϕ^{n+1} é computada com ajuda dos subpassos ϕ_a^n e ϕ_b^n :

$$\begin{aligned}
\phi_a^n &= \phi^n + \Delta t_a^n [\alpha_a \text{LDE}(\phi^n)] \\
\phi_b^n &= \phi_a^n + \Delta t_b^n [\alpha_b \text{LDE}(\phi_a^n) + \beta_b \text{LDE}(\phi^n)] \\
\phi^{n+1} &= \phi_b^n + \Delta t_c^n \left[\alpha_c \text{LDE}(\phi_b^n) + \beta_c \left(\text{LDE}(\phi_a^n) + \frac{\beta_b}{\alpha_b} \text{LDE}(\phi^n) \right) \right]
\end{aligned} \tag{3.23}$$

Os coeficientes α e β são dados por:

$$\alpha_a = \frac{1}{3} \quad \alpha_b = \frac{15}{16} \quad \alpha_c = \frac{8}{15} \quad \beta_b = -\frac{75}{144} \quad \beta_c = -\frac{51}{81}$$

Os comprimentos dos subpassos são dados por:

$$\Delta t_a^n = \frac{1}{3} \Delta t^n \quad \Delta t_b^n = \frac{5}{12} \Delta t^n \quad \Delta t_c^n = \frac{1}{4} \Delta t^n$$

Neste trabalho, será utilizado o método explícito de Euler, não obstante que os outros métodos descritos de ordem superior poderão ser utilizados para uma implementação futura no código do CFD. As equações discretizadas encontram-se no APÊNDICE I.

3.2.2 Limites para o Tamanho do Passo no Tempo

Assim como a discretização no espaço, a discretização no tempo afeta a precisão dos resultados. Pequenos passos possibilitam uma solução mais precisa, assim como pequenas células melhoram a precisão. Nos métodos explícitos, o tamanho do passo no tempo deve ser ainda mais limitado para obter um método estável. De acordo com Courant, Friedrich e Levy [24], o transporte convectivo em um passo de tempo deve ser limitado para satisfazer a seguinte condição:

$$CFL = \frac{\Delta t |u|}{\Delta x} < 1.0 \quad \Rightarrow \quad \Delta t < \frac{\Delta x}{|u|} \tag{3.24}$$

Resumindo, este critério estabelece que, em um passo de tempo, a informação pode viajar apenas para a célula vizinha e não mais longe que esta. Neste trabalho, CFL será mantido entre 0,5 e 1,0. Para escalares é utilizado $CFL = 0,7$, enquanto que as velocidades são calculadas com o CFL calculado dinamicamente. Para o regime

de escoamento laminar, o CFL controla bem a estabilidade das equações no tempo, porém no caso turbulento, onde o fluxo convectivo é mais crítico para a estabilidade do código do que o fluxo difusivo, pode haver instabilidade nos volumes de controle do eixo de uma malha cilíndrica, causado pela restrição do fluxo difusivo na direção circunferencial. Um modo de se evitar este tipo de problema, é o cálculo dos fluxos difusivos implicitamente para as velocidades e por subpassos para os escalares.

3.2.3 Acoplamento Pressão-Velocidade

Para a solução numérica das equações de Navier-Stokes, foram utilizados os esquemas de discretização já discutidos nas seções anteriores. Um problema típico destas equações surge com a questão do acoplamento pressão/velocidade, que é discutido em vários trabalhos [11, 33, 57].

O método de acoplamento utilizado no trabalho é o PRIME (*Pressure Implicit Momentum Explicit*), após diversas tentativas não-sucedidas com outros métodos.³ No método PRIME, utiliza-se a equação da continuidade, inclusive nos contornos, para calcular a pressão que deve ser adicionada (na verdade os seus gradientes) às equações de quantidade de movimento. Uma vantagem deste método é utilizar malhas colocadas, o que simplifica sobremaneira a implementação numérica.

Como o trabalho versa sobre CFD com gases, os quais são compressíveis, muitos acreditam que possa ser utilizada a formulação compressível para o acoplamento, entretanto a pressão no campo do escoamento é tão pequena que não é possível utilizar a equação de estado para o fechamento do problema.

No método PRIME, as velocidades nas face do volume de controle P são dadas por:

$$u_{r,e} = u_{r,e}^* + d(P_W - P_P) \quad (3.25)$$

$$u_{r,w} = u_{r,w}^* + d(P_P - P_E) \quad (3.26)$$

$$u_{z,n} = u_{z,n}^* + d(P_S - P_P) \quad (3.27)$$

$$u_{z,s} = u_{z,s}^* + d(P_P - P_N) \quad (3.28)$$

onde d é o coeficiente relacionando a área e o coeficiente oriundo da discretização

³implementação de malhas deslocadas e malhas colocadas utilizando-se a função de interpolação de Rhie/Chow[43]

da equação da quantidade de movimento. As velocidades u^* são as velocidades obtidas das equações de conservação da quantidade de movimento sem a contribuição do gradiente de pressão. Substituindo-se estas expressões na equação da continuidade, obtém-se a equação que dá a pressão em cada volume de controle de forma que ambas as equações de conservação (continuidade e quantidade de movimento) sejam satisfeitas. Na forma explícita, a equação de correção da pressão pode ser escrita como:

$$A_P P_{i,j} = A_E P_{i,j+1} + A_W P_{i,j-1} + A_N P_{i+1,j} + A_S P_{i-1,j} + \underbrace{(-\rho u_{r,e}^* A_e + \rho u_{r,w}^* A_w - \rho u_{x,n}^* A_n + \rho u_{x,s}^* A_s)}_{div(\rho u^*)}, \quad (3.29)$$

onde o termo $div(\rho u^*)$ representa o saldo líquido do fluxo de massa nas faces do volume de controle, calculado com as velocidades antes da correção da pressão e A_f a área na face f do volume de controle. Resolve-se a equação da pressão e então corrige-se as velocidades nas faces. As velocidades nos volumes de controle são calculadas fazendo-se a média aritmética entre duas faces do volume de controle.

3.3 Condições de Contorno

Para resolução das equações governantes, as condições de contorno devem ser estabelecidas. Neste trabalho, tanto as condições de Dirichlet como Neumann são aplicadas. Com a condição de Dirichlet eq. (3.30) para o campo escalar ϕ , o valor no contorno $\partial\Delta V$ do domínio computacional ΔV é dado por ϕ_∂ :

$$\phi = \phi_\partial \quad (3.30)$$

Com a condição de Neumann eq. (3.31), gradientes $(\partial\phi/\partial x_j)$ na direção normal a superfície n_j são dados por c_∂ :

$$\frac{\partial\phi}{\partial x_j} n_j = c_\partial \quad (3.31)$$

O trabalho versa sobre uma chama não confinada - ver Fig. 3.8 para domínio computacional cilíndrico e fronteiras.

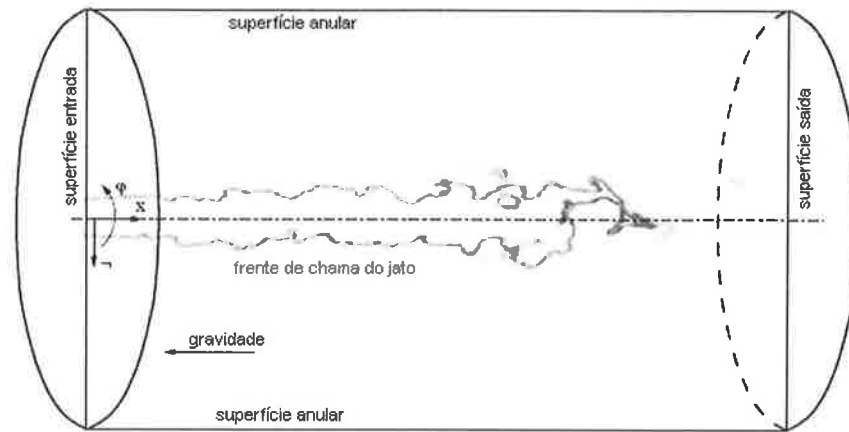


Figura 3.8: Domínio computacional cilíndrico

As condições de contorno para vazões constantes de combustível e oxidante, as quais são utilizadas neste trabalho, estão resumidas na Tabela 3.4⁴.

Tabela 3.4: Condições de Contorno para a Chama Difusiva

Grandeza		Entrada	Superfície Anular	Saída
Fração de mistura	\tilde{f}	$\tilde{f} = \tilde{f}(r)$	$\tilde{f} = 0$	$\partial \tilde{f} / \partial n_x = 0$
Entalpia	\tilde{h}	$\tilde{h} = \tilde{h}(r)$	$\tilde{h} = \tilde{h}(\infty)$	$\partial \tilde{h} / \partial n_x = 0$
Velocidade axial	\tilde{u}	$\tilde{u} = \tilde{u}(x_i, t)$	$\partial \tilde{u} / \partial n_x = 0 \vee \tilde{u} = 0$	$\partial \tilde{u} / \partial n_x = 0$
Velocidade radial	\tilde{v}	$\tilde{v} = \tilde{v}(x_i, t)$	$\partial \tilde{v} / \partial n_x = 0 \vee \tilde{v} = 0$	$\partial \tilde{v} / \partial n_x = 0$
Velocidade circunferencial	\tilde{w}	$\tilde{w} = \tilde{w}(x_i, t)$	$\partial \tilde{w} / \partial n_x = 0 \vee \tilde{w} = 0$	$\partial \tilde{w} / \partial n_x = 0$

3.4 Implementação Computacional

Nesta seção será discutida a abordagem utilizada para o desenvolvimento do código CFD, compreendendo a escolha da linguagem de programação, discussão sobre a orientação a objetos aplicada ao CFD desenvolvido e a utilização de método de paralelização para o particionamento do domínio computacional em subdomínios calculados em diversos processadores.

⁴condições de contorno para a entalpia são apresentadas, porém não foram implementadas no código CFD; para as velocidades axial, radial e circunferencial na superfície anular, a condição de contorno de gradiente ou valor nulo é utilizada dependendo do tipo de malha e problema.

3.4.1 C++ e Programação Orientada a Objetos

Um CFD pode certamente ser implementado em diversas linguagens de programação, como, por exemplo, FORTRAN ou Java. Entretanto, a escolha da linguagem de programação C++ se faz por algumas razões [21]:

1. fornece uma infraestrutura naturalmente orientada a objetos, capaz de acomodar o problema numa coleção de estruturas de dados e operações
2. o uso de C++ transcende muitas disciplinas além da engenharia, onde tradicionalmente FORTRAN tem sido a linguagem prevalecente
3. C++ é naturalmente compatível com os seguintes conceitos de algoritmos:
 - partição
 - chamada recursiva de função
 - alocação dinâmica de memória ⁵
 - encapsulamento

Uma grande vantagem da linguagem C++ é sua natural orientação a objetos. A orientação a objetos é um conceito mais recente de programação, onde o grande intuito é basicamente criar *código reutilizável*, isto é, criar código onde toda a lógica de programação está *encapsulada* numa única classe.

Uma classe pode ser entendida como um protótipo ou uma planta da implementação de um objeto. Por exemplo, uma classe poderia ser o desenho de um eixo mecânico, enquanto que o objeto seria o eixo, ou um conjunto de eixos, produzido a partir do projeto. Todos os eixos terão suas propriedades conforme as especificadas no projeto (dimensões, material, etc.). A um conjunto de classes pode se definir uma biblioteca (conjunto de classes afins, que no exemplo pode ser uma classe eixo, outra classe mancal, uma classe chaveta, etc.).

Além do encapsulamento, numa linguagem orientada a objetos é possível trabalhar com herança e polimorfismo. Estas duas características serão discutidas abaixo, utilizando-se algumas classes desenvolvidas para o CFD.

A Fig. 3.9 representa um diagrama UML⁶ [56] para algumas das classes de volumes

⁵a alocação dinâmica de memória é vital para o polimorfismo *run-time*.

⁶*Unified Modeling Language* é a especificação mais utilizada mundialmente para modelar estrutura, comportamento e arquitetura de aplicações, processos e estruturas de dados.

e domínios do CFD desenvolvido, mostrando apenas os principais atributos e funções de cada classe. Pode-se observar que as classes *FiniteVolume* e *Domain* estão no topo do diagrama, pois são a base de todas as classes por elas herdadas: *Volume1D*, *Volume2DAx* e *Volume3DCil* são filhas de *FiniteVolume*, enquanto que *Domain1D*, *Domain2DAx* e *Domain3DCil* são filhas de *Domain*. Isto quer dizer que a classe *Volume1D* herda as propriedades da classe *FiniteVolume*, ou seja, *Volume1D* terá todos os atributos de seu pai, como densidade, calor específico, pressão, etc. A herança⁷ funciona como classificador do caso mais genérico até o caso mais específico. Toda a vez que for criada uma classe para um volume finito de formato específico (bidimensional cartesiano, tridimensional cilíndrico, etc.), não é necessário reescrever todos os atributos, pois sabe-se que todos terão em comum as propriedades da classe *FiniteVolume*. Além disso, tanto *FiniteVolume* como *Domain* são classes abstratas⁸, ou seja, não podem ser instanciados objetos a partir delas. Elas funcionam apenas como base para criação de outras classes.

A característica de herança pode ser vista também nas classes *Domain1D*, *Domain2DAx* e *Domain3DCil*. Aqui, a classe *FiniteVolume*, também abstrata, possui funções que são herdadas pelas classes filhas: *makegrid()*, *destroygrid()*, *show()*, *setbc()* e *solve()*. Pela classe ser abstrata, as funções são chamadas de virtuais, isto é, não tem significado na classe base. Observe que as funções herdadas estão presentes em todas as classes e são implementadas pelo mesmo nome de chamada. A diferença, no entanto, é que cada classe irá implementar a função de sua própria maneira. Como exemplo, a função *makegrid()* está implementada nas classes *Domain2DAx* e *Domain3DCil*, porém cada uma possui uma lógica interna para gerar sua própria malha. Esta característica é conhecida como polimorfismo, e o conceito pode ser definido pela frase “uma interface, múltiplos métodos” [45].

A Tabela 3.5 mostra as principais classes desenvolvidas para o CFD.

3.4.2 Paralelização com MPI - *Message Passing Interface*

O método utilizado para a paralelização do processamento do domínio computacional foi baseado no sistema de troca de mensagens, *Message Passing Interface* (MPI), uti-

⁷Na UML, a herança é indicada por uma seta vertical sempre apontando da classe filha para a classe pai.

⁸classes abstratas são denotadas em itálico

Tabela 3.5: Tabela das principais classes do CFD

Nome da Classe	Tipo	Dimensões	Coordenadas
<i>FiniteVolume</i>	Abstrata	—	—
<i>Volume1D</i>	Concreta	1D	cartesiana
<i>Volume2DAx</i>	Concreta	2D	cilíndrica axi-simétrica
<i>Volume2DCart</i>	Concreta	2D	cartesiana
<i>Volume3DCil</i>	Concreta	3D	cilíndrica
<i>Volume3DCart</i>	Concreta	3D	cartesiana
<i>Domain</i>	Abstrata	—	—
<i>Domain1D</i>	Concreta	1D	cartesiana
<i>Domain2DAx</i>	Concreta	2D	cilíndrica axi-simétrica
<i>Domain2DCart</i>	Concreta	2D	cartesiana
<i>Domain3DCil</i>	Concreta	3D	cilíndrica
<i>Domain3DCart</i>	Concreta	3D	cartesiana

lizado nos principais programas comerciais e acadêmicos atuais, como o *Fluent*[®] da Fluent Inc. e o *CFX*[®] da Ansys Inc. Neste trabalho, utilizou-se o conjunto de bibliotecas MPICH, desenvolvido pela *Mathematics and Computer Science Division* do *Argonne National Laboratory*, que é parte do departamento de energia dos Estados Unidos e administrado pela universidade de Chicago.

O protocolo MPI permite que computadores interligados por uma rede convencional possam se comunicar e trocar informações em tempo real de forma a permitir que os resultados obtidos por uma máquina possam ser passados para outras. Esses dados são, então, utilizados como condições de contorno para os cálculos de cada domínio. Tal conceito é conhecido como processamento paralelo distribuído, o qual, quando separado fisicamente em diferentes máquinas, é usualmente chamado de *Distributed Memory Systems* (DMS), uma vez que cada processo ocorre em sistemas isolados fisicamente, exceto pela interconexão dos cabos de rede.

O código desenvolvido neste trabalho se baseia na discretização de um domínio físico

em um computacional. No processamento paralelo, esse domínio é dividido no número de processadores a serem utilizados, de forma a criar fronteiras internas, as quais representam localmente o início e o final de cada domínio. Dessa forma, para este trabalho, a malha computacional utilizada foi dividida igualmente entre os processadores utilizados, de forma a balancear o processamento local, pois o código foi projetado para ser executado em máquinas encontradas facilmente no mercado, de mesma capacidade de processamento⁹. Tal conceito é conhecido como *clustering*. A malha foi dividida na direção do escoamento principal do sistema, axial, permitindo que pequenos desvios numéricos nas seções transversais não fossem tratados como erros numéricos devido ao transporte de informações entre diferentes máquinas.

O transporte de dados é realizado pelas rotinas da biblioteca MPI. Como o domínio foi subdividido somente na direção axial, as informações transportadas foram apenas as velocidades nas fronteiras do domínio local e aplicadas como condições de contorno flutuante a cada iteração. Para garantir a estabilidade do sistema de equações e a convergência, foi realizada uma média ponderada entre os resultados da fronteira de forma que os dados da fronteira anterior representassem 75% e os da posterior 25%. Como restrição de convergência, os resíduos numéricos das velocidades e escalares de cada iteração dos domínios foram transportados para o núcleo principal do programa, possibilitando a verificação da convergência em todos os processos e assegurando que a simulação continuasse até que todos os domínios apresentassem resíduos abaixo do desejado.

Um caso específico analisado para a verificação do processo de paralelização empregado foi realizado baseado no escoamento laminar interno em um tubo cilíndrico de seção constante e no escoamento turbulento de um jato não-confinado. A Fig. 3.10 apresenta o ganho de desempenho devido ao aumento do número de processadores para o cálculo do problema. Verifica-se que tanto o caso laminar quanto o turbulento devem necessariamente ser executados em paralelo, pois quando executado em quatro processadores, obteve-se um ganho de até 83% para o laminar e 72% para o turbulento, sobre o monoprocessado no tempo de execução.

⁹a grande vantagem do MPI é poder transformar computadores pessoais, *commodities* do mercado, em uma ferramenta poderosa comparada aos computadores multi-processados, os quais custam algumas vezes o preço de um PC ordinário

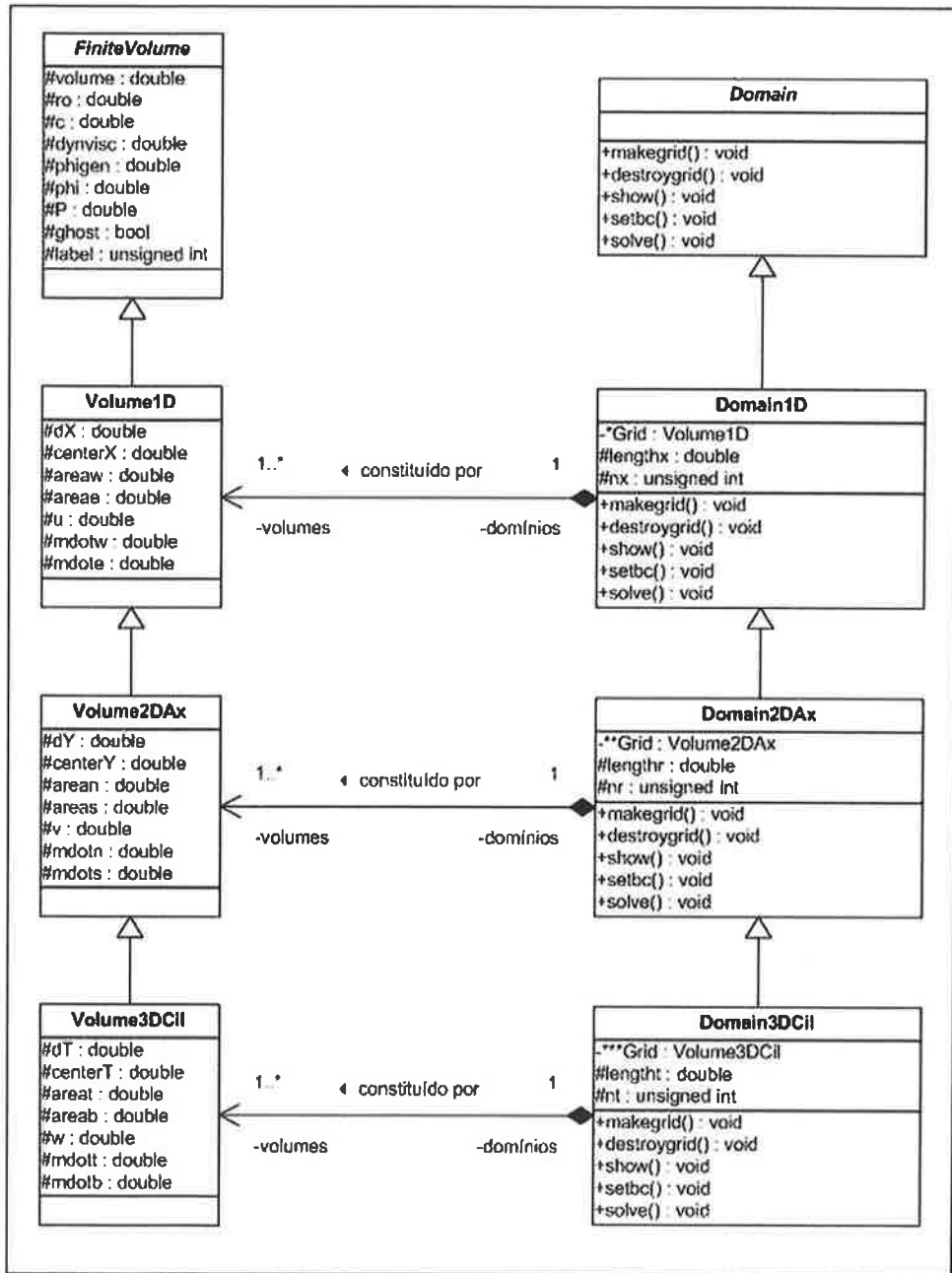


Figura 3.9: Diagrama de Classes para Volumes e Domínios

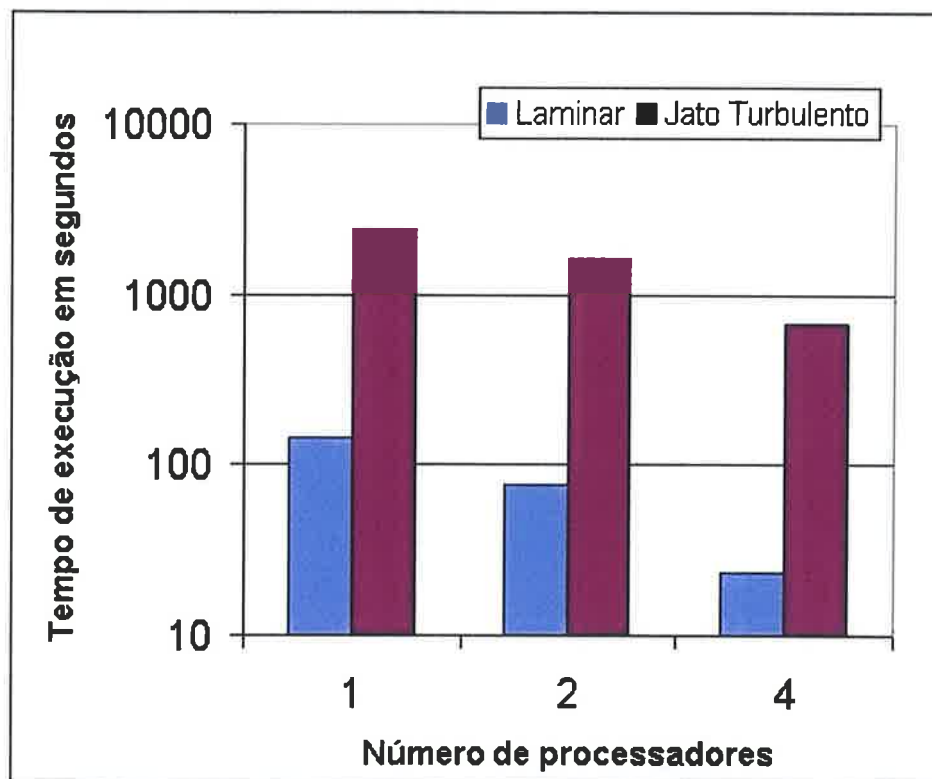


Figura 3.10: Comparação dos tempos de simulação devido ao uso de processamento paralelo

Capítulo 4

RESULTADOS E CONCLUSÃO

Este capítulo expõe os resultados obtidos com a construção do CFD, desde as primeiras validações de problemas difusivos para domínios unidimensionais até a obtenção da chama turbulenta difusiva.

A validação do código computacional segue o roteiro:

1. Validação Básica

- condução unidimensional em uma barra
- condução unidimensional em uma placa com geração interna de calor
- condução unidimensional em uma barra em regime transitório
- condução unidimensional em um cilindro com geração interna de calor
- problema de convecção/difusão

2. Validação da Equação de Navier-Stokes para Escoamento Laminar

- escoamento laminar em tubo
- jato laminar não-confinado

3. Validação Turbulenta com Modelo Termo-Químico

- Validação do Escoamento Turbulento com LES
- Validação da Chama de Difusão com LES

4. Conclusão das Validações

4.1 Validação Básica

Nesta seção são relatados os casos básicos, unidimensionais, para validação do CFD para os problemas de condução e convecção/difusão. Estes problemas foram extraídos do livro texto do Versteeg e Malalasekera [57].

4.1.1 Condução unidimensional em uma barra

Uma barra unidimensional, com condutividade térmica $k = 1.000W/mK$, comprimento $L = 0,5m$, tem suas extremidades mantidas em $100^{\circ}C$, em $x = 0$ e $500^{\circ}C$ para $x = L$. A solução analítica da distribuição de temperatura dentro da barra é linear e dada por:

$$T(x) = (T_{sup,2} - T_{sup,1}) \frac{x}{L} + T_{sup,1} \quad (4.1)$$

onde $T_{sup,1}$ e $T_{sup,2}$ são as temperaturas nas superfícies $x = 0$ e $x = L$, respectivamente.

A Fig. 4.1 mostra a distribuição de temperatura ao longo da barra. Nota-se que ambas as malhas, com 5 e 10 pontos, reproduzem perfeitamente a solução analítica.

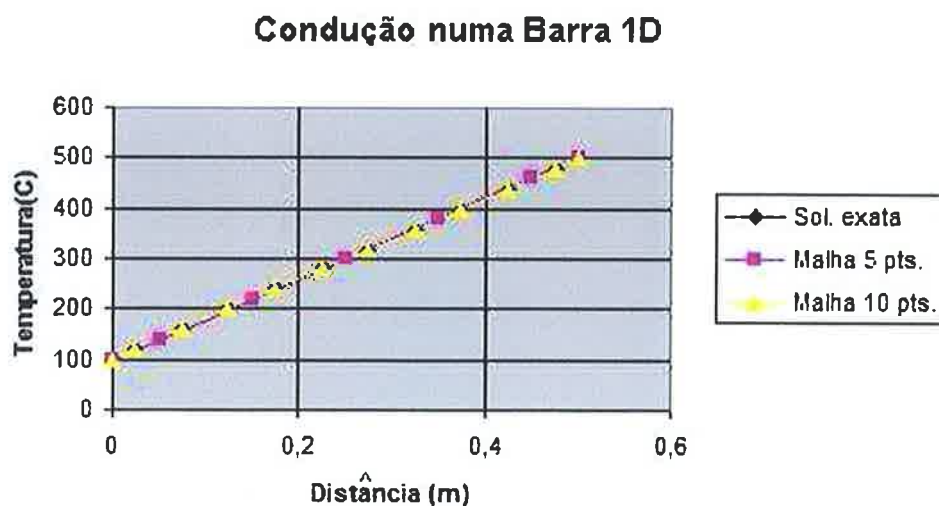


Figura 4.1: Condução numa Barra Unidimensional

O objetivo deste teste é verificar a consistência do esquema de discretização do termo

difusivo. Pelos resultados mostrados, vê-se que o método numérico está fisicamente consistente.

4.1.2 Condução unidimensional em uma placa com geração interna de calor

Uma placa de espessura $L = 0,02m$, condutividade térmica $k = 0,5W/mK$, com geração interna $q = 1.000.000W/m^3$ tem as temperaturas nas faces $x = 0$ e $x = L$ mantidas em $100^\circ C$ e $200^\circ C$, respectivamente. A Fig. 4.2 mostra a distribuição de temperaturas ao longo da barra. Nota-se que em ambas as malhas, com 5 e 10 pontos, reproduz-se perfeitamente a solução analítica, que é dada pela expressão:

$$T(x) = \frac{\dot{q}L^2}{2k} \left(1 - \frac{x^2}{L^2}\right) + \left(\frac{T_{sup,2} - T_{sup,1}}{2}\right) \frac{x}{L} + \frac{T_{sup,1} + T_{sup,2}}{2} \quad (4.2)$$

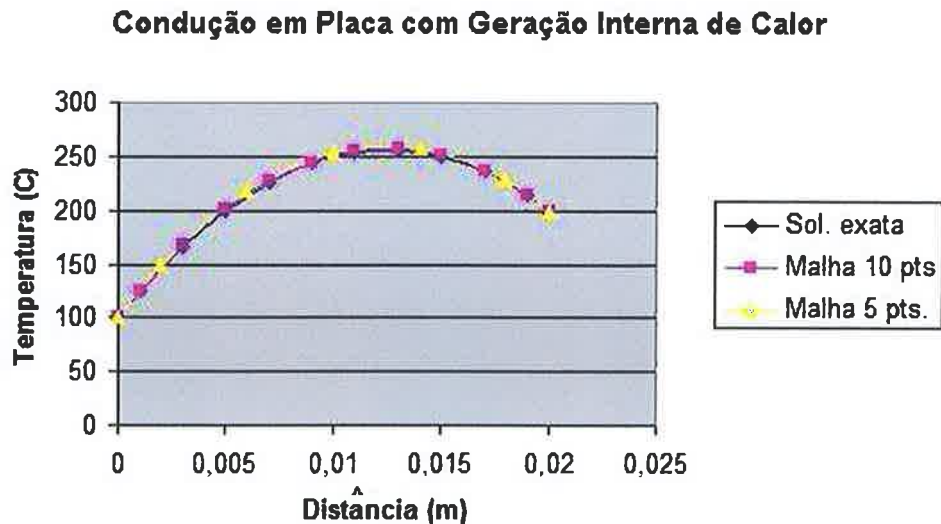


Figura 4.2: Condução numa Placa com Geração Interna de Calor

Os erros médios das soluções numéricas em relação à solução analítica são de 1,91% e 0,48% para a malha de 5 e 10 pontos, respectivamente. Observa-se então que com o refinamento da malha o erro diminui, o que atesta a consistência do esquema de discretização e solução numérica utilizados.

O objetivo deste teste é verificar a inclusão do termo de fonte/sumidouro na equação de

transporte, no caso a geração interna de calor. Pelos resultados mostrados, vê-se que o termo está corretamente incluso no método numérico.

4.1.3 Condução unidimensional em uma barra em regime transitório

Uma barra unidimensional de largura $L = 0,02m$ está inicialmente a uma temperatura uniforme $T_i = 200^\circ C$. No instante $t = 0s$, a face $x = L$ é submetida a uma temperatura de $0^\circ C$ e assim permanece. A outra superfície é isolada. As propriedades térmicas da barra são: condutividade $k = 10W/mK$, densidade $\rho = 1,0kg/m^3$ e calor específico $c = 10 \cdot 10^6 J/m^3 K$, de onde se extrai a difusividade $\alpha = 1 \cdot 10^6 m^2/s$. A solução analítica da evolução temporal da temperatura no interior da barra é dada pela expressão:

$$\frac{T(x, t)}{200} = \frac{4}{\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^{n+1}}{2n-1} \exp(-\alpha \lambda_n^2 t) \cos(\lambda_n x) \quad (4.3)$$

onde

$$\lambda_n = \frac{(2n-1)\pi}{2L} \quad \text{e} \quad \alpha = \frac{k}{\rho c} \quad (4.4)$$

A Fig. 4.3 mostra a distribuição de temperatura no interior da barra para o instante $t = 40s$.

Também da Fig. 4.3, verifica-se que tanto a malha de 5 quanto a de 10 pontos capturam muito bem a distribuição de temperatura no interior da peça no instante $t = 40s$.

O objetivo deste teste é verificar a discretização do termo transitório na equação de transporte. Pelos resultados mostrados, vê-se que o termo está corretamente incluso no método numérico.

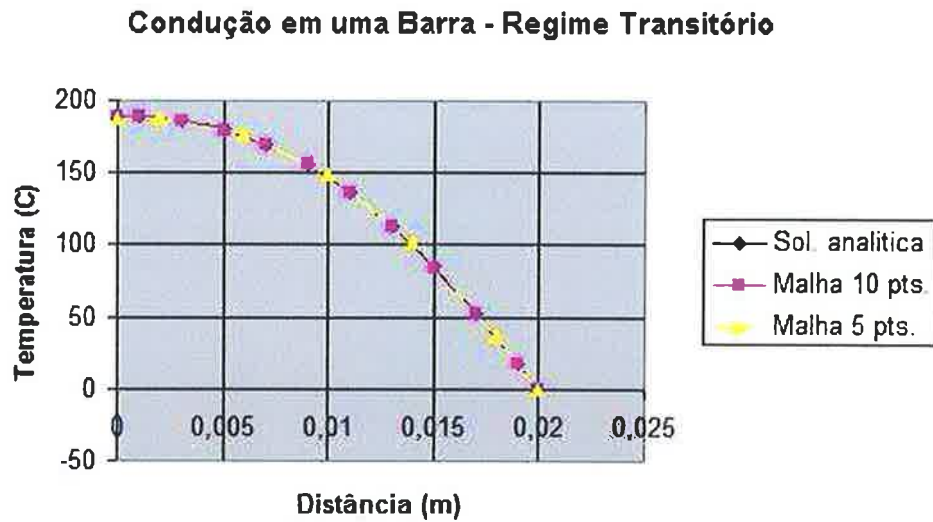


Figura 4.3: Condução numa Barra em Regime Transitório

4.1.4 Condução unidimensional em um cilindro com geração interna de calor

Um cilindro unidimensional de raio $r_o = 0,02m$ é mantido na temperatura externa $T_{sup} = 200^{\circ}C$, com geração interna de calor $q = 1.000.000W/m^3$. A expressão analítica da distribuição de temperatura dentro do cilindro é dada por:

$$T(r) = \frac{\dot{q}r_o^2}{4k} \left(1 - \frac{r^2}{r_o^2} \right) + T_{sup} \quad (4.5)$$

A Fig. 4.4 mostra a distribuição de temperatura no interior do cilindro.

Observa-se que tanto a malha de 5 quanto a de 10 pontos reproduzem muito bem a solução analítica. Os erros médios das soluções numéricas em relação à solução analítica são de 0,62% e 0,15% para a malha de 5 e 10 pontos, respectivamente. Observa-se então que com o refinamento da malha o erro diminui, o que atesta a consistência do esquema de discretização e solução numérica utilizados.

O objetivo deste teste é a verificação da discretização em coordenadas cilíndricas, que será utilizada posteriormente nas simulações de jatos e chamas.

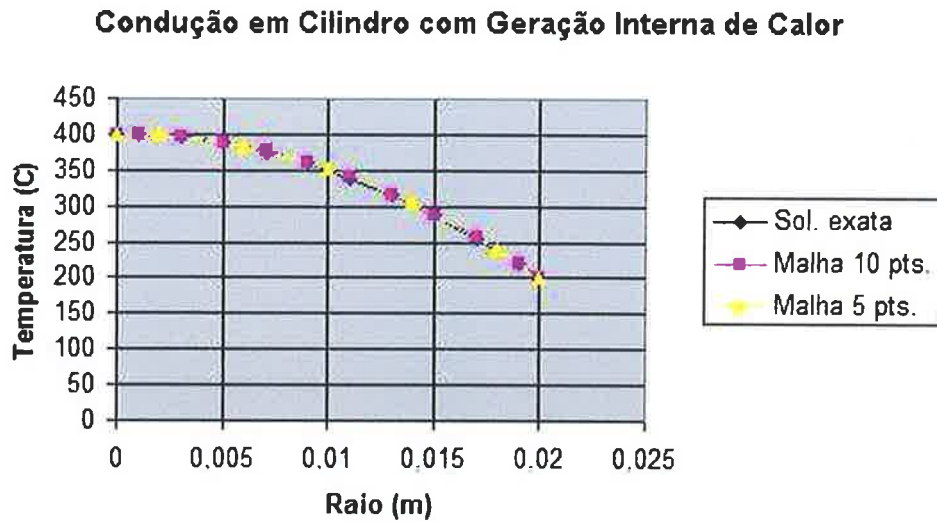


Figura 4.4: Condução num Cilindro com Geração Interna de Calor

4.1.5 Problema de convecção/difusão

Este caso já fora previamente reproduzido na subsecção 3.1.6, referente a comparação entre os diversos esquemas de discretização convectiva. será importante na solução da equação de Navier-Stokes.

4.1.6 Conclusões dos problemas de Condução e Convecção/Difusão

Com os problemas mostrados nesta seção, verificou-se o procedimento numérico de discretização e solução de uma equação de transporte para um escalar genérico.

Verificou-se a redução do erro numérico com o refinamento da malha, o que mostra que o esquema numérico é consistente. Observou-se também, para o problema de convecção/difusão o aparecimento de oscilações para o esquema CDS. Estes testes foram fundamentais para a implementação das equações de Navier-Stokes, que serão utilizadas para simulação da chama difusiva.

A discretização completa dos termos difusivos e convectivos pode ser vista no APÊNDICE I.

4.2 Validação da Equação de Navier-Stokes para Escoamento Laminar

Nesta seção será mostrada a validação do CFD para as equações de Navier-Stokes em coordenadas cilíndricas e cartesianas tridimensionais. Para a discretização das equações de Navier-Stokes ver o Apêndice II. Todas as simulações utilizam o esquema explícito de discretização no tempo de 1ª ordem (Euler) para as velocidades e escalares, e o esquema CDS para fluxos convectivos.

4.2.1 Escoamento laminar em tubo

Para o escoamento desenvolvido num tubo de seção circular, a solução analítica da distribuição radial da velocidade axial é dada por:

$$u_x(L_d, r) = 2,0 \cdot U_{x,0} \left[1 - \left(\frac{r}{R} \right)^2 \right] \quad (4.6)$$

onde L_d é o comprimento de desenvolvimento e $U_{x,0}$ é a velocidade axial na seção de entrada do tubo e R é o raio do tubo.

Em todos os casos simulados para escoamento laminar, o termo de fonte S_u foi admitido nulo conforme o exposto por Malalasekera pg. 24 [57]. As velocidades transversais para o problema cartesiano (v e w) foram ajustadas com valor nulo na linha de simetria. Na fronteira de saída foi considerado gradiente nulo para todas as velocidades e escalares, e para as fronteiras na direção axial (comprimento do domínio), foi considerada condição de contorno com valores nulos.

A Fig. 4.5 mostra a distribuição da velocidade axial normalizada ($u/U_{x,0}$) na saída do tubo de seção circular ao longo do raio normalizado (r/R) para um escoamento laminar tridimensional, com as seguintes características:

- $Re = 20$, $R = 1,0m$, $U_{x,0} = 0,0001m/s$, $L_d = 5,0m$
- número de pontos da malha: 30(x)x20(r)x3(teta)
- passo = 20s

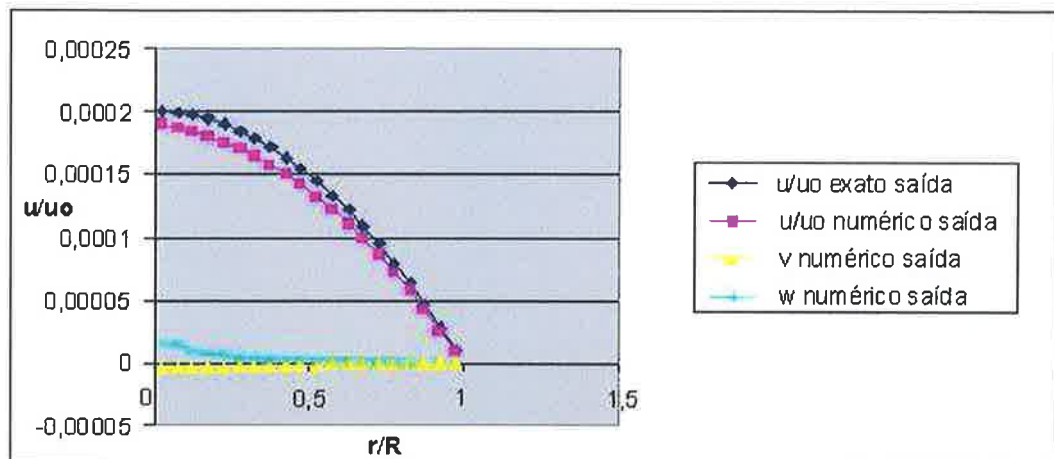


Figura 4.5: Escoamento Laminar Tridimensional em Tubo Circular ($Re=20$) - distribuição da velocidade axial normalizada ao longo do raio normalizado

- iterações = 5.000
- erro médio = 10,63%

Observa-se uma boa concordância do resultado numérico com o perfil analítico da velocidade axial. As velocidades radiais (v) e circunferenciais (w) se mantêm próximas de zero.

Além do caso cilíndrico, foi também simulado o escoamento laminar em um tubo de seção quadrada em coordenadas cartesianas (o duto de seção quadrada pode ser visto em Fletcher pg. 289 [8]). Neste caso, apenas um quarto do domínio foi calculado:

- $Re = 20$, $D_h = 2,0m$, $U_{x,0} = 0,0001m/s$, $L_d = 5,0m$
- número de pontos da malha: $30(x) \times 15(y) \times 15(z)$
- passo = 100s
- iterações = 500

A Fig. 4.6 mostra a distribuição da velocidade axial normalizada ($u/U_{x,0}$) na saída do tubo de seção quadrada ao longo do raio normalizado (r/R) para um escoamento laminar tridimensional. Observa-se ótima concordância entre o valor da velocidade axial exata e a calculada numericamente. As velocidades cartesianas v , na direção y , como w , na direção z , são praticamente nulas ao longo da seção quadrada de saída do duto.

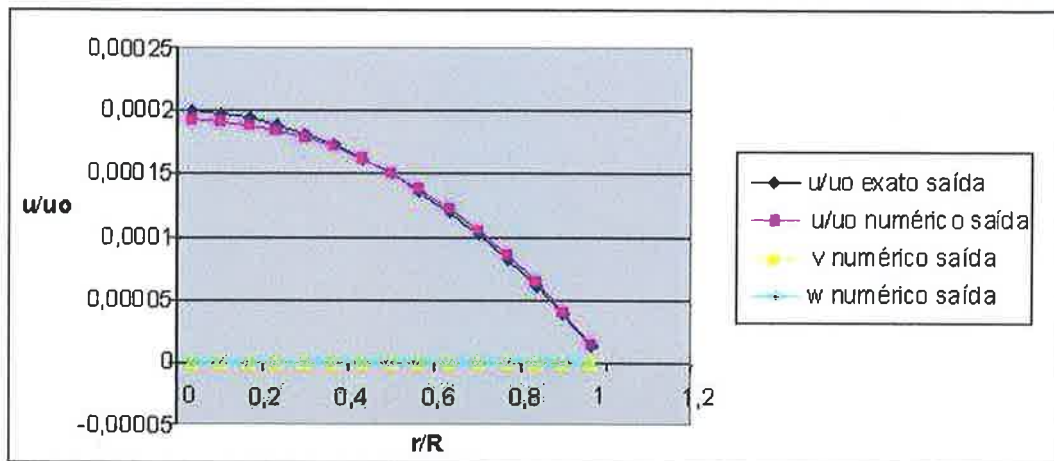


Figura 4.6: Escoamento Laminar Tridimensional em Tubo Seção Quadrada ($Re=20$) - distribuição da velocidade axial normalizada ao longo do raio normalizado

Nota-se, que a simulação do tubo com escoamento laminar em coordenadas cartesianas foi feita com um passo no tempo menor que o utilizado para coordenadas cilíndricas. Isto ocorre devido a uma restrição no valor do passo. Sabe-se que no método explícito existe uma restrição quanto ao valor do passo, de forma a garantir que todos os coeficientes da equação discretizada sejam positivos (ver Malalasekera pg. 171 [57]). Diferentemente do sistema de coordenadas cartesianas, onde todas as células computacionais têm o mesmo volume (para malha uniforme), no caso de coordenadas cilíndricas, as células próximas à linha de simetria têm volumes cada vez menores. Isto implica na necessidade de menores passos para garantir os termos positivos. Ainda, destaca-se que existe um limite inferior para o valor do passo, que faz com o código CFD não realize nem a primeira iteração, pois o valor é tão pequeno que não gera diferenças no campo inicial de velocidades e escalares.

4.2.2 Jato laminar não-confinado

O decaimento da velocidade axial para um jato laminar livre é dado pela seguinte solução analítica [55]:

$$\frac{u_{x,0}}{u_s} = 0,375 \left(\frac{\rho_s u_s R}{\mu} \right) \left(\frac{x}{R} \right)^{-1} \quad (4.7)$$

onde u_s é a velocidade de saída do jato laminar e R é o raio do jato. Pode-se ver que o

decaimento da velocidade é inversamente proporcional a distância axial e diretamente proporcional ao número de Reynolds do jato ($Re_j \equiv \rho_s u_s R / \mu$). A eq. (4.7) mostra ainda que a solução não é válida próxima ao bocal (saída do jato), uma vez que $u_{x,0}/u_s$ não deve exceder a unidade.

Na Fig. 4.7 pode-se ver o resultado da simulação do jato laminar tridimensional livre em coordenadas cilíndricas com os seguintes dados:

- $Re = 1,5$, $r_{jet} = 0,1667m$, $D_{domnio} = 2,0m$, $u_{x,0} = 0,0001m/s$, $L_{domnio} = 10m$
- número de pontos da malha: 30(x)x30(r)x4(teta), com 5 pontos dentro do jato
- passo = 20s
- iterações = 5.000
- erro médio = 13,13%

A Fig. 4.7 mostra o decaimento das velocidades axiais ao longo do raio na saída do bocal e na saída do domínio. A Fig. 4.8 mostra o decaimento da velocidade axial normalizada ($u_{x,0}/u_s$) ao longo da linha de centro do domínio normalizada (x/D). Observa-se que o decaimento da velocidade axial é maior na solução exata, denotando que a solução numérica não tende a ser difusiva o suficiente.

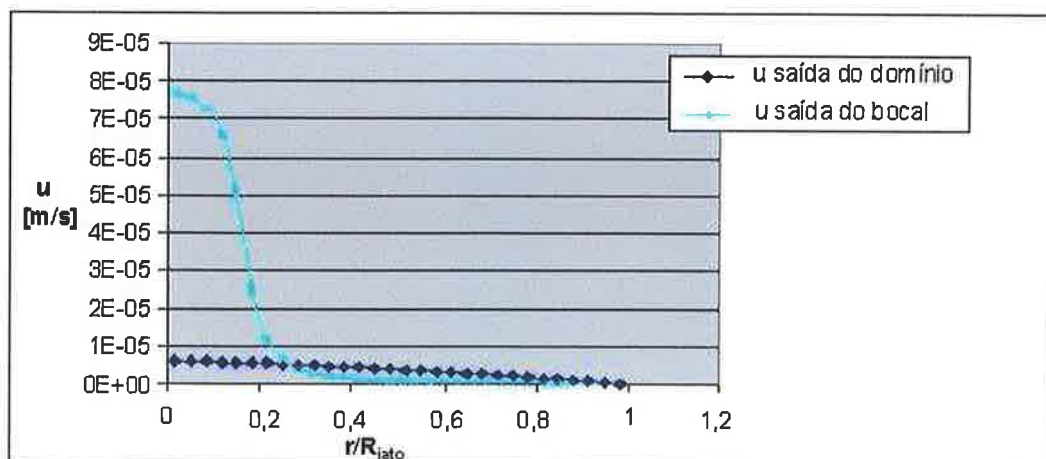


Figura 4.7: Jato Laminar Tridimensional Cilíndrico ($Re=1,5$) - velocidades axiais ao longo do raio na saída do bocal e na saída do domínio

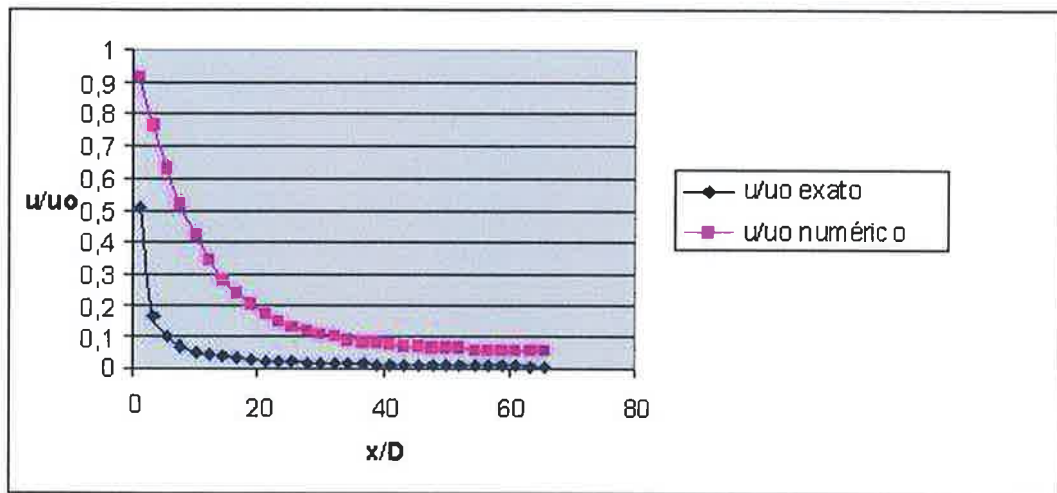


Figura 4.8: Jato Laminar Tridimensional Cilíndrico ($Re=1,5$) - decaimento da velocidade axial normalizada ao longo do comprimento do domínio normalizado

4.2.3 Conclusões da validação das equações de Navier-Stokes para escoamento laminar

Os resultados da validação do código CFD para escoamento laminar em tubo como em jato se mostraram satisfatórios. O melhor resultado se mostrou para a implementação da malha cartesiana, caracterizado por robustez de passo no tempo e simetria dos resultados.

No geral, os resultados para a resolução das equações de Navier-Stokes se mostraram razoáveis para os problemas do tubo e jato laminares, porém já demonstrando um pouco que o código CFD implementado não consegue ser dissipativo o suficiente na direção radial para “abrir” mais o escoamento, como visto no jato com espalhamento menor que o real.

4.3 Validação Turbulenta com Modelo Termo-Químico

Nesta seção é mostrada a simulação do CFD para um jato turbulento com a técnica de simulação de grandes estruturas turbulentas (LES), e sobre este domínio ensaiado é simulada uma chama difusiva turbulenta com LES. Todas as simulações utilizam o esquema explícito de discretização no tempo de 1^a ordem (Euler) para as velocidades

e escalares, e o esquema CDS para fluxos convectivos.

4.3.1 Validação do Escoamento Turbulento com LES

O escoamento turbulento modelado com LES, utilizando-se modelo de Smagorinsky para a modelagem da viscosidade turbulenta, foi simulado em uma malha 3D cilíndrica.

Para a perturbação do regime turbulento é utilizada uma função randômica que altera o valor da velocidade axial na saída bocal em até 20% a cada passo do filtro LES. Neste trabalho é utilizada a chama Sandia D [62], uma chama pilotada bem conhecida da comunidade acadêmica com 25%/75% mistura metano/ar, com as seguintes características:

- número de Reynolds= 22.400
- raio do jato= 0,0036m
- velocidade na saída do jato= 49,0m/s
- velocidade do *coflow*= 0,2m/s

Os seguintes dados foram usados para a simulação:

- passo= 0,000001s, $passo_{LES}$ = 0,001s, tempo de simulação= 0,5s
- tolerância= 0,001%
- comprimento radial do domínio= 0,040m (11 vezes o tamanho do raio do bocal)
- comprimento axial do domínio= 0,48m (60 vezes o diâmetro do tubo)
- número de pontos da malha: 100(x)x24(r)x5(teta)

A Fig. 4.9 mostra o decaimento da velocidade axial ao longo da linha de centro normalizada x/D para o instante de tempo do LES de 0,001s (o tempo total da simulação é de 0,5s). A Fig. 4.10 mostra o decaimento da velocidade axial ao longo da distância radial normalizada, $r_{jato}/D_{dominio}$, na saída do bocal ($x/D = 0$) para o instante de tempo do LES de 0,001s. A Fig. 4.11 mostra o mesmo decaimento radial, porém para a fração de mistura.

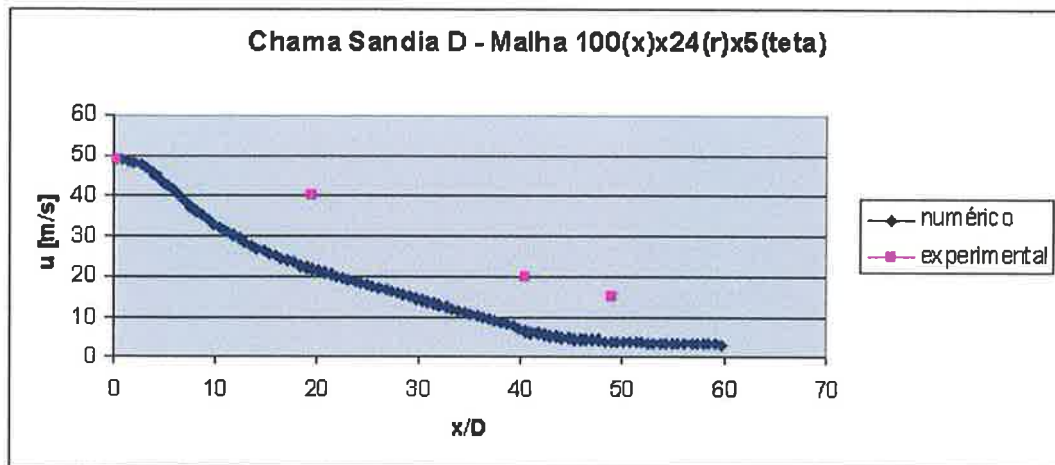


Figura 4.9: Jato Turbulento Cilíndrico 3D LES ($Re=22.400$) - decaimento da velocidade axial ao longo da linha de centro

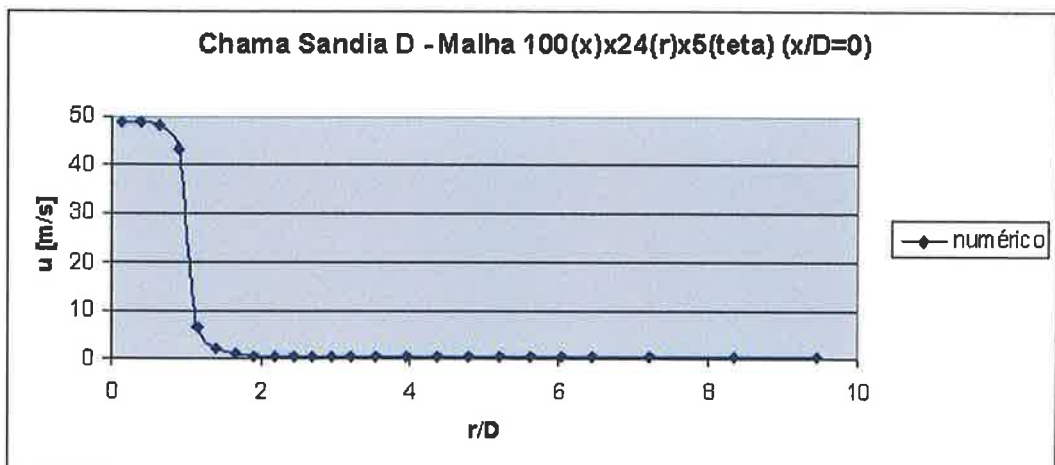


Figura 4.10: Jato Turbulento Cilíndrico 3D LES ($Re=22.400$) - decaimento da velocidade axial no plano radial $x/D=0$

4.3.2 Validação da Chama de Difusão com LES

Utilizando o mesmo domínio computacional do escoamento turbulento, faz-se uso do escalar fração de mistura f , juntamente com o modelo termo-químico *flame sheet*, para simulação da chama difusiva turbulenta.

A Fig. 4.12 mostra a variação da fração de mistura f em função da distância axial normalizada x/D . Ademais os dados utilizados na subseção 4.3.1, foram utilizados os seguintes para a simulação do jato turbulento:

- temperatura do ar ao longe= $20^{\circ}C$

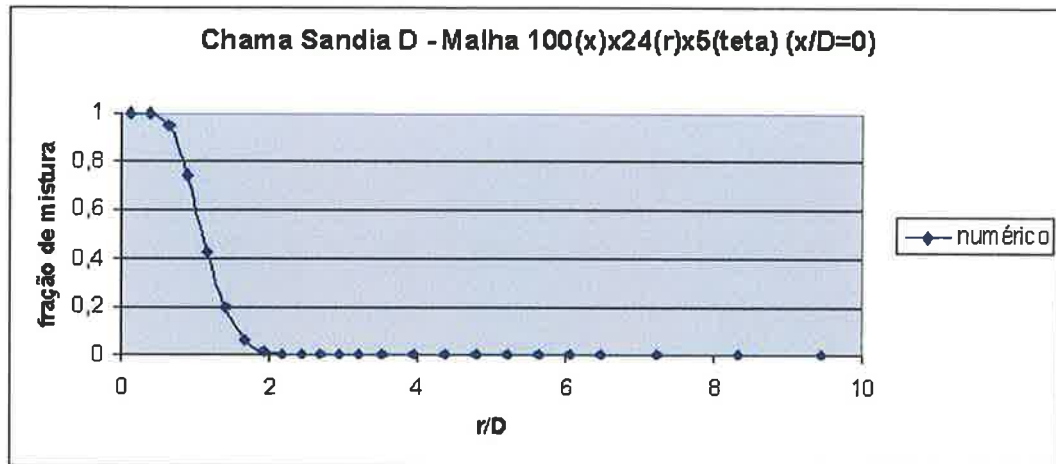


Figura 4.11: Jato Turbulento Cilíndrico 3D LES ($Re=22.400$) - decaimento da fração de mistura no plano radial $x/D=0$

- temperatura do metano ao longe $=20^{\circ}C$

Nota-se que a medida que o escoamento reativo se afasta da saída do bocal, a fração de mistura tende a diminuir, isto é, a temperatura aumenta e a presença de carbono cai.

A Fig. 4.13 mostra o perfil da temperatura ao longo do eixo de simetria axial. Observa-se que a temperatura aumenta da saída do metano do bocal, a $20^{\circ}C$, até a temperatura adiabática de chama, referente a fração de mistura estequiométrica de 0,055, e depois decai para a temperatura do fluido ao longe.

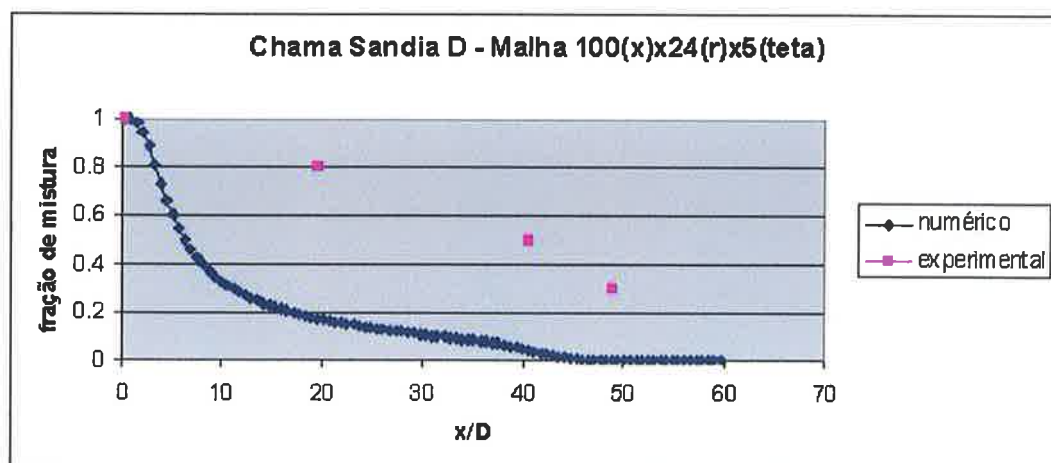


Figura 4.12: Chama Difusiva Turbulenta Cilíndrica 3D LES ($Re=22.400$) - variação da fração de mistura ao longo do eixo de simetria axial normalizada

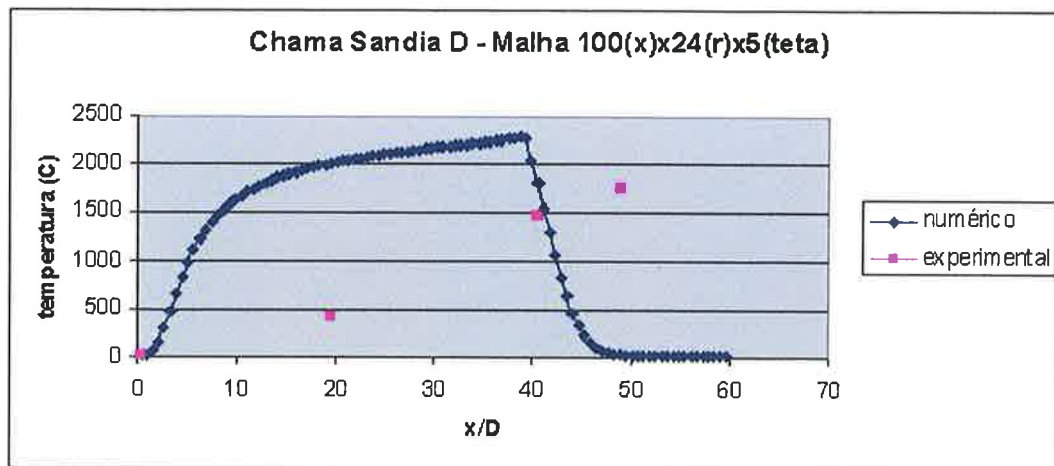


Figura 4.13: Chama Difusiva Turbulenta Cilíndrica 3D LES ($Re=22.400$) - variação da temperatura ao longo do eixo de simetria axial

4.3.3 Conclusões da validação turbulenta com modelo termo-químico

A qualidade dos resultados numéricos obtidos para a chama difusiva turbulenta comparados com os dados experimentais da chama Sandia D (TU-Darmstadt) [62], objetivo final deste trabalho, se mostrou pouco satisfatória (Fig. 4.9, Fig. 4.12 e Fig. 4.13). Observa-se que o decaimento da velocidade axial ao longo do eixo de simetria axial cai mais rapidamente do que a chama real, dando a idéia de uma chama mais “curta” que a real. Logo, os perfis obtidos para a fração de mistura, e, conseqüentemente, temperatura, são mais achatados que os verificados experimentalmente.

O perfil de velocidade axial ao longo do plano radial $x/D=0$ (Fig. 4.10) decai muito rapidamente no plano de saída do bocal do jato.

4.4 Discussão e Conclusão

Neste trabalho, o método de simulação de grandes estruturas turbulentas (LES) foi desenvolvido para uma chama difusiva não-confinada. Apesar da comparação dos dados experimentais da literatura [61, 62] com os resultados numéricos ser pouco satisfatória, a compreensão de todas as validações necessárias para se tentar alcançar o objetivo do trabalho foram de grande importância para a construção e desenvolvimento do código CFD. Além disso, obteve-se um código flexível que pode ser utilizado facilmente na reprodução de outros programas CFD, uma vez que toda a programação foi orientada

a objetos. Rotinas de paralelização, como o MPI¹ implementado, fizeram o tempo total de simulação cair para quase um sétimo do tempo, caso fosse utilizado apenas um computador. As últimas simulações da chama difusiva turbulenta, que constam da seção 4.3.1, demoraram três dias para serem concluídas rodando em sete nós de um *cluster* de computadores. Caso a simulação fosse feita com um único computador deste *cluster*, o tempo de obtenção dos resultados seria de aproximadamente 20 dias, o que inviabilizaria o uso da técnica de LES.

Sobre as validações do CFD, pode-se citar a consistência de resultados para os esquemas de discretização de fluxos difusivos e convectivos com a literatura. Ademais, a validação da equação de Navier-Stokes para escoamentos laminares em tubo e jato não-confinado mostraram bons resultados se comparados com suas soluções analíticas, e ainda utilizando-se de um esquema de discretização no tempo de 1^a ordem. As soluções calculadas se mostraram consistentes no que se refere ao refinamento da malha, passo no tempo e tipo de malha utilizada (cilíndrica e cartesiana). Devido às dificuldades em se obter o perfil de velocidade para a chama turbulenta difusiva Sandia D, pode-se citar possíveis causas para a qualidade dos resultados obtidos:

- **modelo de difusividade turbulenta:** o modelo de Smagorinsk implementado pode estar demasiadamente difusivo na direção axial, fazendo com que a chama seja mais “curta”, e pouco difusivo na direção radial, fazendo com o jato seja mais fino ao invés de abrir-se mais.
- **condições de contorno:** foi feito uso de uma função randômica para modificar as condições de contorno da velocidade na saída do jato a cada passo do LES. Assim, o valor da velocidade poderia ser acrescido ou diminuído em até 20%. Como, na prática, não é possível determinar as perturbações experimentalmente, o uso da função randômica foi uma das formas de se modelar este problema, não obstante o uso de outras técnicas computacionais.
- **complexidade numérica/implementação:** o uso do método PRIME de acoplamento pressão-velocidade foi adotado após sucessivas tentativas fracassadas de usar outros métodos comumente utilizados, como o de Rhie-Chow e o SIMPLE. Observou-se que existe uma rigidez intrínseca ao código CFD, que uma vez implementado com um conjunto de características (tipo de malha e coordenadas, esquema de discretização dos fluxos convectivos e difusivos, passo implícito ou explícito no tempo, etc.), torna-se mais difícil fazer outras combinações funcionais.

¹*message passing interface* [21]

Devido as equações de Navier-Stokes denotarem uma solução contínua em todo o campo de estudo, a implementação numérica discretizada de tais equações forma um conjunto de equações não-lineares a serem resolvidas no tempo e no espaço. Além disso, foi verificado o problema da dependência da malha computacional.

Apesar de todos os desafios encontrados durante a construção e desenvolvimento do código CFD, visando a simulação de uma chama difusiva com LES, o autor acredita que o presente trabalho servirá de base para o prosseguimento do estudo de LES em combustão, resolvendo o problema da qualidade dos resultados com o exposto acima, e posterior melhoria do código, através da implementação de modelos termo-químicos mais complexos e esquemas de discretização de ordem superiores.

APÊNDICE I

DISCRETIZAÇÃO DOS TERMOS DIFUSIVOS E CONVECTIVOS

Discretização do Termo Difusivo

O fluxo difusivo na face e do volume de controle é dado por

$$F_e^d = \int_{se} \Gamma \text{grad} \phi \cdot \vec{n} ds \approx \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_e \Delta y \Delta z$$

O gradiente do escalar ϕ na face e pode ser aproximado por

$$\left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_e = \frac{\phi_E - \phi_P}{x_E - x_P},$$

que resulta num erro de truncamento de 2ª ordem. Então, o fluxo difusivo na face e pode ser aproximado por

$$F_e^d = \frac{\Gamma \Delta y \Delta z}{(x_E - x_P)} (\phi_E - \phi_P)$$

Montando-se expressões análogas para as outras faces e observando-se o sinal da normal de cada face, obtém-se os coeficientes difusivos:

$$\begin{aligned} A_E^d &= \frac{\Gamma \Delta y \Delta z}{x_E - x_P} \\ A_W^d &= \frac{\Gamma \Delta y \Delta z}{x_P - x_W} \\ A_N^d &= \frac{\Gamma \Delta y \Delta z}{y_N - y_P} \\ A_S^d &= \frac{\Gamma \Delta y \Delta z}{y_P - y_S} \\ A_T^d &= \frac{\Gamma \Delta y \Delta z}{z_T - z_P} \\ A_B^d &= \frac{\Gamma \Delta y \Delta z}{z_P - z_B} \end{aligned}$$

O coeficiente difusivo relativo ao ponto P é a soma dos coeficientes dos volumes vizinhos, com sinal trocado

$$A_P^d = - (A_E^d + A_W^d + A_N^d + A_S^d + A_T^d + A_B^d)$$

Discretização do Termo Convectivo

Para a discretização do termo convectivo (ou advectivo) é necessário avaliar o valor da propriedade ϕ na face do volume de controle. O valor discreto da propriedade ou escalar ϕ é armazenado no centro do volume de controle. Neste trabalho, quatro esquemas de discretização foram implementados: CDS, UPWIND, HÍBRIDO e TVD. A formulação destes esquemas é apresentada a seguir.

Esquemas CDS, UPWIND e HÍBRIDO

Para aproximação do valor na face utiliza-se a interpolação linear na forma:

$$\phi_e = \phi_E \lambda_e + \phi_P (1 - \lambda_e) \quad (8)$$

Pode-se mostrar que esta aproximação é de 2ª ordem. O fator de interpolação λ pondera a distância da face aos centros dos volumes de controle vizinhos:

$$\lambda_e = \frac{x_e - x_P}{x_E - x_P}.$$

Para $\lambda_e = 0,5$ recupera-se a interpolação CDS (*Central Differencing Scheme*) de erro de truncamento 2ª ordem. O esquema UPWIND, mais difusivo e portanto mais estável é reproduzido fazendo-se $\lambda_e = 0$. O erro de truncamento do esquema UPWIND é de 1ª ordem. O esquema HÍBRIDO procura ajustar a interpolação entre o esquema CDS e o UPWIND é obtido avaliando-se o Número de Peclet em cada volume de controle. A razão entre o transporte convectivo F_e^c e o difusivo F_e^d na face e do volume de controle é o Número de Peclet Pe_e :

$$Pe_e = \frac{F_e^c}{F_e^d} = \frac{(\rho u)_e}{\Gamma / (x_E - x_P)}.$$

Para faces, no exemplo as faces leste, nas quais $Pe_e < 2,0$, faz-se $\lambda_e = 0,5$ e o esquema CDS é aplicado. Para faces com $Pe_e \geq 2,0$ faz-se $\lambda_e = 0$ e o esquema UPWIND é aplicado. Desta forma, pode-se garantir estabilidade em volumes de controle onde o transporte convectivo levaria a oscilações, e a precisão é preservada em volumes de controle com baixo transporte convectivo.

O fluxo convectivo na face leste F_e^c do volume de controle pode ser aproximado por

$$F_e^c = \int_{se} \rho \phi \vec{v} \vec{n} dS \approx \dot{m}_e \phi_e,$$

onde \dot{m}_e é o fluxo mássico através da face e , dado por

$$\dot{m}_e = \int_{se} \rho \vec{v} \vec{u} ds = (\rho u_x)_e \Delta y \Delta z.$$

Para a face w , o produto escalar entre o vetor normal à face e o vetor velocidade normal à face entrando no volume de controle, dá sinal negativo. Assim, o fluxo na face w é dado por

$$\dot{m}_w = \int_{sw} \rho \vec{v} \vec{u} ds = -(\rho u_x)_w \Delta y \Delta z.$$

Usando a função de interpolação eq. (4.4), o fluxo convectivo na face e pode ser interpolado com os valores da propriedade nos pontos P e E , resultando:

$$F_e^c = \dot{m}_e (1 - \lambda_e) \phi_P + \dot{m}_e \lambda_e \phi_E$$

De forma análoga para as outras 6 faces, pode-se obter os coeficientes convectivos relativos aos 6 volumes de controle vizinhos ao ponto P :

$$\begin{aligned} A_E^C &= \dot{m}_e \lambda_e \\ A_W^C &= -\dot{m}_w \lambda_w \\ A_N^C &= \dot{m}_n \lambda_n \\ A_S^C &= -\dot{m}_s \lambda_s \\ A_T^C &= \dot{m}_t \lambda_t \\ A_B^C &= -\dot{m}_b \lambda_b \end{aligned}$$

O coeficiente convectivo relativo ao ponto P é a soma, com sinal trocado, dos coeficientes convectivos dos pontos vizinhos:

$$A_P^C = - \left(A_E^C + A_W^C + A_N^C + A_S^C + A_T^C + A_B^C \right) + \underbrace{\dot{m}_e - \dot{m}_w + \dot{m}_n - \dot{m}_s + \dot{m}_t - \dot{m}_b}_{=0.0 \text{ Continuidade}}$$

Substituindo-se os fluxos convectivos e difusivos para cada face do volume de controle na eq. (2.1), obtém-se a equação discretizada:

$$\begin{aligned}
& \rho \frac{\Delta y \Delta z}{\Delta t} (\phi_P^{t+1} - \phi_P^t) + \overbrace{\dot{m}_e \lambda_e \phi_E + \dot{m}_e (1 - \lambda_e) \phi_P}^{A_E} \\
& - \left[\overbrace{\dot{m}_w \lambda_w \phi_W + \dot{m}_w (1 - \lambda_w) \phi_P}^{A_W} \right] \\
& + \overbrace{\dot{m}_n \lambda_n \phi_N + \dot{m}_n (1 - \lambda_n) \phi_P}^{A_N} \\
& - \left[\overbrace{\dot{m}_s \lambda_s \phi_S + \dot{m}_s (1 - \lambda_s) \phi_P}^{A_S} \right] \\
& + \overbrace{\dot{m}_t \lambda_t \phi_T + \dot{m}_t (1 - \lambda_t) \phi_P}^{A_T} \\
& - \left[\overbrace{\dot{m}_b \lambda_b \phi_B + \dot{m}_b (1 - \lambda_b) \phi_P}^{A_B} \right] = \\
& = \overbrace{\frac{\Gamma \Delta y \Delta z}{(x_E - x_p)} (\phi_E - \phi_p^t)}^{\text{normal}+\vec{x}} - \overbrace{\frac{\Gamma \Delta y \Delta z}{(x_p - x_w)} (\phi_p^t - \phi_w)}^{\text{normal}-\vec{x}} + \\
& + \underbrace{\frac{\Gamma \Delta x \Delta z}{(y_N - y_p)} (\phi_N - \phi_p^t)}_{A_E^D} - \underbrace{\frac{\Gamma \Delta x \Delta z}{(y_p - y_S)} (\phi_p^t - \phi_S)}_{A_W^D} + \\
& + \frac{\Gamma \Delta x \Delta y}{(z_T - z_p)} (\phi_T - \phi_p^t) - \frac{\Gamma \Delta x \Delta y}{(z_p - z_B)} (\phi_p^t - \phi_B) + \dot{g}_{ger}''' \Delta x \Delta y \Delta z.
\end{aligned}$$

Os coeficientes convectivos podem ser agrupados na forma:

$$\begin{aligned}
A_E^C &= \dot{m}_e \lambda_e \\
A_W^C &= -\dot{m}_w \lambda_w \\
A_N^C &= \dot{m}_n \lambda_n \\
A_S^C &= -\dot{m}_s \lambda_s \\
A_T^C &= \dot{m}_t \lambda_t \\
A_B^C &= -\dot{m}_b \lambda_b \\
A_P^C &= -(A_E^C + A_W^C + A_N^C + A_S^C + A_T^C + A_B^C) + \underbrace{\dot{m}_e - \dot{m}_w + \dot{m}_n - \dot{m}_s + \dot{m}_t - \dot{m}_b}_{=0(\text{Continuidade})}
\end{aligned}$$

Os coeficientes difusivos podem ser agrupados em:

$$\begin{aligned} A_E^d &= \frac{\Gamma \Delta y \Delta z}{(x_E - x_P)} \\ A_W^d &= \frac{\Gamma \Delta y \Delta z}{(x_P - x_W)} \\ A_N^d &= \frac{\Gamma \Delta x \Delta z}{(y_N - y_P)} \\ A_S^d &= \frac{\Gamma \Delta x \Delta z}{(y_P - y_S)} \\ A_T^d &= \frac{\Gamma \Delta x \Delta y}{(z_T - z_P)} \\ A_B^d &= \frac{\Gamma \Delta x \Delta y}{(z_P - z_B)} \end{aligned}$$

com o coeficiente do ponto P dado por

$$A_P^d = -(A_E^d + A_W^d + A_N^d + A_S^d + A_T^d + A_B^d).$$

Escrevendo-se a equação discretizada na forma explícita tem-se:

$$\begin{aligned} \left(\rho \frac{\Delta x \Delta y \Delta z}{\Delta t} \right) \phi_P^{t+1} &= (-A_E^C + A_E^d) \phi_E + (-A_W^C + A_W^d) \phi_W \\ &+ (-A_N^C + A_N^d) \phi_N + (-A_S^C + A_S^d) \phi_S \\ &+ (-A_T^C + A_T^d) \phi_T + (-A_B^C + A_B^d) \phi_B \\ &+ (-A_P^C + A_P^d) \phi_P^{t-1} + \rho \frac{\Delta x \Delta y \Delta z}{\Delta t} \phi_P^{t-1} + \dot{q}''' \Delta x \Delta y \Delta z \end{aligned}$$

Esquema TVD

No trabalho de Kempf [24], que simulou uma chama de difusão turbulenta, grande ênfase é dada à questão do erro de truncamento do termo convectivo. Se por um lado o esquema CDS é de precisão de 2ª ordem, ele introduz oscilações no escalar transportado, o que, por exemplo, para uma chama com modelo de fração de mistura poderia levar a valores menores que zero ou maiores que um. Soluções triviais como limitar o valor da variável transportada aos seus limites físicos leva um padrão de mistura (tipo tabuleiro de xadrez) fisicamente não realista. O esquema UPWIND, por introduzir viscosidade numérica à equação discretizada, evita as oscilações, mas suaviza demasiadamente os gradientes do escalar. Para o caso de uma chama pré-misturada, isto levaria a uma região de frente de chama muito mais espessa que o verificado experimentalmente. Para contornar estes dois problemas, Kempf [24] propõe um esquema de interpolação para o termo convectivo baseado não na distância entre os nós dos volumes de controle, mas na razão entre os valores do escalar nestes nós. Para efeito de testes, este modelo foi implementado na forma unidimensional em coordenadas cartesianas.

O valor do escalar face e , ϕ_e , do volume de controle para o caso de $U_e, U_w > 0$ é aproximado por

$$\phi_e = \phi_p + B_{(r)} \frac{(\phi_p - \phi_w)}{2},$$

onde $B_{(r)} \rightarrow$ é a função de limitação de fluxo, que é função da razão entre o valor do escalar no ponto P e seus vizinhos:

$$r = \frac{\phi_E - \phi_P}{\phi_P - \phi_W}$$

A função de limitação de fluxo pode assumir os valores que seguem, de forma a reproduzir os esquemas CDS, UPWIND e o denominado CHARM.

$$B_{(r)} = 0 \rightarrow UPWIND$$

$$B_{(r)} = 0 \rightarrow CDS$$

No esquema CHARM:

$$B = r(3r + 1)/(r + 1)^2 \quad \wedge \quad r > 0$$

ou

$$B = 0 \quad \wedge \quad r \leq 0$$

Para a face w com $U_e, U_w > 0$ tem-se:

$$\phi_w = \phi_W + B_{(r)} \left(\frac{\phi_E - \phi_P}{2} \right),$$

onde

$$r = \frac{\phi_P - \phi_W}{\phi_E - \phi_P}$$

Para a face e com $U_e, U_w < 0$ tem-se:

$$\phi_e = \phi_E + B_{(r)} \left(\frac{\phi_W - \phi_P}{2} \right),$$

onde

$$r = \frac{\phi_P - \phi_E}{\phi_W - \phi_P}$$

Para a face w com $U_e, U_w < 0$ tem-se:

$$\phi_w = \phi_P + b_{(r)} + \left(\frac{\phi_P - \phi_E}{2} \right),$$

onde

$$r = \frac{\phi_W - \phi_P}{\phi_P - \phi_E}.$$

A equação de transporte do escalar ϕ na forma unidimensional pode ser escrita então como

$$\rho \frac{\Delta x \Delta y \Delta z}{\Delta t} (\phi_P^{t+1} - \phi_P^t) + \dot{m}_e \left(\phi_P + B_{(r)} \left(\frac{\phi_P - \phi_w}{2} \right) \right) - \dot{m}_w \left(\phi_W + B_{(r)} \left(\frac{\phi_E - \phi_P}{2} \right) \right) = A_E^d \phi_E + A_W^d \phi_W + (A_P^d) \phi_P^{t-1} + \dot{q}''' \Delta x \Delta y \Delta z,$$

onde os coeficientes convectivos do esquema TVD podem então ser agrupados em função da direção das velocidades nas faces e e w como: $U_e, U_w > 0$:

$$\begin{aligned} A_E^C &= -\dot{m}_w \frac{B_{(r)|w}}{2} \\ A_W^C &= -\dot{m}_e \frac{B_{(r)|e}}{2} - \dot{m}_w \\ A_P^C &= \dot{m}_e + \frac{B_{(r)|e} \dot{m}_e}{2} + \dot{m}_w \frac{B_{(r)|w}}{2} \end{aligned}$$

$U_e, U_w < 0$:

$$\begin{aligned} A_E^C &= \dot{m}_e + \dot{m}_w \frac{B_{(r)|w}}{2} \\ A_W^C &= \dot{m}_e \frac{B_{(r)|e}}{2} \\ A_P^C &= -\dot{m}_e \frac{B_{(r)|e}}{2} - \dot{m}_w - \dot{m}_w \frac{B_{(r)|w}}{2} \end{aligned}$$

Para os volumes de controle de fronteira, foi feito $B_{(r)} = 0$ (UPWIND).

APÊNDICE II

EQUAÇÃO DE NAVIER-STOKES

Foram implementadas no código as equações de Navier-Stokes em coordenadas cilíndricas e cartesianas. Abaixo, seguem as equações para coordenadas cartesianas tridimensionais, que foram usadas para a simulação da chama turbulenta difusiva.

$$\rho \frac{Du}{Dt} = -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \left[2\mu \frac{\partial u}{\partial x} + \lambda \text{div} \mathbf{u} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[\mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[\mu \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) \right] + S_{Mx}$$

$$\rho \frac{Dv}{Dt} = -\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial x} \left[\mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[2\mu \frac{\partial v}{\partial y} + \lambda \text{div} \mathbf{u} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[\mu \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right) \right] + S_{My}$$

$$\rho \frac{Dz}{Dt} = -\frac{\partial p}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial x} \left[\mu \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[\mu \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[2\mu \frac{\partial w}{\partial z} + \lambda \text{div} \mathbf{u} \right] + S_{Mz}$$

onde S_{Mi} é o termo de fonte.

Rearranjando os termos viscosos das equações acima de outra forma:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial x} \left[2\mu \frac{\partial u}{\partial x} + \lambda \text{div} \mathbf{u} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[\mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[\mu \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) \right] \\ &= \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial z} \right) \\ &+ \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial v}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial w}{\partial x} \right) \right] \\ &+ \frac{\partial}{\partial x} (\lambda \text{div} \mathbf{u}) = \text{div}(\mu \text{gradu}) + s_{Mx} \end{aligned}$$

Os termos viscosos em y e z podem ser rearranjados da mesma forma. Pode-se simplificar as equações de *momentum* encapsulando as duas pequenas contribuições das tensões viscosas no termo de fonte, definindo um novo termo de fonte:

$$S_M = S_M + s_M$$

As equações de Navier-Stokes podem ser escritas na forma mais útil para o desenvolvimento do método de volumes finitos:

$$\rho \frac{Du}{Dt} = -\frac{\partial p}{\partial x} + \text{div}(\mu \text{grad}u) + S_{Mx}$$

$$\rho \frac{Dv}{Dt} = -\frac{\partial p}{\partial y} + \text{div}(\mu \text{grad}v) + S_{My}$$

$$\rho \frac{Dw}{Dt} = -\frac{\partial p}{\partial z} + \text{div}(\mu \text{grad}w) + S_{Mz}$$

Bibliografia

- [1] Abreu, P. L. “Gás Natural: o combustível do novo milênio”, Porto Alegre 1999, Plural Comunicação.
- [2] Bardina, J., Ferziger, J. H., Reynolds, W. C. “Improved Subgrid Models for Large Eddy Simulation”. AIAA Paper 80-1357.
- [3] Bowman, C. T. et al. in http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/
- [4] Bueno, A. D.; “Programação Orientada a Objeto com C++”. ISBN 85-7522-040-3, Novatec Editora, 2003.
- [5] Chen, J.-Y. “Development of Reduced Mechanisms for Numerical Modeling of Turbulent Combustion”. Workshop on Numerical Aspects of Reduction in Chemical Kinetics (CERMICS-ENPC), Descartes-Champus sur Marne, France, September (1997).
- [6] Chen, J.-Y.; Sung, C. J.; Law, C. K., “An Augmented Reduced Mechanism for Methane Oxidation with Comprehensive Global Parametric Validation” , 27th Symp. (Int.) on Combustion, The Combustion Institute, Pittsburgh, pp. 295-304 (1998).
- [7] Domingo, P., Vervisch, L. and Bray, K. N. C. “Partially Premixed Flamelets in LES of Nonpremixed Turbulent Combustion”. Combust. Theory and Modelling Vol. 6, pp. 1-23 (2002).
- [8] Fletcher, C. A. J. “Computational Techniques for Fluid Dynamics 1. Fundamentals and General Techniques”. Berlin: Springer-Verlag, 1991.
- [9] Forkel, H. “Über die Grobstruktursimulation turbulenter WasserStoff-Diffusionsflammen”, tese de doutoramento [em alemão], TU-Darmstadt, VDI-Verlag, Fortschritt-Berichte, Reihe 6, Nr. 428, Düsseldorf, Alemanha, 1999.

- [10] Forkel, H. and Janicka. J. "Large Eddy Simulation of a Turbulent Hydrogen Diffusion Flame". *Flow Turbulence Combust.* Vol. 65, pp. 163-175 (2000).
- [11] Ferziger, J. H., Peric, M., "Computational Methods for Fluid Dynamics". ISBN 3-540-59434-5 Springer-Verlag, pp 257, 1996.
- [12] Franklach, M. et al. "GRI-Mech - An optimized Detailed Chemical Reaction Mechanism for Methane Combustion", GRI Technical Report No. GRI-95/0058, November 1, 1995.
- [13] Gas Research Institute, <http://www.gri.org/>
- [14] Haddad, W. "Aplicação da técnica de simulação de grandes escalas de turbulência para a validação da eficiência de dutos de exaustão natural de fumaça em edifícios", Dissertação de Mestrado, EPUSP, São Paulo, 2003
- [15] Hinz, A. "Numerische Simulation turbulenter Methan-diffusionsflammen mittels Monte Carlo PDF Methoden". *Fortschritt-Berichte VDI*, Vol. 6 Nr. 433, ISBN 3-18-343306-0, (2000).
- [16] Janicka, J. and Peters, N. "Prediction of Turbulent Jet Diffusion Lift-off using a PDF Transport Equation". *19th Symp. (Int.) on Combustion*, The Combustion Institute, Pittsburgh, pp. 367-374 (1982).
- [17] Jones, W. P. and Launder, B. E. "The Prediction of Laminarization with a Two-Equation Model of Turbulence". *Int. J. Heat Mass Tran.* Vol. 15, pp. 301-314 (1972).
- [18] Jones, W. P. "Turbulence Modeling and Numerical Solution Methods for Variable Density and Combusting Flows" pp. 311-374, Academic Press, 1994.
- [19] Jones, W. P., Bondi, S., Mustata, R., Valiño, L., Jiménez, C. "A Probability Density Function Eulerian Monte Carlo Field Method for Large Eddy Simulations: Application to a Turbulent Piloted Methane/Air Diffusion Flame (Sandia D)" pp. 88-104, *Combustion and Flame*, 2006.
- [20] Homma, R. e Chen, J.-Y. "Reduced Mechanisms for Prediction of NO_2 Formation and Ignition Delay in Methane-Air Combustion". *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, Vol. 123, pp.303-307, April 2001
- [21] Karniadakis, G. E., Kirby II, R. M.; "Parallel Scientific Computing in C++ and MPI". ISBN 0-521-81754-4, Cambridge University Press 2003.

- [22] Kempf, A., Schneider, C., Sadiki, A., and Janicka, J. "Large Eddy Simulation Of A Highly Turbulent Methane Flame: Application to the DLR Standard Flame". *2nd International Symposium on Turbulent Shear Flow Phenomena Vol. 3*, pp. 315-320 (2001).
- [23] Kempf, A., Sadiki, A. and Janicka, J. "Prediction of Finite Chemistry Effects using Large-Eddy Simulation". *Proc. Combust. Inst. Vol. 29* (2002) in press.
- [24] Kempf, A. "Large-Eddy Simulation of Non-Premixed Turbulent Flames". Tese de doutoramento, TU-Darmstadt (2003).
- [25] Krieger, G. "Untersuchung zur Hydroxylradikal-und Stickoxidbildung in turbulenten Wasserstoffdiffusionsflammen mittels Wahrscheinlichkeitsdichte-Methoden". Tese de doutoramento [em alemão], TU-Darmstadt (1997).
- [26] Krieger, G. Noboru, M. "Formação de CO e CO₂ em chamas turbulentas de metano utilizando-se os métodos Eddy Break Up, Eddy Dissipation e PDF com formas pré-assumidas"; anais do 8th Brazilian Congress of Engineering and Thermal Sciences, Porto Alegre, RS; 10/2000.
- [27] Krieger Filho, G., C., "NUMERICAL SIMULATION OF LOCAL EXTINCTION IN A TURBULENT NON-PREMIXED METHANE FLAME"; anais da 7th Intl. Conference Conference on Technologies and Combustion for a Clean Environment, Lisboa, Portugal, 07/2003.
- [28] Krieger Filho, G., C., "A TURBULENT COMBUSTION MODEL BASED ON LARGE SCALE MOTION COUPLED TO PERFECTLY STIRRED REACTOR COMPARED TO A PARTIALLY STIRRED REACTOR"; anais da 18th Intl. Congress of Mechanical Engineering - COBEM, Ouro Preto, MG, November 6-11, 2005.
- [29] Krieger Filho, G. C. - Relatório do Projeto "Simulação Numérica de Combustão em Chamas de Difusão Turbulentas Utilizando-se os Métodos EDC e PDF/ISAT", Fapesp, 2001.
- [30] Kuo, K. K. ; "Principles of Combustion" , John Wiley & Sons, 1986.
- [31] Magnussen, B. F., Hjertager, H., "On Mathematical Modeling of Turbulent Combustion with Special Emphasis on Soot Formation and Combustion". 16th Symp. (Int.) on Combustion, The Combustion Institute, Pittsburgh, pp. 719-729 (1976).

- [32] Magel, H. C., Schnell, U. and Hein, K. R. G. "Simulation of Detailed Chemistry in a Turbulent Combustor Flow". 26th Symp. (Int.) on Combustion, The Combustion Institute, Pittsburgh, pp. 67-74 (1996).
- [33] Maliska, C. R.; "Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional", LTC Ed. 1995.
- [34] F. Maus, D. Keller, N. Peters, "A Lagrangian Simulation of Flamelet Extinction and Re-Ignition in Turbulent Jet Diffusion Flames". 23rd Symp. (Int.) on Combustion, The Combustion Institute, Pittsburgh, pp. 693-698 (1990).
- [35] Numerical Recipes for C++
- [36] Peeters, T.w. et al. , "Comparative experimental and numerical investigation of a piloted turbulent natural-gas diffusion flame", 25th Symp. (Int.) on Combustion, The Combustion Institute, 1994, pp.1241-1248.
- [37] Peters, N. "Laminar diffusion flamelet models in non-premixed turbulent combustion". Prog. Energy Combust. Sci. Vol. 10, pp. 319-339 (1984).
- [38] "Schemes for Convection Discretization".
www.simuserve.com/phoenics/d_polis/d_enc/enc_schm.htm,
18/02/2003.
- [39] Pitsch, H. and Steiner, H. "Large-Eddy Simulation of a Turbulent Piloted Methane/Air Diffusion Flame (Sandia Flame D)". Phys. Fluids Vol. 12, pp. 2541-2554 (2000).
- [40] Pitsch, H. "Improved Pollutant Predictions in Large-Eddy Simulation of Turbulent Nonpremixed Combustion by Considering Scalar Dissipation Fluctuations". Proc. Combust. Inst. Vol. 29 (2002) in press.
- [41] Pope, S.B. "New developments in PDF modelling of nonreactive and reactive turbulent flows". 2nd Int. Symposium on Turbulence, Heat and Mass Transfer. K. Hanjalic, T. W. J. Peters [Ed.], Delft University Press (1997).
- [42] Rangel, L. P. "Gaseous Emission from High Temperature Natural Gas Emission". Tese de doutoramento, Department of Fuel and Energy, University of Leeds (2003).
- [43] Rhie, C. M.; Chow, W. L., "Numerical Study of the turbulent flow past an airfoil with trailing edge separation", AIAA Journal, 21:1525-1532,1983.

- [44] Sanders, J. P. H., Chen, J.-Y. and Gökalp, I. "Flamelet-Based Modeling of NO Formation in Turbulent Hydrogen Jet Diffusion Flames". *Combust. Flame* Vol. 111, pp. 1-15 (1997).
- [45] Schildt, H.; "C++ from the Ground Up". 3rd Edition, MacGraw Hill/Osborne, ISBN 0-07-222897-0, 2003.
- [46] Sheikhi, M. R. H., Drozda, T. G., Givi P. and Pope S. B. "Velocity-Scalar Filtered Density Functions for Large Eddy Simulation of Turbulent Flows". *AIAA J* (2003) submitted.
- [47] Silveira N., A. "Turbulência nos Fluidos Aplicada". Apostila do Curso de Turbulência da Universidade Federal de Uberlândia.
- [48] Spalding., D. B. "Combustion and Mass Transfer", Pergamon, New York, 1979.
- [49] C. J. Sung, C.K. Law, and J.-Y. Chen, "Augmented Reduced Mechanisms for NO Emission in Methane Oxidation", *Combustion & Flame* 125:906-919 (2001).
- [50] Sweby, P. K., *SIAM J. "Numerical Analysis"*,21(5):995-1011(1984).
- [51] Tan, Y. et al. "Natural Gas and Blends Oxidation and Ignition: Experiments and Modeling", 25th Symp. (Int.) on Combustion, The Combustion Institute, Pittsburgh, pp. 1563-1569 (1994).
- [52] Tullis, S. W. and Cant, R. S., "Counter-Gradient Scalar Transport in Large Eddy simulation of Turbulent Premixed Flames". IUTAM Symposium on Turbulent Mixing and Combustion, Kingston, Ontario, Canada, June (2001).
- [53] Tullis, S. W. and Cant, R. S., "Scalar Transport Modelling in Large Eddy Simulation of Turbulent Premixed Flames", 9th International Conference on Numerical Combustion, Sorrento, Italy, April (2002).
- [54] Tullis, S. W. and Cant, R. S., "Scalar Transport Modelling in Large Eddy Simulation of Premixed Turbulent Flames", paper accepted for the 29th Symp. (Int.) on Combustion, The Combustion Institute, Sapporo, Japan, August (2002).
- [55] Turns, S., R., "An Introduction to Combustion - Concepts and Applications", McGrawHill, 1996
- [56] OMG, Object Management Group; "Unified Modeling Language", <http://www.uml.org/>.

- [57] Versteeg, H. K.; Malalasekera, W.; "An introduction to computational Fluid Dynamics - The Finite Volume Method", Longman, 1995.
- [58] Warnatz, J; Maas, U. e Dibble, R. W; "Combustion - Physical and Chemical Fundamentals, Modeling and Simulation, Experiments, Pollutant Formation", Springer, 3rd. Ed., 2000.
- [59] Williams, F. A.; "Combustion Theory", Addison Wesley, 2nd Ed., 1984.
- [60] Williamson, J.; "Low-storage Runge-Kutta Schemes", J. Comp. Phys. 35:pp. 48-56, 1980.
- [61] International Workshop on Measurement and Computation of Nonpremixed Flames, <http://www.ca.sandia.gov/TNF/chemistry.html>
- [62] International Workshop on Measurement and Computation of Nonpremixed Flames, <http://www.ca.sandia.gov/tdf/M3APilot97/FlameD.html>
- [63] Xu, J. and Pope, S. B., PDF "Calculations of Turbulent Nonpremixed Flames with Local Extinction". Combust. Flame Vol. 123, pp. 281-307 (2000).
- [64] Yang, B. and Pope, S.B. "Treating Chemistry in Combustion with Detailed Mechanisms - In Situ Adaptive Tabulation in Principal Directions - Premixed Combustion". Combust. Flame Vol. 112, pp. 85-112 (1998).