



SIMULAÇÃO DE GRANDES ESCALAS DE UMA CHAMA TURBULENTA E RADIANTE DE METANO USANDO O OPENFOAM

Yuri Paixão de Almeida

Projeto Final de Curso

Orientadores

Paulo Laranjeira da Cunha Lage, D.Sc

Luiz Fernando Lopes Rodrigues Silva, D.Sc

Agosto de 2013

SIMULAÇÃO DE GRANDES ESCALAS DE UMA CHAMA TURBULENTA E RADIANTE DE METANO USANDO O OPENFOAM

Yuri Paixão de Almeida

Projeto Final de curso submetido ao Corpo Docente da Escola de Química, como parte dos requisitos necessários à obtenção do grau de Engenheiro Químico.

Aprovado por:

Prof.^a Veronica Maria de Araujo Calado, D.Sc.

Eng. Carlos Eduardo Fontes da Costa e Silva, D.Sc.

Eng. Ricardo Serfaty, D.Sc.

Orientado por:

Prof. Paulo Laranjeira da Cunha Lage, D.Sc.

Prof. Luiz Fernando Lopes Rodrigues Silva, D.Sc.

Rio de Janeiro, RJ – Brasil
Agosto de 2013

Almeida, Yuri Paixão de.

Simulação de grandes escalas de uma chama turbulenta e radiante de metano usando o OpenFOAM/Yuri Paixão de Almeida. - Rio de Janeiro: UFRJ/EQ, 2013.

xi, 111 p.; il.

Projeto Final – Universidade Federal do Rio de Janeiro, Escola de Química, 2013. Orientadores: Paulo Laranjeira da Cunha Lage e Luiz Fernando Lopes Rodrigues Silva.

1. Combustão. 2. Chama. 3. CFD. 4. Projeto Final (Graduação – UFRJ/EQ). 5. Paulo Laranjeira da Cunha Lage, D.Sc. 6. Luiz Fernando Lopes Rodrigues Silva, D.Sc.

AGRADECIMENTOS

A minha família, em especial a minha mãe e minha irmã, por todo o apoio, carinho e amor incondicionais. Ao meu pai que, como engenheiro, estaria honrado neste momento.

Aos meus orientadores Paulo e Luiz Fernando, pela dedicação, conselhos, comprometimento e, principalmente, confiança e fé em meu trabalho. Sem a ajuda de vocês, certamente não seria possível terminar este projeto.

Aos amigos de sempre, Daniel, Diogo, Francisco, Fred, Lucas e Rafael pelas risadas e descontração, inclusive em momentos difíceis.

A todas as amizades adquiridas na UFRJ, em especial Fernanda, Henrique, Lays e Thomaz; aos congressistas Gustavo, Marcelo, Rafael e Terra.

Aos amigos do LTFD, que puderam oferecer além da amizade suporte técnico sem hesitação e com muita boa vontade.

A Velha Guarda, sempre disposta a marcar um happy-hour.

Resumo do Projeto Final de Curso apresentado à Escola de Química como parte dos requisitos necessários para obtenção do grau de Engenheiro Químico.

SIMULAÇÃO DE GRANDES ESCALAS DE UMA CHAMA TURBULENTA E RADIANTE DE METANO USANDO O OPENFOAM

Yuri Paixão de Almeida

Agosto, 2013

Orientadores: Prof. Paulo Laranjeira da Cunha Lage, D.Sc.

Prof. Luiz Fernando Lopes Rodrigues Silva, D.Sc.

O fenômeno de combustão ocorre em muitas aplicações de engenharia, como projeto de equipamentos e estudos de segurança. Neste contexto, a fluidodinâmica computacional (CFD) aplicada à simulação numérica de chamas surge como um campo promissor que crescentemente aumenta o entendimento da combustão. Dados experimentais retirados da literatura para uma chama difusiva de metano estabelecida com diâmetro do bocal do queimador de 7,1 cm e vazão mássica de 84,3 mg/s e reagindo com o ar em ambiente aberto foi utilizada para validação do modelo CFD. Simulações foram realizadas com o uso do FireFOAM, um *solver* de escoamento compressível para simulação de chamas implementado no pacote computacional de código aberto OpenFOAM. O modelo de dissipação de vórtices (EDM) para a reação entre metano e ar foi empregado. A produção de fuligem foi negligenciada. A conservação de espécies químicas foi modelada através de uma equação de transporte para cada espécie. O transporte de calor por radiação térmica foi calculado empregando o método das ordenadas discretas baseado em volumes finitos (FVDOM) utilizando o coeficiente de absorção médio de Planck. A simulação de grandes escalas (LES) foi usada na modelagem de turbulência. A convergência de malha foi verificada. Por fim, os perfis simulados de velocidade e fração de mistura apresentaram boa concordância quando comparados com os dados disponíveis na literatura.

Sumário

1	Introdução	1
1.1	Motivação e Objetivo	2
1.2	Estrutura do texto	4
2	Revisão Bibliográfica	5
2.1	Equações Governantes	5
2.1.1	Equação da Continuidade	6
2.1.2	Equação do <i>Momentum</i>	6
2.1.3	Equação de Conservação de Espécies	7
2.1.4	Equação da Energia	10
2.1.5	Propriedades Termofísicas	12
2.2	Radiação Térmica	17
2.2.1	Intensidade de Radiação Térmica	18
2.2.2	Irradiância	19
2.2.3	Poder Emissivo de um Corpo Negro	19
2.2.4	Radiação Térmica em Meios Participantes	21
2.2.5	Termo Fonte no Balanço de Energia Global	23
3	Fluidodinâmica Computacional	25
3.1	Método dos Volumes Finitos	25
3.1.1	Malhas	27
3.1.2	Resolução de Sistemas de Equações Algébricas	28
3.1.3	Acoplamento Pressão-Velocidade	29
3.2	Turbulência	32

3.2.1	Simulação de Grandes Escalas (LES)	33
3.2.2	Viscosidade Turbulenta	39
3.2.3	Modelo de Viscosidade Turbulenta a Uma Equação	40
3.2.4	Modelo Reacional de Dissipação de Vórtices	41
3.3	Cálculo da Radiação Térmica	42
3.3.1	Método das Ordenadas Discretas baseado em Volumes Finitos	43
3.3.2	Modelos de Absorção e Emissão	47
3.3.3	Coefficiente de Absorção Médio de Planck	48
4	Metodologia	52
4.1	OpenFOAM	52
4.1.1	Interface C++	53
4.1.2	Algoritmo FireFOAM	55
4.2	Estudo de Caso	58
4.2.1	Experimento Analisado	58
4.3	Configuração das Simulações	59
4.3.1	Condições de Contorno e Iniciais	60
4.3.2	Descrição das Malhas	61
4.4	Cálculo das Médias Temporais	64
5	Resultados	68
5.1	Definição dos Parâmetros t_0 e Δt	68
5.2	Convergência Temporal das Simulações	73
5.3	Convergência de Malha e Discretizações Angulares	78
5.4	Simetria Axial	83
5.5	Validação do FireFOAM	85
5.5.1	Comparação Experimental	85
5.5.2	Perfis de Escoamento	92
5.5.3	Perfis de Temperatura	95
5.5.4	Perfis de Vorticidade	97
5.5.5	Taxa de Liberação de Calor - HRR	99
5.5.6	Coefficiente de Absorção Médio de Planck	100

6 Conclusões	102
6.1 Sugestões para Trabalhos Futuros	103
Referências Bibliográficas	104

Lista de Figuras

2.1	Fração de mistura em relação à fração mássica das espécies para uma queima de metano com ar com taxa infinita de reação - adaptado de Zeng e Chow [1].	10
2.2	Espectro da radiação eletromagnética - adaptado de Yeoh e Yuen [2].	18
2.3	Variáveis utilizadas na definição da intensidade radiativa - retirado de Mangani [3].	18
3.1	Volume de controle para discretização - retirado de Rusche [4].	26
3.2	Exemplos de malha estruturada ortogonal (esquerda) e não ortogonal (direita) - retirado de Schäfer [5].	28
3.3	Exemplo de malha não-estruturada - retirado de Schäfer [5].	28
3.4	Espectro de energia cinética turbulenta, em que f_c é a frequência de corte - adaptado de Versteeg e Malalasekera [6].	35
3.5	Sistema de coordenadas para discretização angular - adaptado de Mishra e Roy [7].	45
3.6	Dependência do Coeficiente Médio de Planck (determinados usando o RAD-CAL) para as espécies CO_2 , H_2O , CH_4 e CO com a temperatura - adaptado de Barlow <i>et al.</i> [8].	50
4.1	Visão geral da estrutura do OpenFOAM - retirado de [9].	53
4.2	Geometria utilizada nas simulações, onde D é o diâmetro do domínio, d é o diâmetro do bocal do queimador e H é altura do domínio.	61
4.3	Vista isométrica da malha M1.	63
4.4	Região central da malha M1, vista inferior.	63

4.5	Região da malha M1 externa ao bocal, vista inferior, em que RC é a região central apresentada na Figura 4.4.	64
4.6	Corte transversal X-Z, apresentando a malha M1 até $Z = 0,12$ m.	64
4.7	Pontos de amostragem no domínio. Figura fora de escala para facilitar a visualização. Em (a) $h = 10$ cm, (b) $h = 5$ cm, (c) $h = 1$ cm e (d) $h = 0,5$ cm.	66
5.1	Fração de Mistura Média $\langle F_t \rangle$ em $h=10$ cm, obtida na malha M1.	69
5.2	Fração de Mistura Média $\langle F_t \rangle$ em $h=10$ cm, obtida na malha M4.	70
5.3	Temperatura Média $\langle T \rangle$ (K) em $h=10$ cm, obtida na malha M1.	70
5.4	Temperatura Média $\langle T \rangle$ (K) em $h=10$ cm, obtida na malha M4.	71
5.5	Velocidade Radial Média $\langle U_y \rangle$ (m/s) em $h=10$ cm, obtida na malha M1.	71
5.6	Velocidade Radial Média $\langle U_y \rangle$ (m/s) em $h=10$ cm, obtida na malha M4.	72
5.7	Velocidade Axial Média $\langle U_z \rangle$ (m/s) em $h=10$ cm, obtida na malha M1.	72
5.8	Velocidade Axial Média $\langle U_z \rangle$ (m/s) em $h=10$ cm, obtida na malha M4.	73
5.9	Fração de Mistura Média $\langle F_t \rangle$ em $h=10$ cm, obtida na malha M1.	74
5.10	Fração de Mistura Média $\langle F_t \rangle$ em $h=10$ cm, obtida na malha M4.	74
5.11	Temperatura Média $\langle T \rangle$ (K) em $h=10$ cm, obtida na malha M1.	75
5.12	Temperatura Média $\langle T \rangle$ (K) em $h=10$ cm, obtida na malha M4.	75
5.13	Velocidade Radial Média $\langle U_y \rangle$ (m/s) em $h=10$ cm, obtida na malha M1.	76
5.14	Velocidade Radial Média $\langle U_y \rangle$ (m/s) em $h=10$ cm, obtida na malha M4.	76
5.15	Velocidade Axial Média $\langle U_z \rangle$ (m/s) em $h=10$ cm, obtida na malha M1.	77
5.16	Velocidade Axial Média $\langle U_z \rangle$ (m/s) em $h=10$ cm, obtida na malha M4.	77
5.17	Temperatura Média $\langle T \rangle$ (K) em $h=10$ cm.	80
5.18	Velocidade Radial Média $\langle U_y \rangle$ (m/s) em $h=5$ cm.	80
5.19	Velocidade Axial Média $\langle U_z \rangle$ (m/s) em $h=1$ cm.	81
5.20	Fração de Mistura Média $\langle F_t \rangle$ em $h=0,5$ cm.	81
5.21	Temperatura Média $\langle T \rangle$ (K) em $h=10$ cm, obtida na malha M1.	82
5.22	Temperatura Média $\langle T \rangle$ (K) em $h=0,5$ cm, obtida na malha M1.	82
5.23	Velocidade Radial Média $\langle U_y \rangle$ (m/s) em $h=10$ cm, obtida na malha M1.	83
5.24	Velocidade Axial Média $\langle U_z \rangle$ (m/s) em $h=0,5$ cm, obtida na malha M1.	83

5.25 Componentes horizontais médios da velocidade média (m/s) em h=10 cm, obtidas na malha M4.	84
5.26 Componentes horizontais médios da velocidade média (m/s) em h=5 cm, obtidas na malha M4.	84
5.27 Validação - Fração de Mistura Média $\langle F_t \rangle$ em h=10 cm.	85
5.28 Validação - Fração de Mistura Média $\langle F_t \rangle$ em h=5 cm.	86
5.29 Validação - Fração de Mistura Média $\langle F_t \rangle$ em h=1 cm.	86
5.30 Validação - Fração de Mistura Média $\langle F_t \rangle$ em h=0,5 cm.	87
5.31 Validação - Velocidade Radial Média $\langle U_y \rangle$ (m/s) em h=5 cm.	88
5.32 Validação - Velocidade Radial Média $\langle U_y \rangle$ (m/s) em h=4 cm.	88
5.33 Validação - Velocidade Radial Média $\langle U_y \rangle$ (m/s) em h=3 cm.	89
5.34 Validação - Velocidade Radial Média $\langle U_y \rangle$ (m/s) em h=2 cm.	89
5.35 Validação - Velocidade Axial Média $\langle U_z \rangle$ (m/s) em h=6 cm.	90
5.36 Validação - Velocidade Axial Média $\langle U_z \rangle$ (m/s) em h=5 cm.	90
5.37 Validação - Velocidade Axial Média $\langle U_z \rangle$ (m/s) em h=4 cm.	91
5.38 Validação - Velocidade Axial Média $\langle U_z \rangle$ (m/s) em h=3 cm.	91
5.39 Campo vetorial de velocidade média $\langle U \rangle$ (m/s) - Corte transversal Y-Z. . .	93
5.40 Campo vetorial de velocidade instantânea U (m/s) - Corte transversal Y-Z em t=10 s.	94
5.41 Velocidade média $\langle U \rangle$ (m/s) na linha de centro da chama.	95
5.42 Temperatura Média $\langle T \rangle$ (K) em h=10 cm.	96
5.43 Temperatura Média $\langle T \rangle$ (K) em h=0,5 cm.	96
5.44 Fotografia da chama - Retirado de Zhou e Gore [10]	97
5.45 Perfil de Temperatura Instantânea T (K) em 6,9 s.	97
5.46 Campo vetorial de vorticidade média $\langle W \rangle$ (1/s) em h=5 cm.	98
5.47 Vorticidade média $\langle W \rangle$ (1/s) em h=5.	99
5.48 Taxa de Liberação de Calor HRR (W) em 10 segundos de simulação. . . .	100
5.49 Coeficiente de absorção κ_p em $t = 10$ s.	101

Lista de Tabelas

2.1	Constantes utilizadas no Modelo de Sutherland	13
2.2	Coefficientes interpolados da tabela NIST-JANAF para O_2	15
2.3	Coefficientes interpolados da tabela NIST-JANAF para H_2O	15
2.4	Coefficientes interpolados da tabela NIST-JANAF para CH_4	16
2.5	Coefficientes interpolados da tabela NIST-JANAF para CO_2	16
2.6	Coefficientes interpolados da tabela NIST-JANAF para N_2	16
3.1	Coefficientes dos polinômios de κ_p para H_2O e CO_2	51
3.2	Coefficientes do polinômio de κ_p para CH_4	51
4.1	Índices de Qualidade das Malhas	62
4.2	Número de elementos na região a jusante do queimador.	62
5.1	Tempo aproximado de processamento computacional para simular 10 s . .	69
5.2	Análise quantitativa da convergência de malha para $\langle T \rangle$ (K) em h=10 cm .	78
5.3	Análise quantitativa da convergência de malha para $\langle U_y \rangle$ (m/s) em h=5 cm	79
5.4	Análise quantitativa da convergência de malha para $\langle U_z \rangle$ (m/s) em h=1 cm	79
5.5	Análise quantitativa da convergência de malha para $\langle F_t \rangle$ em h=0,5 cm . .	79

Capítulo 1

Introdução

Apesar da constante busca por combustíveis renováveis, os combustíveis fósseis detêm posição de destaque como matéria-prima para geração de energia, principalmente com o aumento das reservas de petróleo em virtude de novas tecnologias para exploração. A geração de energia elétrica a partir de seus derivados ocorre por meio da queima desses combustíveis em caldeiras, turbinas e motores de combustão interna. A demanda por processos de combustão melhores e mais eficientes é uma tendência mundial, na medida em que aumenta o número de países adotando políticas mais rigorosas que objetivam reduzir a emissão de CO_2 , CO e NO_x . No contexto de projeto de equipamentos, um entendimento adequado dos fenômenos envolvendo trocas térmicas com radiação térmica é de crucial interesse para redução de custos por meio do menor consumo possível de combustível.

O petróleo, por ser um fluido altamente inflamável, em todas as suas etapas de pré-processamento, refino e transporte, apresenta alto risco para as instalações industriais e conseqüentemente para os seus operadores. A engenharia de segurança busca reduzir os riscos associados a estes processos, e a modelagem correta da combustão passa a ser essencial na obtenção de dados confiáveis para determinação da carga térmica dimensionante de acidente (*Dimensional Accidental Load - DAL*), elaboração de proteção passiva e robustez mecânica adequada para os equipamentos industriais, e concepção de rotas de

fugas a partir do estudo de propagação da fumaça advinda do incêndio.

Conclui-se que a análise apropriada do fenômeno de combustão tem aplicação central em diversas áreas da engenharia. Devido à complexidade de sua modelagem, normalmente opta-se pelo desenvolvimento de correlações matemáticas através de dados experimentais para realizá-la. Porém, para casos específicos em que não há validação dessas correlações, sua confiabilidade é reduzida, e a realização de experimentos por sua vez é dificultada, devido ao alto custo do aparato experimental para coletar dados confiáveis.

A fluidodinâmica computacional (*Computational Fluid Dynamics - CFD*) surge como alternativa a tais modelos, uma vez que as equações de conservação resolvidas possuem forte embasamento físico e suporte experimental. Nesta conjuntura, o estudo de modelagem de combustão a partir das equações de conservação de massa, *momentum* e energia cresce em importância, na medida em que a capacidade computacional, anteriormente um fator limitante, tem aumentado drasticamente nos últimos anos. Revisões sobre as técnicas e principais desafios tem sido apresentados, como em Veynante e Vervisch [11], e McGrattan [12], no entanto, resultados consistentes ainda são escassos.

1.1 Motivação e Objetivo

Atualmente, muitos códigos comerciais, como CFX® [13] e Fluent® [14], ambos da ANSYS, Kameleon FireEx KFX® [15], desenvolvido pela ComputIT, e Phoenix® [16], desenvolvido pela CHAM, se propõem a resolver problemas de combustão e de simulação de chamas. Porém, estes códigos apresentam a desvantagem de funcionar como “caixa-preta”, além do alto custo de licenciamento. Especialmente em casos nos quais os valores calculados não concordam com os dados experimentais, é essencial entender as hipóteses empregadas na resolução numérica. Porém, esta informação é usualmente disponível de maneira simplória no manual do usuário, e, logicamente, o código fonte é inacessível.

Muitos pacotes de CFD com código livre são desenvolvidos para tratar de combustão. A maioria destes códigos, no entanto, possuem pouca generalização e só podem ser apli-

cados para os casos específicos em que foram concebidos. O *Fire Dynamics Simulator* [17], desenvolvido pela Sandia, é atualmente o principal programa de código livre feito para modelagem de chama, e onde se concentram grande parte dos trabalhos disponíveis na literatura [18, 19, 20, 21]. Sua desvantagem reside no fato de que, por ser um código específico para chama, possui poucos métodos implementados, possuindo modelos numéricos únicos de turbulência, radiação térmica e combustão, apresentando pouca flexibilidade dentro desses modelos. Além disso, tem forte limitação no tratamento de geometrias complexas, já que só há suporte a malhas estruturadas e ortogonais.

Neste contexto, o OpenFOAM [9] surge como excelente opção de *software* de código aberto. Trata-se de um pacote de CFD escrito em C++, linguagem de programação orientada a objetos que permite o desenvolvimento de novos modelos com probabilidade reduzida de *bugs* e por consequência com menor tempo de depuração. O OpenFOAM tem sido amplamente desenvolvido pela comunidade acadêmica, dispondo ao usuário uma ampla faixa de opções para métodos de discretização, resolução de sistemas lineares, e *solvers*. Além disso, possui alta flexibilidade no emprego de malhas, permitindo o uso tanto de estruturadas quanto não-estruturadas, e é facilmente empregado em processamento paralelo. Em especial, o *solver* FireFOAM, um código do pacote OpenFOAM desenvolvido pela FM Global®, reúne as características necessárias para a simulação de chamas.

Porém, simulações deste tipo são de alto grau de dificuldade, devido ao forte acoplamento entre a química, a turbulência e a radiação térmica, sendo necessário um estudo aprofundado para compreendê-las. Portanto, uma das principais motivações é a documentação e revisão das técnicas empregadas neste *solver*. Por fim, são raros os resultados de validação para uso do código FireFOAM expostos na literatura, e, a fim de verificar sua confiabilidade, neste trabalho foi feito um estudo de validação comparando resultados simulados para uma chama não pré-misturada, turbulenta e radiante de metano com dados experimentais disponíveis na literatura.

1.2 Estrutura do texto

Este trabalho visa apresentar assuntos como fenômenos de transporte, turbulência e radiação térmica, porém, sempre com o foco em torno do tema principal, a combustão. Após a revisão teórica das equações e métodos numéricos na modelagem da chama, o estudo de validação das técnicas empregadas é demonstrado. Ao final do texto, as principais conclusões e sugestões para trabalhos futuros são discorridas.

No Capítulo 2 é feita a revisão bibliográfica das equações de transporte e da radiação térmica em meio participante, etapa crucial para entendimento da combustão.

A partir do conhecimento adquirido, o Capítulo 3 descreve as abordagens numéricas de CFD para tratar o sistema de equações obtido. São apresentados os principais aspectos de turbulência e sua necessidade de modelagem, assim como os principais métodos já desenvolvidos para se obter modelos de emissão e absorção de energia radiante confiáveis.

O Capítulo 4 descreve o pacote OpenFOAM e o algoritmo FireFOAM, empregado nas simulações. A metodologia utilizada para validação do algoritmo é descrita, assim como as características do experimento escolhido na literatura que gerou os dados para comparação.

O Capítulo 5 reúne os principais resultados obtidos das simulações assim como a discussão deles e, por fim, no Capítulo 6 é feita a avaliação da validade destes resultados e são apresentadas sugestões para trabalhos futuros com o intuito de aprimoramento da modelagem.

Capítulo 2

Revisão Bibliográfica

Neste capítulo são descritos quais equações, hipóteses e simplificações foram assumidas para tratar o problema em questão, tendo como objetivo estabelecer as equações governantes básicas e apresentar modelos de cálculo de propriedades termofísicas presentes nestas equações. Os principais aspectos da influência da radiação térmica na combustão e seu conseqüente equacionamento também são revistos.

2.1 Equações Governantes

Para descrever o comportamento físico do escoamento, é utilizada a abordagem clássica de mecânica dos fluidos, adotando a hipótese do meio como contínuo, hipótese válida desde que a menor dimensão característica do problema não seja da mesma ordem de grandeza do livre caminho médio das moléculas do fluido. Desta forma, as variáveis empregadas serão funções contínuas do tempo e do espaço, tornando possível descrever o escoamento de forma Euleriana, que foca na análise do fluido em localizações específicas no espaço [22].

2.1.1 Equação da Continuidade

A obtenção da equação de conservação de massa, ou equação da continuidade, envolve o balanço de massa em volume de controle infinitesimal. Considerando a massa específica como variável no volume de controle, a equação de balanço global de massa resultante é a seguinte:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (2.1)$$

em que ρ é a massa específica, \mathbf{u} é o vetor velocidade e $\nabla \cdot$ é o operador divergente. A massa específica, ρ , é função da temperatura, da pressão, e da composição local da mistura, sendo dada por uma equação de estado tal como a lei dos gases ideais, apresentada na Seção 2.1.5.

2.1.2 Equação do *Momentum*

A equação de conservação do *momentum* é deduzida tomando como base a segunda lei de Newton. Utilizando o conceito de volume de controle infinitesimal, o transporte de *momentum* resulta na seguinte equação:

$$\frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) = \nabla \cdot (\boldsymbol{\tau}) + \rho \mathbf{g} \quad (2.2)$$

em que $\boldsymbol{\tau}$ é o tensor tensão e \mathbf{g} é o vetor que representa a força gravitacional. Para fluidos newtonianos, $\boldsymbol{\tau}$ é definido como:

$$\boldsymbol{\tau} = -p \mathbf{I} + 2\mu \left[\frac{1}{2} \left(\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T \right) \right] + \lambda (\nabla \cdot \mathbf{u}) \mathbf{I} \quad (2.3)$$

em que p é pressão termodinâmica, \mathbf{I} representa o tensor identidade, μ é a viscosidade dinâmica, que para gases pode ser calculada de diversas formas, como exposto na Seção 2.1.5, e λ é o segundo coeficiente de viscosidade. O tensor $\frac{1}{2} \left(\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T \right)$ tem o nome de tensor taxa de deformação \mathbf{S} , e representa a parte simétrica do tensor $\nabla \mathbf{u}$. Esta modelagem de $\boldsymbol{\tau}$ pode ser verificada em Maliska [23], Fox *et al.* [24] e Bird *et al.* [25]. A hipótese de Stokes relaciona linearmente λ e μ , admitindo a seguinte expressão:

$$\lambda = -\frac{2}{3}\mu \quad (2.4)$$

Desta forma, a equação final para o tensor tensão para fluidos newtonianos é:

$$\boldsymbol{\tau} = -p\mathbf{I} + \mu \left[\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \mathbf{u}) \mathbf{I} \right] \quad (2.5)$$

Logo, a equação do *momentum* pode ser escrita na seguinte forma para escoamentos compressíveis e newtonianos:

$$\frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) = -\nabla p + \nabla \cdot \left[\mu \left(\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \mathbf{u}) \mathbf{I} \right) \right] + \rho \mathbf{g} \quad (2.6)$$

De acordo com Ferziger e Peric [26], é conveniente alterar o termo de pressão a ser resolvido para que já compute a pressão hidrostática $\rho \mathbf{g} \cdot \mathbf{x}$, onde \mathbf{x} é o vetor posição em relação a um referencial inercial, alcançando maior eficiência numérica. Sendo assim, a variável a ser resolvida passa a ser a pressão dinâmica $p_d = p - \rho \mathbf{g} \cdot \mathbf{x}$, e após a aplicação do operador gradiente é obtida a equação final da conservação de *momentum*:

$$\frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) = -\nabla p_d - (\mathbf{g} \cdot \mathbf{x}) \nabla \rho + \nabla \cdot \left[\mu \left(\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \mathbf{u}) \mathbf{I} \right) \right] \quad (2.7)$$

2.1.3 Equação de Conservação de Espécies

A equação para o balanço de massa por espécie é demonstrada em seguida, com a dedução apresentada em Yeoh e Yuen [2] considerando a Lei de Fick [27] para o termo difusivo:

$$\frac{\partial \rho Y_i}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} Y_i) = \nabla \cdot (\rho D \nabla Y_i) + \omega_i \quad (2.8)$$

em que o parâmetro D é o coeficiente de difusividade mássica, Y_i é a fração mássica de cada espécie e o termo fonte ω_i representa a taxa mássica de formação do componente i por unidade de volume. A utilização de um coeficiente de difusividade mássica diferente para cada espécie é normalmente negligenciada em escoamentos turbulentos, sendo usualmente empregado o coeficiente global de difusividade turbulenta, D . A taxa de reação, ω_i , em problemas turbulentos exerce importante papel e necessita de modelagem especial.

Yeoh e Yuen [2] ilustram diferentes metodologias para modelar a taxa de reação, ω_i , dividindo em duas categorias principais: modelos de taxa finita e modelos de química

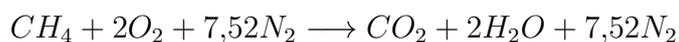
infinitamente rápida. O número de Damkohler, D_a , é um importante adimensional que surge para auxiliar na escolha do modelo mais adequado, definido como:

$$D_a = \frac{\tau_s}{\tau_k} = \frac{\text{Escala de tempo da mistura turbulenta}}{\text{Escala de tempo da química da combustão}} \quad (2.9)$$

Desta maneira, para $D_a \ll 1$, a escala de tempo da mistura é muito pequena em relação à química da reação. Logo, neste caso a mistura dos componentes não é a etapa limitante e os modelos reacionais devem seguir a modelagem de taxa finita. Nestes casos, para descrever a taxa de reação química normalmente é utilizado o modelo de Arrhenius, considerando a reação em apenas uma etapa reacional de segunda ordem. No caso das chamas difusivas, $D_a \gg 1$, ou seja, a escala de tempo químico é muito menor que a escala de tempo da mistura, sendo usualmente considerado uma reação infinitamente rápida, limitada apenas pela capacidade de mistura dos reagentes.

Existem várias abordagens para modelar a taxa de reação infinitamente rápida, usualmente considerando-a como função de parâmetros turbulentos. Howard e Toporov [28], Veynante e Vervisch [11] e Versteeg e Malalasekera [6] apresentam os modelos tanto para abordagem RANS quanto para abordagem LES. O modelo empregado neste trabalho é o modelo de dissipação de vórtices, definindo a taxa de reação como função da energia cinética turbulenta e da dissipação da energia cinética turbulenta, além da concentração local de reagentes. Como a descrição deste modelo envolve discussão sobre as diferentes categorias de modelos de turbulência, o cálculo de ω_i é apresentado apenas na Seção 3.2.

É válido ressaltar que existem modelos de combustão que envolvem mais de uma etapa reacional que buscam modelar a presença de íons ou fuligem. Panjwani *et al.* [29] utilizaram modelos com uma e com três etapas reacionais. Mossi [30], no estudo de radiação térmica em chamas laminares, utilizou um modelo com cinco reações, buscando uma refinada modelagem química, considerando moléculas como CO e OH , sendo possível definir a produção de fuligem e o envelope de chama. No presente trabalho, um modelo com apenas uma reação foi considerado para a combustão de metano com o ar em uma chama não pré-misturada:



O sistema considerado possui cinco espécies, CH_4 , O_2 , CO_2 , H_2O e N_2 . No entanto, apenas quatro equações de transporte de espécies são necessárias, já que a quinta espécie, N_2 , é calculada de maneira que o somatório das frações mássicas resulte em valor unitário:

$$\sum_{i=1}^5 Y_i = 1 \quad (2.10)$$

Esta foi a modelagem usada no presente trabalho. No entanto, existem outros modelos que buscam simplificar esta etapa. Reduzindo o número de equações, como no caso do modelo de fração de mistura, resolve-se uma única equação de transporte para uma propriedade escalar chamada de “fração de mistura”. A partir da hipótese de reação infinitamente rápida e em uma única etapa, é possível descrever as concentrações das espécies a partir desta propriedade escalar. Apesar deste modelo não ter sido empregado nas simulações, ele foi utilizado neste trabalho para comparação com resultados experimentais da literatura, já que os dados de concentração são fornecidos para a fração de mistura, que é definida como:

$$F_t = \frac{sY_{fu} - Y_{ox} + Y_{ox}^\infty}{sY_{fu}^f + Y_{ox}^\infty} \quad (2.11)$$

em que Y_{ox}^∞ é a fração de oxigênio no ar, Y_{fu}^f é a fração de combustível inserida na corrente de combustível e s é a razão estequiométrica mássica de O_2/CH_4 da reação de combustão de metano, que possui valor de aproximadamente 4. A idealização deste modelo é apresentada na Figura 2.1, onde a taxa de reação é infinita. Desta forma, para uma corrente pura de CH_4 queimando em ar, quando a fração de mistura possui o valor de 0,055187, a mistura estará em proporções estequiométricas e não haverá presença de espécies reagentes. Na Figura 2.1, a chama não possui zona de reação (combustível e oxidante coexistindo) pois sua cinética química é infinita. No entanto, na modelagem proposta ambos combustível e oxidante irão coexistir pois a taxa de reação é finita e dependerá de parâmetros turbulentos.

Outro modelo bastante empregado é o da função densidade de probabilidade (*Probability Density Function - PDF*), que se baseia no mesmo princípio da fração de mistura, porém buscando descrever estatisticamente as concentrações das espécies. Não é a intenção deste trabalho abordar estes modelos, e detalhes podem ser consultados em Versteeg e Malalasekera [6] e Yeoh e Yuen [2].

Na Equação 2.8 é preciso ainda calcular o coeficiente de difusividade mássica, D . Metodologias de cálculo são apresentadas na Subsecção 2.1.5.

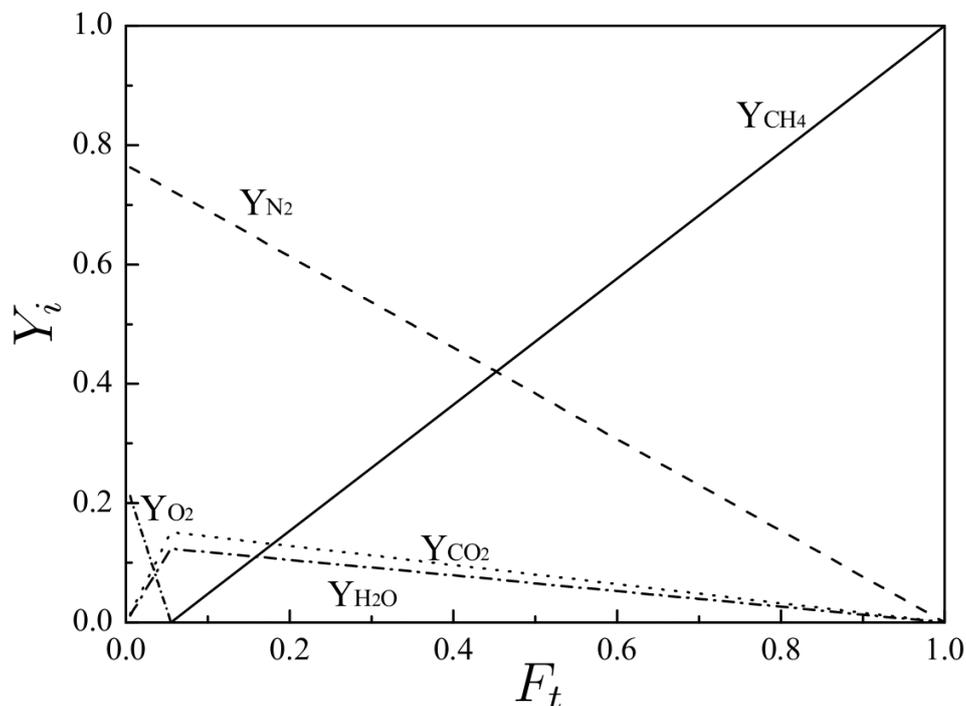


Figura 2.1: Fração de mistura em relação à fração mássica das espécies para uma queima de metano com ar com taxa infinita de reação - adaptado de Zeng e Chow [1].

2.1.4 Equação da Energia

Baseando-se na primeira lei da termodinâmica, a equação da energia pode ser escrita em termos da propriedade termodinâmica entalpia, H , que possui a seguinte definição:

$$H = U + \frac{p}{\rho} \quad (2.12)$$

em que U é a energia interna do sistema. A dedução da equação da conservação da entalpia é demonstrada em Bird *et al.* [25] e Hauke [31]. Ao fim da dedução, obtém-se a seguinte equação:

$$\frac{\partial \rho H}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} H) = \frac{Dp}{Dt} + \nabla \cdot \left(\frac{\gamma}{C_P} \nabla H \right) + \dot{q} - \nabla \cdot \mathbf{q}_R \quad (2.13)$$

em que \dot{q} é o termo fonte de entalpia, e $-\nabla \cdot \mathbf{q}_R$ é a fonte de calor radiante, a ser discutido na Seção 2.2. A entalpia total também é definida como a soma entre entalpia sensível e entalpia química. A Equação 2.13 apresenta equação de conservação da energia em termos da entalpia total, no entanto, é convenientemente resolve-se apenas para a entalpia sensível, o que permite maior flexibilidade ao código numérico [32]. Define-se a entalpia sensível como:

$$h_s = \int_{T_{REF}}^T C_P dT = H - h_c \quad (2.14)$$

em que C_P é a capacidade calorífica a pressão constante, e a h_c é a entalpia química. Para encontrar a temperatura a partir da entalpia sensível, é necessário uma relação entre as duas propriedades. Na Seção 2.1.5 é demonstrada esta relação através de polinômios de quinto grau. Ainda considerando que o termo γ/C_P possa ser escrito como $\rho\alpha$, podendo ser calculado com a Equação 2.18, a equação de conservação de entalpia sensível tem a forma:

$$\frac{\partial \rho h_s}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} h_s) = \frac{Dp}{Dt} + \nabla \cdot (\rho \alpha \nabla h_s) + q_c - \nabla \cdot \mathbf{q}_R \quad (2.15)$$

Nota-se que o termo fonte de entalpia \dot{q} na equação da entalpia sensível tem o valor de q_c , calor gerado na combustão. Caso fosse utilizada a variável entalpia total H (entalpia química + entalpia sensível) na equação da energia, não haveria a presença de termo fonte q_c , já que o termo calor de reação já estaria incorporado no fluxo de entalpia por condução ∇H , que transportaria ambas as entalpias química e sensível [17]. O cálculo de q_c pode ser facilmente realizado através de:

$$q_c = \Delta H_c^\circ \omega_{fu} \quad (2.16)$$

em que ω_{fu} é a taxa mássica de reação da substância combustível, no caso CH_4 , e ΔH_c° é o calor de combustão por unidade de massa do combustível, que no caso do metano tem o valor de $-50144 \text{ kJ/kg}CH_4$ segundo Rogers e Mayhew [33]. Este valor também é conhecido como o poder calorífico inferior do metano.

Na Equação 2.15 o termo dissipação viscosa foi negligenciado, simplificação normalmente adotada em problemas de combustão a baixos números de Mach. De acordo com Versteeg e Malalasekera [6], o transporte de entalpia por difusão de espécies também não é levado em consideração quando é assumido um único coeficiente de difusão para todas

as espécies e número de Lewis unitário. Além disso, em escoamentos turbulentos este termo é desprezível.

As Equações de continuidade, 2.1, conservação de *momentum*, 2.7, conservação de espécies, 2.8, e conservação de energia, 2.15, descrevem a física do problema da combustão. No entanto, ainda é preciso modelar os termos representativos da radiação térmica na equação da energia ($-\nabla \cdot \mathbf{q}_R$) e reação na equação de transporte de espécies (ω_i) para o fechamento do sistema de equações diferenciais parciais, além das propriedades termofísicas, descritas na próxima seção.

2.1.5 Propriedades Termofísicas

Para se efetuar cálculos de combustão, o conhecimento sobre como a massa específica varia com a pressão e a temperatura é essencial. A lei dos gases ideais deriva da teoria cinética dos gases e considera que não existem forças entre as moléculas e todas as colisões são elásticas [34]. Baukal e Schwartz [35] ainda apresentam a correção de compressibilidade aplicada à lei dos gases ideais para corrigir possíveis desvios, além da Equação de Redlich-Kwong. Em virtude de sua simplicidade numérica, o modelo mais empregado, sendo inclusive utilizado neste trabalho é dos gases ideais, descrito como:

$$\rho = \left[\sum_{i=1}^N \frac{Y_i}{M_i} \right]^{-1} \frac{p}{RT} \quad (2.17)$$

em que $R = 8,314 \text{ kJ}/(\text{kmolK})$ é a constante universal dos gases, M_i é a massa molecular da espécie i , p é pressão termodinâmica, T é a temperatura e N é o número total de espécies.

Para chamas de metano, de acordo com Aspdén *et al.* [36], o número de Lewis ($Le = \alpha/D$) possui valor muito próximo a unidade, inclusive para escoamentos turbulentos. Neste caso, a difusividade mássica é essencialmente igual à difusividade térmica e $\alpha = D$. Desta forma, para a obtenção do coeficiente de difusividade mássica calcula-se apenas o

coeficiente de difusividade térmica, que possui definição:

$$\alpha = \frac{\gamma}{\rho C_P} \quad (2.18)$$

em que γ é a condutividade térmica e C_P é a capacidade calorífica à pressão constante.

O modelo de cálculo da condutividade térmica, γ , utilizado é o modelo modificado de Eucken, com dedução exposta em Poling *et al.* [37]. Este modelo representa a condutividade térmica, γ , como função da viscosidade dinâmica e da capacidade calorífica a volume constante e possui a seguinte formulação:

$$\gamma = \mu \widetilde{C}_V \left(1, 32 + \frac{1, 77}{\widetilde{C}_V/R} \right) \quad (2.19)$$

em que \widetilde{C}_V é a capacidade calorífica molar a volume constante, obtida pela relação $\widetilde{C}_V = \widetilde{C}_P - R$, e μ é a viscosidade dinâmica da mistura. Assim, \widetilde{C}_P e μ precisam ser estimados. Existem diversos modelos para o cálculo da viscosidade dinâmica para gases, μ , entre eles o método de Chapman-Enskog, o método de Chung *et al.*, o método de Reichenberg, o método de Wilke entre outros, apresentados em Poling *et al.* [37]. Para relacionar a viscosidade com a temperatura de uma mistura gasosa usualmente é empregada a lei da viscosidade de Sutherland, uma escolha padrão do OpenFOAM, definida como [9]:

$$\mu = \frac{A_s \sqrt{T}}{1 + T_s/T} \quad (2.20)$$

em que A_s é o coeficiente de Sutherland e T_s é a temperatura de Sutherland. Na Tabela 2.1 são demonstrados seus valores para o problema em questão:

Tabela 2.1: Constantes utilizadas no Modelo de Sutherland

<i>Constante</i>	<i>Valor</i>	<i>Unidade</i>
A_s	$1, 67212 \times 10^{-6}$	$kg/(m s K^{1/2})$
T_s	170, 672	K

O valor de C_P para gases é altamente influenciado pela temperatura. Neste trabalho, são empregados polinômios em seu cálculo que permitem estabelecer uma relação entre

a entalpia, H , e a temperatura, T . Os polinômios possuem coeficientes com valores interpolados provenientes das tabelas termodinâmicas NIST-JANAF. Para o cálculo de C_P , é utilizado um polinômio interpolador de quarto grau para cada espécie:

$$C_{P_i}(T) = R(a_0 + a_1T + a_2T^2 + a_3T^3 + a_4T^4) \quad (2.21)$$

Já para a relação entre entalpia e temperatura, é utilizado um polinômio de quinto grau com o seguinte aspecto:

$$H_i(T) = R\left(a_0T + \frac{a_1T^2}{2} + \frac{a_2T^3}{3} + \frac{a_3T^4}{4} + \frac{a_4T^5}{5} + a_5\right) \quad (2.22)$$

Os coeficientes da Equação 2.21 para as espécies O_2 , H_2O , CH_4 , CO_2 e N_2 já vem inclusos no OpenFOAM e são demonstrados nas Tabelas 2.2, 2.3, 2.4, 2.5 e 2.6, respectivamente. A Equação 2.22 também pode ser utilizada para calcular a entalpia química, bastando empregar a temperatura de referência para a formação da espécie. Desta maneira, a entalpia sensível relaciona-se com as demais entalpias através dos polinômios, da seguinte forma:

$$h_{si} = H_i - h_{ci} \quad (2.23)$$

em que h_{ci} é $H_i(T_{ref})$. A entalpia sensível da mistura pode ser escrita como a ponderação entre as espécies:

$$h_s = \sum_i^N Y_i h_{si} \quad (2.24)$$

em que a entalpia sensível, h_s , é resolvida através da Equação 2.15. Obtém-se a temperatura a partir de processo iterativo, relacionando as Equações 2.22, 2.23 e 2.24 até encontrar uma temperatura, T , que atenda à entalpia sensível, h_s , resolvida pela Equação 2.15. Após o cálculo de cada C_{P_i} pelos polinômios, o C_P também é obtido através de média ponderada entre as espécies:

$$C_P = \sum_i^N Y_i C_{P_i} \quad (2.25)$$

Com o C_P calculado obtém-se facilmente a capacidade calorífica a pressão constante através de $\widetilde{C}_P = C_P/MM$, em que MM é a massa molecular da mistura. Dessa forma, pela relação $\widetilde{C}_V = \widetilde{C}_P - R$ calcula-se capacidade calorífica molar a volume constante, \widetilde{C}_V , exigido pelo modelo de Eucken para o cálculo da condutividade térmica, Equação 2.19.

No entanto, Poling *et al.* [37] citam que o modelo modificado de Eucken para o cálculo da condutividade térmica não prevê bons resultados a altas temperaturas. Para contornar este problema, uma alteração é feita no C_P , empregando a seguinte correção empírica:

$$\overline{C_P} = \frac{(H(T) - h_c)(T - T_{ref}) + C_P}{\sqrt{T} + 1} \quad (2.26)$$

Finalmente, a partir de γ obtido do modelo modificado de Eucken, e de $\overline{C_P}$, é possível calcular o coeficiente de difusividade térmica através da Equação 2.18, e consequentemente obtém-se também o coeficiente de difusividade mássica através da hipótese de Lewis unitário.

Tabela 2.2: Coeficientes interpolados da tabela NIST-JANAF para O_2

<i>Coeficiente</i>	<i>Faixa de temperatura baixa 200 K a 1000 K</i>	<i>Faixa de temperatura alta 1000 K a 5000 K</i>
a_0	3,21294	3,69758
a_1	$1,12749 \times 10^{-3}$	$6,1352 \times 10^{-4}$
a_2	$-5,75615 \times 10^{-7}$	$-1,25884 \times 10^{-7}$
a_3	$1,31388 \times 10^{-9}$	$1,77528 \times 10^{-11}$
a_4	$-8,76855 \times 10^{-13}$	$-1,13644 \times 10^{-15}$
a_5	-1005,25	-1233,93

Tabela 2.3: Coeficientes interpolados da tabela NIST-JANAF para H_2O

<i>Coeficiente</i>	<i>Faixa de temperatura baixa 200 K a 1000 K</i>	<i>Faixa de temperatura alta 1000 K a 5000 K</i>
a_0	3,38684	2,67215
a_1	$3,47498 \times 10^{-3}$	$3,05629 \times 10^{-3}$
a_2	$-6,3547 \times 10^{-6}$	$-8,73026 \times 10^{-7}$
a_3	$6,96858 \times 10^{-9}$	$1,201 \times 10^{-10}$
a_4	$-2,50659 \times 10^{-12}$	$-6,39162 \times 10^{-15}$
a_5	-30208,1	-29899,2

Tabela 2.4: Coeficientes interpolados da tabela NIST-JANAF para CH_4

<i>Coeficiente</i>	<i>Faixa de temperatura baixa 200 K a 1000 K</i>	<i>Faixa de temperatura alta 1000 K a 6000 K</i>
a_0	5,14988	1,63543
a_1	$-0,013671 \times 10^{-2}$	$1,00844 \times 10^{-2}$
a_2	$4,91801 \times 10^{-5}$	$-3,36924 \times 10^{-6}$
a_3	-4.84744×10^{-8}	$5,34973 \times 10^{-10}$
a_4	$1,66694 \times 10^{-11}$	$-3,15528 \times 10^{-14}$
a_5	-10246,6	-10005,6

Tabela 2.5: Coeficientes interpolados da tabela NIST-JANAF para CO_2

<i>Coeficiente</i>	<i>Faixa de temperatura baixa 200 K a 1000 K</i>	<i>Faixa de temperatura alta 1000 K a 5000 K</i>
a_0	2,27572	4,45362
a_1	$9,92207 \times 10^{-3}$	$3,14017 \times 10^{-3}$
a_2	$-1,04091 \times 10^{-5}$	$-1,27841 \times 10^{-6}$
a_3	$6,86669 \times 10^{-9}$	$2,394 \times 10^{-10}$
a_4	$-2,11728 \times 10^{-12}$	$-1,66903 \times 10^{-14}$
a_5	-48373,1	-48967

Tabela 2.6: Coeficientes interpolados da tabela NIST-JANAF para N_2

<i>Coeficiente</i>	<i>Faixa de temperatura baixa 200 K a 1000 K</i>	<i>Faixa de temperatura alta 1000 K a 5000 K</i>
a_0	3,29868	2,92664
a_1	$1,40824 \times 10^{-3}$	$1,48798 \times 10^{-3}$
a_2	-3.96322×10^{-6}	-5.68476×10^{-7}
a_3	$5,64152 \times 10^{-9}$	$1,0097 \times 10^{-10}$
a_4	$-2,44486 \times 10^{-12}$	$-6,75335 \times 10^{-15}$
a_5	-1020,9	-922,798

2.2 Radiação Térmica

A transferência de calor tanto por condução quanto por convecção exige a presença de um meio físico para que ocorra. A transferência de calor por radiação térmica, ao contrário, não requer um meio físico para se propagar. O mecanismo de emissão de radiação térmica é relacionado à energia liberada como resultado das oscilações ou transições de vários elétrons que constituem o meio. Essas oscilações são por sua vez mantidas pela energia interna e, portanto, pela temperatura do meio [38].

O mecanismo de propagação da radiação térmica ainda não está completamente compreendido, mas diversas teorias já foram propostas com o intuito de explicar o processo, como por exemplo, a teoria eletromagnética de Maxwell e a teoria quântica de Max Planck [39].

Considerando a natureza do transporte da radiação térmica como a propagação de ondas eletromagnéticas, pode-se relacionar o seu comprimento de onda, λ , a frequência da onda, ν , e a velocidade da luz, c , da seguinte maneira:

$$\nu = \frac{c}{\lambda} \quad (2.27)$$

Se o meio no qual a radiação térmica se propaga for o vácuo, a velocidade de propagação é igual à $2,9979 \times 10^8 m/s$. Utilizando esta relação entre ν e λ , é possível verificar o espectro eletromagnético correspondente na Figura 2.2. De acordo com a Figura 2.2, verifica-se que a região pertinente à transferência de calor se situa entre $\lambda = 0,1 \mu m$ e $\lambda = 100 \mu m$. Desta maneira, a intensidade da radiação térmica, assim como outras propriedades radiantes serão dependentes do comprimento de onda, havendo a necessidade de utilização do termo “espectral” para caracterizar esta dependência. Mangani [3] cita como espécies chaves na análise de um campo radiativo gerado por combustão o H_2O , CO_2 , NO_x e SO_x , pois elas são altamente ativas nesta faixa de comprimento.

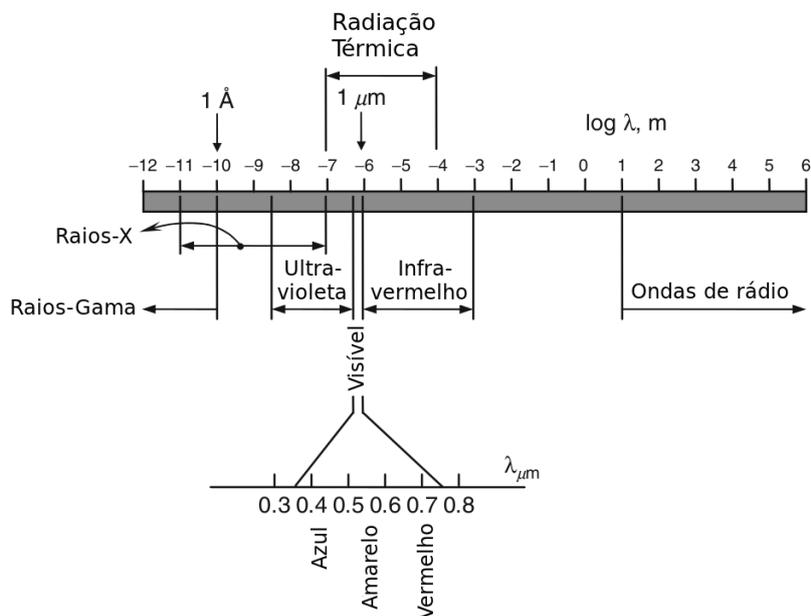


Figura 2.2: Espectro da radiação eletromagnética - adaptado de Yeoh e Yuen [2].

2.2.1 Intensidade de Radiação Térmica

A propriedade fundamental que governa o campo de radiação térmica é a intensidade espectral da radiação, ou radiância espectral. A Figura 2.3 apresenta variáveis importantes no entendimento da radiação térmica, o vetor \mathbf{n} normal a superfície de área dA , que emite um raio radiante na direção \mathbf{s} , fazendo um ângulo θ com sua normal e que está contido dentro do ângulo sólido diferencial $d\Omega = \text{sen}\theta \, d\theta \, d\phi$.

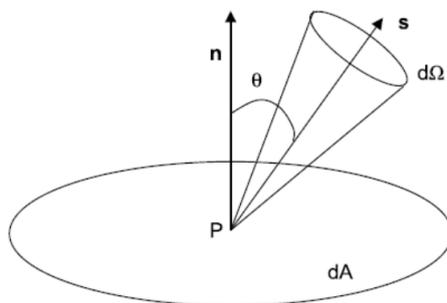


Figura 2.3: Variáveis utilizadas na definição da intensidade radiativa - retirado de Mangani [3].

Seja $e_{\lambda+\Delta\lambda}(\mathbf{r}, t + \Delta t) - e_{\lambda}(\mathbf{r}, t)$ a quantidade de energia transportada em um ponto P , de coordenada \mathbf{r} , no intervalo de comprimento de onda de λ a $\lambda + \Delta\lambda$, através de um

elemento imaginário de área A arbitrariamente orientado, durante o intervalo de tempo t a $t + \Delta t$ e confinado em um elemento de ângulo sólido Ω em torno da direção \mathbf{s} . O vértice do cone elementar está na superfície do elemento A , cuja normal \mathbf{n} faz um ângulo θ com a direção \mathbf{s} . O limite da Equação 2.28 tende a um valor finito, considerando que o ponto P e a direção \mathbf{s} são mantidas constantes [3]:

$$I_\lambda(\mathbf{r}, \mathbf{s}, t) = \lim_{A, \Omega, \Delta\lambda, \Delta t \rightarrow 0} \left| \frac{e_{\lambda+\Delta\lambda}(\mathbf{r}, t + \Delta t) - e_\lambda(\mathbf{r}, t)}{\cos\theta A \Omega \Delta\lambda \Delta t} \right| \quad (2.28)$$

O valor obtido na Equação 2.28 é a intensidade radiante espectral I_λ . A sua integral em todo espectro de onda leva a definição de intensidade radiante total:

$$I(\mathbf{r}, \mathbf{s}, t) = \int_0^\infty I_\lambda(\mathbf{r}, \mathbf{s}, t) d\lambda \quad (2.29)$$

2.2.2 Irradiância

Incropera e DeWitt [38] definem irradiância espectral como a taxa de energia radiante incidente em um elemento de volume por unidade de área, sendo obtida, então, pela integral da intensidade espectral em todo ângulo sólido. A princípio a irradiância também é uma função do tempo e da posição e será mantida em sua nomenclatura esta dependência:

$$G_\lambda(\mathbf{r}, t) = \int_{4\pi} I_\lambda(\mathbf{r}, \mathbf{s}, t) d\Omega \quad (2.30)$$

Integrando a equação 2.30 em todo espectro de onda obtém-se a irradiância total:

$$G(\mathbf{r}, t) = \int_0^\infty G_\lambda(\mathbf{r}, t) d\lambda \quad (2.31)$$

2.2.3 Poder Emissivo de um Corpo Negro

De acordo com a hipótese de Planck [40], a energia de um fóton está relacionada com seu comprimento de onda da seguinte forma:

$$E = h \frac{c}{\lambda} \quad (2.32)$$

em que $h = 6,626 \times 10^{-34} J \cdot s$ é a constante de Planck. De acordo com a Lei de Planck, o poder emissivo espectral de uma superfície de um corpo negro (de normal \mathbf{n}) em um meio transparente com índice de refração m é [38]:

$$e_{b\lambda}(T, t) = \int_{2\pi} I_{b\lambda}(T, t) \mathbf{s} \cdot \mathbf{n} d\Omega = \frac{2\pi h c_0^2}{m^2 \lambda^5 [e^{hc_0/k_B T m \lambda} - 1]} \quad (2.33)$$

em que $k_B = 1,3807 \times 10^{-34} J \cdot s$ é a constante de Boltzmann e c_0 é a velocidade da luz no vácuo. O poder emissivo total de um corpo negro é obtido pela integração em todo o espectro de onda:

$$e_b(T, t) = \int_0^\infty e_{b\lambda}(T, t) d\lambda = m^2 \sigma T^4 \quad (2.34)$$

em que $\sigma = (2\pi^5 k^4)/(15h^3 c_0^2) = 5,670 \cdot 10^{-8} W/m^2 K^4$ é a constante de Stefan-Boltzmann. A Equação 2.34 também é conhecida como Lei de Stefan-Boltzmann, e permite o cálculo da radiação térmica total emitida em todas as direções e sobre todos os comprimentos de onda a partir do conhecimento da temperatura do corpo negro. O índice de refração no vácuo é $m = 1$. Modest [41] afirma que, para a maioria dos gases, o índice de refração é muito próximo da unidade, como por exemplo, ar a temperatura ambiente, que possui $m = 1,00029$ em todo espectro visível. Sendo assim, foi utilizado o valor unitário para o índice de refração neste trabalho.

Como a intensidade da radiação térmica de um corpo negro é isotrópica, sua dependência direcional pode ser desprezada. Desta forma, o termo $I_{b\lambda}(T, t)$ sai do integrando da Equação 2.33, e obtém-se a seguinte relação:

$$e_{b\lambda}(T, t) = I_{b\lambda}(T, t) \int_{2\pi} \mathbf{s} \cdot \mathbf{n} d\Omega = I_{b\lambda}(T, t) \pi \quad (2.35)$$

Logo, é possível relacionar a sua intensidade de radiação total com seu poder emissivo total, da seguinte forma:

$$I_b(T, t) = \int_0^\infty I_{b\lambda}(T, t) d\lambda = \int_0^\infty \frac{e_{b\lambda}(T, t)}{\pi} d\lambda = \frac{\sigma T^4}{\pi} \quad (2.36)$$

2.2.4 Radiação Térmica em Meios Participantes

A radiação térmica em um meio participante pode ser absorvida, emitida, ou espalhada. Neste trabalho é assumido o meio em estado estacionário (comparado à velocidade da luz), não-polarizante e em equilíbrio termodinâmico local. A equação espectral de transporte de energia radiante descreve o campo de intensidade radiativo como função da localização, \mathbf{r} , direção, \mathbf{s} , e do comprimento de onda, λ .

Seguindo a abordagem de Modest [41] para modelagem de radiação térmica em um meio participante, a quantidade de energia radiante absorvida é diretamente proporcional à magnitude da energia incidente, assim como da distância que o raio na direção \mathbf{s} de radiação térmica percorre no meio. Então, é possível escrever:

$$(dI_\lambda)_{abs} = -\kappa_\lambda I_\lambda ds \quad (2.37)$$

em que κ_λ é a constante de proporcionalidade, conhecida como coeficiente de absorção. Como a intensidade diminui devido à absorção do meio, o sinal negativo precisa ser introduzido, ou seja, a absorção acarreta em perda de intensidade radiativa.

Outra fonte de perda de radiação térmica no raio é ocasionado pelo espalhamento, definido de forma análoga à absorção:

$$(dI_\lambda)_{esp} = -\sigma_{s\lambda} I_\lambda ds \quad (2.38)$$

em que $\sigma_{s\lambda}$ é o coeficiente de espalhamento. A Equação 2.38 se assemelha a Equação 2.37, com a diferença de que enquanto a perda de radiação térmica por absorção representa ganho de energia interna, a perda por espalhamento resulta em ganho em outras direções \mathbf{s} .

Para representar esse ganho, é necessário computar as contribuições por espalhamento de todas as outras direções, sendo necessário integrá-las em todos os ângulos sólidos. Como demonstrado em Modest [41], o ganho por espalhamento na direção \mathbf{s} com contribuição de todas as outras direções \mathbf{s}_i é dado por:

$$(dI_\lambda)_{esp}(\mathbf{s}) = ds \frac{\sigma_{s\lambda}}{4\pi} \int_{4\pi} I_\lambda(\mathbf{s}_i) \Phi_\lambda(\mathbf{s}_i, \mathbf{s}) d\Omega_i \quad (2.39)$$

em que a função Φ_λ é chamada de função de espalhamento de fase, e descreve a probabilidade de um raio na direção \mathbf{s}_i ser espalhado na direção \mathbf{s} . O último termo que completa o balanço de energia radiante, é o ganho por emissão, que é dado por:

$$(dI_\lambda)_{em} = \kappa_\lambda I_{b\lambda} ds \quad (2.40)$$

Nota-se que a constante de proporcionalidade para emissão é a mesma que para absorção. A dedução desta equação não é trivial, pois envolve conceitos como a emissão espontânea de fótons, emissão induzida e absorção induzida, podendo ser consultada em Modest [41].

Somando todas as contribuições, a equação de transporte de energia radiante será definida em coordenadas Lagrangeanas, já que a modelagem segue um raio em uma direção \mathbf{s} viajando a uma velocidade c , em comprimento $ds = c dt$, resultando na Equação 2.41:

$$I_\lambda(s + ds, \mathbf{s}, t + dt) - I_\lambda(s, \mathbf{s}, t) = -\kappa_\lambda I_\lambda ds + \kappa_\lambda I_{b\lambda} ds - \sigma_{s\lambda} I_\lambda ds + \frac{\sigma_{s\lambda}}{4\pi} \int_{4\pi} I_\lambda(\mathbf{s}_i) \Phi_\lambda(\mathbf{s}_i, \mathbf{s}) d\Omega_i ds \quad (2.41)$$

Utilizando a expansão por série de Taylor para a intensidade que está saindo da distância infinitesimal ds , obtém-se:

$$I_\lambda(s + ds, \mathbf{s}, t + dt) = I_\lambda(s, \mathbf{s}, t) + dt \frac{\partial I_\lambda}{\partial t} + ds \frac{\partial I_\lambda}{\partial s} \quad (2.42)$$

logo, para coordenadas Eulerianas, a Equação 2.41 é escrita da seguinte forma:

$$\frac{1}{c} \frac{\partial I_\lambda}{\partial t} + \frac{\partial I_\lambda}{\partial s} = -\kappa_\lambda I_\lambda + \kappa_\lambda I_{b\lambda} - \sigma_{s\lambda} I_\lambda + \frac{\sigma_{s\lambda}}{4\pi} \int_{4\pi} I_\lambda(\mathbf{s}_i) \Phi_\lambda(\mathbf{s}_i, \mathbf{s}) d\Omega_i \quad (2.43)$$

A Equação 2.43 também é conhecida como RTE (*Radiative Transport Equation*). Como a velocidade da luz é muito maior do que a velocidade usual de um fluido, o termo transiente $\partial I_\lambda / \partial t$ é desprezado. A modelagem da função $\Phi_\lambda(\mathbf{s}_i, \mathbf{s})$ é complexa, mesmo considerando espalhamento isotrópico, sendo a razão pela qual, neste trabalho, o ganho e a perda por espalhamento foram desconsiderados. Além disso, os materiais particulados são os que possuem maior influência no espalhamento, e como a produção de fuligem foi

negligenciada, é possível desconsiderá-lo. Então, a Equação 2.43 resume-se a:

$$\frac{dI_\lambda}{ds} = \mathbf{s} \cdot \nabla I_\lambda = -\kappa_\lambda I_\lambda + \kappa_\lambda I_{b\lambda} \quad (2.44)$$

2.2.5 Termo Fonte no Balanço de Energia Global

O efeito da energia radiante é levado em conta no balanço de energia em termos de entalpia, Equação 2.15. Dessa maneira, é preciso obter uma expressão para $-\nabla \cdot \mathbf{q}_R$. Definindo o vetor fluxo de energia radiante em uma direção \mathbf{s} e em um comprimento de onda λ :

$$\mathbf{q}_{R\lambda} = \int_{4\pi} I_\lambda \mathbf{s} d\Omega \quad (2.45)$$

O divergente de $\mathbf{q}_{R\lambda}$ pode ser escrito na seguinte forma:

$$\nabla \cdot \mathbf{q}_{R\lambda} = \nabla \cdot \int_{4\pi} I_\lambda \mathbf{s} d\Omega = \int_{4\pi} \mathbf{s} \cdot \nabla I_\lambda d\Omega \quad (2.46)$$

Logo, de acordo com a Equação 2.44, o divergente do fluxo de energia radiante pode ser escrito da seguinte forma:

$$\nabla \cdot \mathbf{q}_{R\lambda} = \int_{4\pi} \mathbf{s} \cdot \nabla I_\lambda d\Omega = -\kappa_\lambda \int_{4\pi} I_\lambda d\Omega + \kappa_\lambda \int_{4\pi} I_{b\lambda} d\Omega \quad (2.47)$$

Utilizando a definição de que um corpo negro emite igualmente em todas as direções, obtém-se a seguinte expressão para o termo fonte da energia radiante:

$$\nabla \cdot \mathbf{q}_{R\lambda} = \kappa_\lambda \left(4\pi I_{b\lambda} - \int_{4\pi} I_\lambda d\Omega \right) = \kappa_\lambda (4\pi I_{b\lambda} - G_\lambda) \quad (2.48)$$

A Equação 2.48 é a forma espectral do fluxo de energia radiante, e para se chegar ao fluxo de energia total, é necessário integrá-la em todo espectro de onda:

$$\nabla \cdot \mathbf{q}_R = \int_0^\infty \nabla \cdot \mathbf{q}_{R\lambda} d\lambda = \int_0^\infty \kappa_\lambda (4\pi I_{b\lambda} - G_\lambda) d\lambda \quad (2.49)$$

Desta maneira, o divergente do fluxo de energia radiante está estabelecido. As Equações de transporte 2.1, 2.8, 2.7 e 2.15 constituem o conjunto de equações diferenciais parciais que precisam ser resolvidas para caracterizar a chama. Para este sistema, são ao todo

onze equações, uma para a equação do estado, uma para a continuidade, quatro para o transporte de espécies, três para o *momentum*, uma para a energia e uma para a intensidade de radiação térmica. No entanto, também são onze o número de variáveis, $\rho, p_d, Y_{CH_4}, Y_{O_2}, Y_{CO_2}, Y_{H_2O}, u, v, w, h_s$ e I_λ , o que torna o sistema fechado e com solução única. Porém, claramente o sistema de equações proposto, devido a sua grande complexidade, não possui solução analítica, exceto para casos especiais e idealizados. No caso da radiação térmica, modelos numéricos são necessários para estabelecer a constante de absorção κ_λ , e depois resolver a RTE para estabelecer a irradiância total G , necessária no cálculo do termo fonte da Equação 2.15.

Para obter uma solução deste sistema em casos reais de engenharia, métodos numéricos precisam ser aplicados. A resolução das equações de transporte por técnicas matemáticas tem o nome de fluidodinâmica computacional (*Computational Fluid Dynamics - CFD*), a ser descrito no Capítulo 3.

Capítulo 3

Fluidodinâmica Computacional

Fluidodinâmica computacional ou CFD é a análise de sistemas que envolvem escoamentos de fluidos, transferência de calor e fenômenos associados como reações químicas através de simulação computacional. Possui diversas áreas de aplicação em engenharia, como no estudo de casos como hidrodinâmica de navios e aerodinâmica de aviões e veículos, no cálculo da força de arraste e empuxo, projetos de equipamentos, tendo atuação nas etapas de dimensionamento e caracterização da geometria, entre outros [6]. Neste capítulo é feita uma descrição da resolução numérica das equações obtidas no Capítulo 2, focando no tratamento matemático das equações para que se tornem viáveis de serem resolvidas, envolvendo aspectos de turbulência e métodos numéricos para cálculo do campo de energia radiante.

3.1 Método dos Volumes Finitos

Para obter numericamente uma solução aproximada do sistema de equações diferenciais parciais (EDPs), é necessário um método de discretização que aproxime as equações diferenciais em equações algébricas, que podem ser resolvidas com o auxílio de computação. As aproximações são aplicadas em pequenos domínios no espaço e no tempo, resultando em soluções em localizações discretas no espaço e no tempo. A acurácia das

soluções numéricas dependem largamente da qualidade da discretização empregada. Os métodos mais conhecidos de discretização são o Métodos das Diferenças Finitas (MDF), Método dos Volumes Finitos (MVF) e o Método dos Elementos Finitos (MEF). O MDF é o método mais antigo de resolução de EDPs, além de ser o de mais fácil aplicação para uso em geometrias simples, sendo descrito em Ferziger e Peric [26]. O MEF é amplamente utilizado em análise estrutural, exposto em Hartmann e Katz [42]. Já o MVF é atualmente a técnica melhor estabelecida em CFD, tendo sido utilizado neste trabalho.

O MVF foi primeiramente introduzido por McDonald, MacCormack e Paullay, nos anos 70. Uma importante propriedade do MVF é que os princípios de balanço de massa, *momentum* e energia, que são a base da modelagem matemática de problemas da mecânica do contínuo são, por definição, também válidos para as equações discretas, como citado por Schäfer [5]. O MVF utiliza a forma integral das equações de conservação como ponto de partida. O domínio computacional é dividido em um número finito de volumes de controle (VC) e as equações são então aplicadas em cada VC. No centroide dos VC, o valor da variável de interesse é calculada, com interpolações sendo empregadas para expressar os valores nas faces do VC. Dois volumes de controle típicos são mostrados na Figura 3.1, que mostra volumes centrados nos pontos P e N:

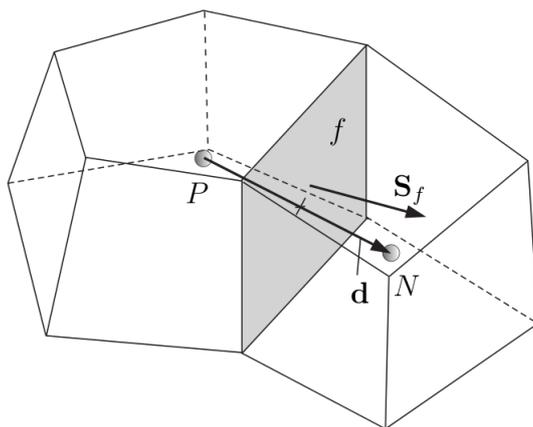


Figura 3.1: Volume de controle para discretização - retirado de Rusche [4].

Após definir o VC, é preciso estabelecer quais equações serão resolvidas. Tomando

como exemplo a Equação 2.8, e escrevendo-a em sua forma integral, é possível obter:

$$\int_t^{t+\Delta t} \left[\frac{\partial}{\partial t} \int_{V_P} \rho Y_i dV + \int_{V_P} \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} Y_i) dV \right] dt = \int_t^{t+\Delta t} \left[\int_{V_P} \nabla \cdot (\rho \alpha \nabla Y_i) dV + \int_{V_P} \omega_i dV \right] dt \quad (3.1)$$

A Equação 3.1 representa o balanço de espécies utilizado no MVF. Para torná-la algébrica, é necessário aplicar aproximações que descrevam numericamente as integrais e as derivadas de cada termo das equações e em cada volume de controle. A discretização temporal, e dos operadores gradiente e divergente, assim como da integral volumétrica não serão descritos neste trabalho, embora possam ser consultadas em [2, 5, 6, 26, 43].

3.1.1 Malhas

Os volumes de controle não se sobrepõem e ocupam todo o domínio computacional, e, neste trabalho, todas as variáveis compartilham os mesmos VCs. Ao conjunto de VCs dá-se o nome de malha computacional, que é essencialmente uma representação discreta do domínio geométrico. Uma malha possui diversas características, entre as principais está o fato de uma malha poder ser estruturada ou não-estruturada, e ortogonal ou não ortogonal. Em uma malha estruturada, todos os elementos tem sempre o mesmo número de faces, sendo melhor aplicada a simples geometrias, podendo ser ortogonal ou não. A Figura 3.2 apresenta dois exemplos de malhas estruturadas, sendo a da esquerda ortogonal e a da direita não. Uma malha será ortogonal se os vetores \mathbf{d} , que liga os centroides de dois volumes de controle, e \mathbf{S}_f , vetor área pela qual passa o vetor \mathbf{d} , da Figura 3.1, forem paralelos e, caso não sejam, ainda serão necessárias correções de não ortogonalidade ao longo do método numérico.

Para uma malha não-estruturada, não há regularidade no arranjo dos VCs, e, conseqüentemente, os elementos não terão sempre o mesmo número de faces, como apresentado na Figura 3.3. A possibilidade de distribuir de maneira mais desordenada os VCs no domínio oferece maior flexibilidade em problemas de geometria complexa, no en-

tanto com maior custo computacional devido a irregularidade inerente a sua estrutura de armazenamento de dados.

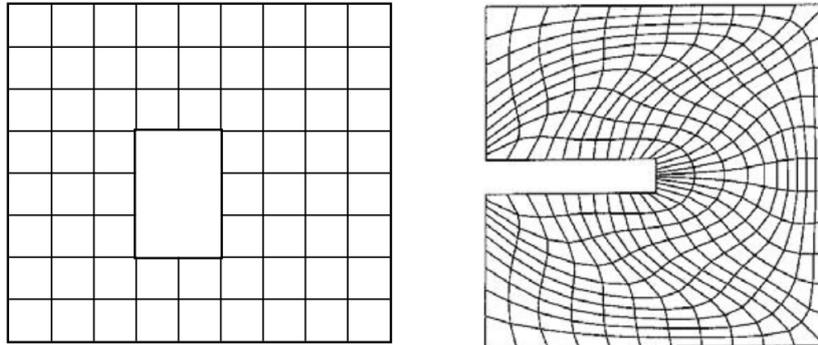


Figura 3.2: Exemplos de malha estruturada ortogonal (esquerda) e não ortogonal (direita) - retirado de Schäfer [5].

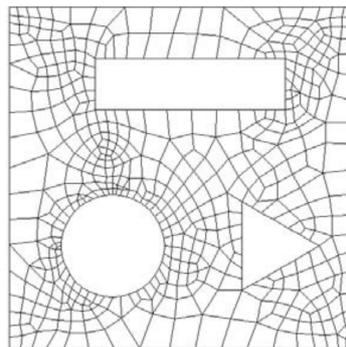


Figura 3.3: Exemplo de malha não-estruturada - retirado de Schäfer [5].

Após estabelecer a malha e utilizar a discretização das equações, é preciso construir um sistema de equações algébricas, para que possa, então, ser resolvido por algum método numérico.

3.1.2 Resolução de Sistemas de Equações Algébricas

Um método de resolução de sistemas de equações algébricas lineares tem que ser ao mesmo tempo robusto e eficiente computacionalmente. Métodos convencionais como a eliminação Gaussiana poderiam ser empregados, porém, como em problemas práticos de engenharia a malha pode ter mais de um milhão de elementos, este método se torna computacionalmente custoso. No entanto, em problemas de CFD, a matriz do sistema

linear resultante das discretizações é altamente esparsa, ou seja, excetuando os elementos das diagonais principais, os demais elementos são, em sua maioria, nulos. Isto representa uma grande vantagem, pois possibilita o emprego de técnicas matemáticas que utilizem apenas os elementos não nulos.

Os principais métodos para resolução direta são: eliminação Gaussiana, decomposição LU e algoritmo de matrizes tridiagonais (*Tridiagonal Matrix Algorithm - TDMA*). Qualquer sistema de equações pode ser resolvido por métodos diretos, no entanto, seu custo computacional aumenta muito rapidamente com o aumento do número de equações. Além disso, o erro da discretização é usualmente muito maior que a precisão dos métodos diretos, levando a nenhum ganho com a acurácia destes algoritmos. Levando isso em consideração, em CFD os métodos iterativos são mais utilizados, e os principais são: Método de Jacobi, Método de Gauss-Seidel, Gradiente Conjugado e Método Multigrid. Estes algoritmos são em sua maioria de complexa descrição, não sendo a intenção deste trabalho abordá-los, devendo ser consultados em Versteeg e Malalasekera [6] ou Ferziger e Peric [26].

3.1.3 Acoplamento Pressão-Velocidade

Analisando as equações do *momentum*, da continuidade e dos gases ideais, percebe-se a existência de um sistema fechado composto por cinco equações e cinco variáveis que estão acopladas, a saber, as três componentes da velocidade, a pressão dinâmica e a massa específica, considerando que a temperatura é conhecida. Apesar de haver equações explícitas para a velocidade e para a massa específica, não há uma equação em que a pressão seja uma variável dominante. Logo, é preciso obter uma equação para a pressão, e fazer com que a pressão obtida desta equação gere um campo de velocidade que obedeça a equação da continuidade.

Para resolver este acoplamento, uma série de métodos foi desenvolvida para aplicações em CFD. Baseando-se em Jasak [43], o método PISO (*Pressure Implicit with Splitting of Operators*) no OpenFOAM envolve três estágios principais, descritos resumidamente em seguida:

1. Resolução do campo de velocidade a partir da pressão obtida da iteração anterior ou advinda das condições iniciais. Este estágio tem o nome de Preditor do *Momentum* (*Momentum Predictor*);
2. Utilizando o campo de velocidade obtido, resolve-se a equação da pressão, fornecendo a primeira estimativa do campo de pressão. Esta etapa é chamada de Solução da Pressão;
3. Como consequência da nova distribuição de pressão, é necessário corrigir a velocidade, etapa que é feita de maneira explícita. Este último estágio é a Correção Explícita da Velocidade.

Para um mesmo passo de tempo, a primeira etapa só é realizada uma vez, enquanto que a resolução da pressão e a correção explícita da velocidade são executadas diversas vezes em *loop* até atingir o critério de convergência.

O algoritmo SIMPLE (*Semi-Implicit Method for Pressure Linked Equations*) foi proposto originalmente por Patankar e Spalding [44]. No OpenFOAM, o SIMPLE possui formulação apenas para problemas estacionários, e apresenta as mesmas etapas principais do PISO, com as diferenças de que depois da primeira etapa ocorre relaxação do campo de velocidade, assim como após a segunda etapa, em que há a relaxação da solução obtida para o campo de pressão. Por fim, o *loop* é executado para todas as etapas, não apenas para o segundo e o terceiro, até a convergência.

Há ainda dois métodos bastante populares derivados do SIMPLE, o SIMPLER (SIMPLE Revisado) e o SIMPLEC (SIMPLE Consistente). Maiores detalhes a respeito destas técnicas podem ser verificados em Versteeg e Malalasekera [6] ou Ferziger e Peric [26].

A técnica empregada neste trabalho e a que está implementada no OpenFOAM é o PIMPLE, uma técnica híbrida entre o SIMPLE e o PISO. Consiste em executar externamente o *loop* do SIMPLE, porém executando um *loop* interno adicional entre as etapas 2 e 3, assim como é feito no PISO. Por fim, no PIMPLE também são empregadas as relaxações típicas do SIMPLE, exceto na última iteração, em que a Correção Explícita

da Velocidade é realizada com valores não relaxados de pressão (uma característica do PISO).

3.1.3.1 Equação da Pressão

A equação da pressão pode ser deduzida a partir da equação da pressão definida como a soma entre a pressão dinâmica e pressão hidrostática $p = p_d + \rho(\mathbf{g} \cdot \mathbf{x})$. Baseando-se na equação dos gases ideais em que $\rho = p/RT$, a equação da continuidade pode ser escrita como:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{p_d}{RT} + (\mathbf{g} \cdot \mathbf{x}) \frac{\rho}{RT} \right) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (3.2)$$

Separando as derivadas temporais, obtém-se:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{p_d}{RT} \right) + (\mathbf{g} \cdot \mathbf{x}) \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\rho}{RT} \right) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (3.3)$$

É interessante nesta parte introduzir a equação semi-discretizada do *momentum*. Sua dedução pode ser vista em Versteeg e Malalasekera [6] ou Jasak [43]. Considerando o empuxo, ela é definida como:

$$\mathbf{u}_p = \frac{\mathbf{H}(\mathbf{u})}{a_p} - \frac{\nabla p_d}{a_p} - \frac{(\mathbf{g} \cdot \mathbf{x}) \nabla \rho}{a_p} \quad (3.4)$$

em que a_p representa os coeficientes da diagonal principal da matriz do sistema linear para \mathbf{u}_p . O índice p representa o ponto central do volume de controle para o qual está se obtendo a velocidade. O operador $\mathbf{H}(\mathbf{u})$ consiste de duas partes: a parte de transporte, que envolve a multiplicação dos coeficientes da matriz pela velocidade das células vizinhas l , e um termo fonte, $\mathbf{Q}(\mathbf{u})$, que contém a parte transiente e outros termos que possam ser obtidos em função de \mathbf{u}_p :

$$\mathbf{H}(\mathbf{u}) = - \sum_l a_l \mathbf{u}_l + \mathbf{Q}(\mathbf{u}) \quad (3.5)$$

Por fim, resta inserir a Equação 3.4 em 3.3 para se obter a equação da pressão:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{p_d}{RT} \right) + (\mathbf{g} \cdot \mathbf{x}) \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\rho}{RT} \right) + \nabla \cdot \left(\rho \frac{\mathbf{H}(\mathbf{u})}{a_p} - \rho \frac{(\mathbf{g} \cdot \mathbf{x}) \nabla \rho}{a_p} \right) - \nabla \cdot \left(\frac{\rho}{a_p} \nabla p_d \right) = 0 \quad (3.6)$$

A Equação 3.6 é a utilizada no método PIMPLE para resolver o acoplamento pressão-velocidade. É importante citar que mesmo empregando precisos algoritmos numéricos e métodos de discretização adequados, seria necessário um esforço computacional muito grande para resolver as equações de conservação em escoamentos caracterizados como turbulentos, como é o caso da combustão, devido à necessidade de resolução de uma ampla faixa de escalas de tempo e espaço. Para este tipo de problema, modelos de turbulência precisam ser aplicados, e são apresentados na Seção 3.2.

3.2 Turbulência

As equações governantes estabelecidas no Capítulo 2 por si só já são suficientes para modelar o problema proposto. No entanto, em escoamentos turbulentos como o fenômeno de combustão, devido ao largo espectro de energia cinética turbulenta, a resolução direta das equações de conservação demandaria um intenso custo computacional. Silveira Neto [45] apresenta uma demonstração de que um problema simples de fluidodinâmica possui 10^8 graus de liberdade, justificando a necessidade de artifícios matemáticos para tratar a turbulência. Os principais modelos de turbulência derivam de duas classes de métodos, a Média Temporal de Reynolds (*Reynolds Average Navier Stokes - RANS*) e a Simulação de Grandes Escalas (*Large Eddy Simulation - LES*).

Embora seja de difícil aplicação, a chamada simulação numérica direta (*Direct Numeric Simulation - DNS*) não emprega qualquer modelo de turbulência e tem sido utilizada em alguns problemas de combustão. Luo *et al.* [46] demonstram o uso de DNS na modelagem de chama de *spray* utilizando como combustível o heptano em uma câmara de combustão. Bastiaans *et al.* [47] investigaram a possibilidade do emprego de DNS em combustão de hidrogênio, simplificando a química, porém mantendo as equações fluidodinâmicas fundamentais do problema para obter resultados que guiem o avanço de outros modelos de turbulência.

Na média temporal de Reynolds, são realizadas as médias das equações de Navier-

Stokes em um período de tempo grande o suficiente para que contenha também as oscilações de mais baixa frequência. O comportamento transiente inerente de escoamentos turbulentos é ignorado, e a turbulência se torna um fenômeno estacionário, apenas considerando o efeito das flutuações no escoamento médio estabelecido [3].

Por ser uma técnica de constante uso na engenharia, há diversos trabalhos publicados analisando sua eficiência em combustão. Johansen e Yin [48] investigaram a acurácia de simulações de CFD utilizando abordagem RANS no problema de queima de gás natural e oxigênio com alto grau de pureza. Diferentemente do DNS, a abordagem RANS requer bem menos capacidade de processamento, o que permite implementar modelagens químicas mais complexas na simulação, podendo utilizar, por exemplo, a equação de Peng-Robinson [49] como equação de estado, empregada por Cutrone *et al.* [50]. A abordagem RANS é de contante uso na engenharia, e detalhes sobre os métodos derivados desta categoria podem ser vistos em Wilcox [51] e McDonough [52]. No presente trabalho foi utilizado o LES para modelagem da turbulência. Suas vantagens e desafios são apresentados no próximo item.

3.2.1 Simulação de Grandes Escalas (LES)

A simulação de grandes escalas foi primeiramente introduzida por Smagorinsky [53] para simular correntes atmosféricas. Neste contexto, as maiores escalas de turbulência são resolvidas diretamente pelas equações governantes, enquanto as menores escalas, por serem predominantemente isotrópicas e homogêneas, são modeladas. Desta forma, o LES exige malhas refinadas [45]. As metodologias LES e DNS são semelhantes no sentido de que ambas permitem a obtenção de resultados tridimensionais e transientes das equações de Navier-Stokes.

Como a contribuição da turbulência de pequena escala na solução total do campo de escoamento é pequena, os erros introduzidos pela sua modelagem são pequenos. Em adição, as escalas resolvidas carregam muito mais informação do que o escoamento médio previsto nos modelos RANS. Logo, LES é potencialmente muito mais preciso que RANS,

e quando comparado com DNS, sua demanda por recursos computacionais é consideravelmente inferior, já que as menores escalas não são resolvidas. Somando esses fatores ao constante aumento da capacidade computacional e o crescente avanço no desenvolvimento desta técnica, os modelos LES prometem assumir um papel de destaque em um futuro próximo [54], e é o modelo utilizado neste trabalho.

A aplicação da modelagem LES se estende a diversas áreas, como a análise de escoamentos aerodinâmicos externos a veículos, estudo da aeroacústica predizendo o ruído gerado pelas interações aerodinâmicas [54], jatos, separamento e recolamento de camada limite, escoamentos interagindo com corpos imersos e recirculação [22]. Recentemente, Salvador [55] em sua tese de doutorado expõe diversos aspectos da aplicação de LES em combustão turbulenta.

Para a dedução das equações para simulação de grandes escalas, os campos das variáveis presentes no problema são definidos através de um processo de filtragem, gerando termos de grande escala e termos submalha, que necessitam ser modelados. A Figura 3.4 apresenta o espectro de energia cinética turbulenta. Em LES deve se estabelecer uma frequência de corte, em que as frequências mais baixas, ou seja, as maiores escalas de turbulência são resolvidas e as maiores frequências, ou menores escalas de turbulência, são modeladas. É importante ressaltar que o modelo só será preciso quando a frequência de corte estiver na inclinação de $-5/3$, onde as escalas já estão na faixa inercial. Para realizar esta verificação pode ser feita a convergência de malha, etapa em que a frequência de corte aumenta progressivamente, e avaliar se os resultados são estáveis.

Desta maneira, uma variável f pode ser decomposta da seguinte forma:

$$f(x, t) = \bar{f}(x, t) + f'(x, t) \quad (3.7)$$

em que $\bar{f}(x, t)$ é a função de grande escala e $f'(x, t)$ é a função de pequena escala. O processo de filtragem consiste em realizar uma integral de convolução entre a variável f e uma função de filtro $G(x - x')$:

$$\bar{f}(x, t) = \int_V G(x - x') f(x', t) dx' \quad (3.8)$$

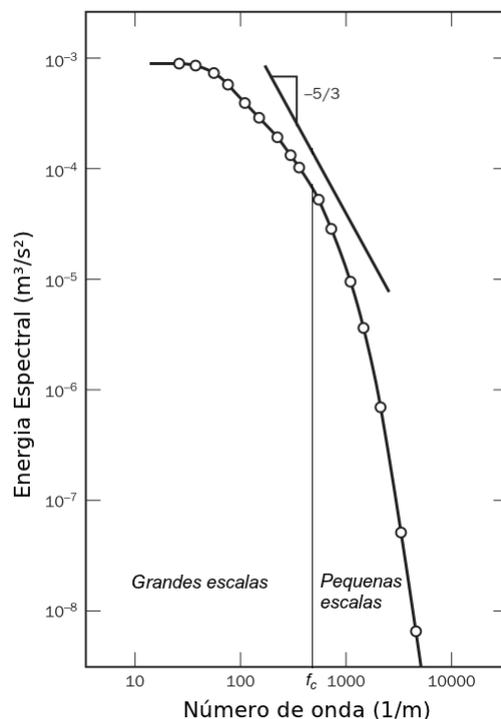


Figura 3.4: Espectro de energia cinética turbulenta, em que f_c é a frequência de corte - adaptado de Versteeg e Malalasekera [6].

Existem diversos tipos de filtros aplicados a CFD. Um tipo comum de filtro aplicado a LES é o filtro Gaussiano, que possui a vantagem de ser suave e diferenciável, e o filtro de corte espectral, sendo ambos esses dois modelos pouco utilizados em CFD [6]. Pela conveniência, o filtro mais empregado em abordagem LES utilizando MVF é o filtro do tipo caixa, definido na Equação 3.9.

$$G(x - x') = \begin{cases} (1/\Delta)^3, & \text{se } |x - x'| \leq (\Delta/2) \\ 0, & \text{se } |x - x'| > (\Delta/2) \end{cases} \quad (3.9)$$

em que Δ é a largura do corte do filtro. O Δ indica o tamanho do vórtices que serão retidos nos cálculos e aqueles que serão rejeitados. A princípio a largura do corte poderia ser de qualquer tamanho, mas utilizando o MVF não há sentido em escolher um tamanho que seja menor que o comprimento da malha. Neste tipo de cálculo qualquer informação retida em tamanhos menores do que o elemento de volume precisa ser modelada para não ser perdida [6]. Assim, o tamanho de Δ é normalmente calculado como:

$$\Delta = (\Delta x \Delta y \Delta z)^{1/3} \quad (3.10)$$

em que Δx , Δy e Δz na Equação 3.10 são as dimensões do volume de controle. Vreman *et al.* [56] no trabalho de pesquisa de aspectos importantes na modelagem LES em escoamentos compressíveis, demonstram que a dedução das equações filtradas neste contexto possui como agravante o fato de que a equação da continuidade também terá termos submalha. Para evitar modelar estes termos, Favre introduziu o conceito de média ponderada pela densidade, que realiza a seguinte operação para uma função f qualquer:

$$\bar{\rho}\tilde{f}(x, t) = \int_V \rho G(x - x') f(x', t) dx' \quad (3.11)$$

Fornecendo, em termos práticos, a seguinte expressão:

$$\tilde{f}(x, t) = \frac{\overline{\rho f(x, t)}}{\bar{\rho}} \quad (3.12)$$

Neste trabalho, quando uma variável estiver com o sobrescrito “-”, é uma variável filtrada, enquanto se estiver o “~”, indicará uma variável filtrada ponderada pela densidade. As deduções das equações governantes filtradas não são triviais, não sendo apresentadas neste trabalho e podendo ser consultadas em Garnier [57]. Aplicando-se o processo de filtragem ponderada pela densidade à Equação 2.1, obtém-se a seguinte forma da equação da continuidade:

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}}) = 0 \quad (3.13)$$

Para a equação de conservação de *momentum*, Equação 2.7, a aplicação da filtragem resulta em:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}} \tilde{\mathbf{u}}) = \dots \\ \dots - \nabla \bar{p}_d - (\mathbf{g} \cdot \mathbf{x}) \nabla \bar{\rho} + \nabla \cdot \left[\mu \left(\nabla \tilde{\mathbf{u}} + (\nabla \tilde{\mathbf{u}})^T - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}}) \mathbf{I} \right) - \bar{\rho} \mathbf{B} \right] \end{aligned} \quad (3.14)$$

em que \mathbf{B} é o tensor tensão submalha, definido como [57]:

$$\mathbf{B} = \left(\tilde{\tilde{\mathbf{u}}\mathbf{u}} - \tilde{\mathbf{u}}\tilde{\mathbf{u}} \right) + \left(\tilde{\tilde{\mathbf{u}}\mathbf{u}'} + \tilde{\mathbf{u}}'\tilde{\tilde{\mathbf{u}}} \right) + \tilde{\mathbf{u}}'\tilde{\mathbf{u}}' = \mathbf{L} + \mathbf{C} + \mathbf{R} \quad (3.15)$$

Na Equação 3.15, os tensores \mathbf{L} , \mathbf{C} e \mathbf{R} são respectivamente o tensor de Leonard, o tensor cruzado e o tensor de Reynolds submalha. \mathbf{L} pode ser resolvido do campo de

velocidade, e representa a interação das escalas resolvidas de vórtices para produzir turbulência submalha. \mathbf{C} possui o significado físico de relacionar a transferência de energia entre as escalas resolvidas e as escalas submalha. Por fim, \mathbf{R} representa os efeitos das escalas submalha e suas interações [54]. De acordo com Neto [45], utilizando esquemas de transporte convectivo de até segunda ordem, os tensores de Leonard e cruzado podem ser desprezados, sendo necessário apenas modelar o tensor de Reynolds. No entanto, de acordo com Villiers [54], as abordagens que buscam decompor o tensor tensão submalha e modelar seus componentes são pouco convencionais devido às suas incertezas, sendo usualmente o tensor tensão submalha modelado como um todo.

A modelagem do tensor tensão submalha envolve sua divisão em duas partes, a isotrópica e a deviatórica:

$$\mathbf{B} = \mathbf{B}_I + dev(\mathbf{B}) \quad (3.16)$$

em que $dev(\mathbf{B})$ é o operador deviatórico, definido como $dev(\mathbf{B}) = \mathbf{B} - \frac{1}{3}tr(\mathbf{B})\mathbf{I}$. É válido ressaltar que $tr(\mathbf{B})$ é a operação traço, ou seja, o somatório dos elementos da diagonal principal do tensor \mathbf{B} . A parte isotrópica pode ser escrita em função da energia cinética turbulenta submalha, k , um conceito derivado de modelagens RANS para levar em consideração os efeitos de transporte na modelagem da turbulência [6]. A energia cinética turbulenta submalha tem a seguinte definição [54]:

$$k = \frac{1}{2}tr(\mathbf{B}) \quad (3.17)$$

Logo, a parte isotrópica do tensor tensão submalha é escrita como:

$$\mathbf{B}_I = \frac{1}{3}tr(\mathbf{B})\mathbf{I} = \frac{2}{3}k\mathbf{I} \quad (3.18)$$

Baseando-se na hipótese de que a parte deviatórica do tensor tensão submalha \mathbf{B} está localmente alinhada com a parte deviatórica filtrada do tensor taxa de deformação $\tilde{\mathbf{S}}$ [58], é possível escrever a seguinte equação:

$$\mathbf{B} = \frac{2}{3}k\mathbf{I} + dev(\mathbf{B}) = \frac{2}{3}k\mathbf{I} - 2\nu_{esm}dev(\tilde{\mathbf{S}}) \quad (3.19)$$

em que ν_{esm} é a viscosidade cinemática turbulenta na escala submalha, $\nu_{esm} = \mu_{esm}/\rho$, uma propriedade do escoamento que surge da hipótese de Boussinesq para modelar o ten-

sor tensão submalha. A modelagem da viscosidade dinâmica submalha, μ_{esm} , é discutida na Seção 3.2.2.

Utilizando o valor final de \mathbf{B} na Equação 3.14, obtém-se:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}} \tilde{\mathbf{u}}) = & \dots \\
 & \dots - \nabla \bar{p}_d - (\mathbf{g} \cdot \mathbf{x}) \nabla \bar{\rho} + \nabla \cdot \left[\mu_{eff} \left(\nabla \tilde{\mathbf{u}} + (\nabla \tilde{\mathbf{u}})^T - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}}) \mathbf{I} \right) - \frac{2}{3} \bar{\rho} k \mathbf{I} \right] \quad (3.20)
 \end{aligned}$$

em que μ_{eff} é a viscosidade efetiva, definida como:

$$\mu_{eff} = \mu + \mu_{esm} \quad (3.21)$$

A parte isotrópica do tensor tensão submalha na Equação 3.20 normalmente é incorporada na definição de uma pressão modificada. No entanto, de acordo com Erlebacher *et al.* [59], este termo pode ser negligenciado em escoamentos com número de Mach $< 0,4$ e sendo, portanto, não considerado neste trabalho.

Por fim, obtém-se a equação do *momentum* filtrada:

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}} \tilde{\mathbf{u}}) = -\nabla \bar{p}_d - (\mathbf{g} \cdot \mathbf{x}) \nabla \bar{\rho} + \nabla \cdot \left[\mu_{eff} \left(\nabla \tilde{\mathbf{u}} + (\nabla \tilde{\mathbf{u}})^T - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}}) \mathbf{I} \right) \right] \quad (3.22)$$

Aplicando a filtragem à equação de conservação de espécies, Equação 2.8, obtém-se:

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Y}_i}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}} \tilde{Y}_i) = \nabla \cdot (\bar{\rho} \alpha_{eff} \nabla \tilde{Y}_i) + \bar{\omega}_i \quad (3.23)$$

em que α_{eff} é a difusividade térmica efetiva. Nota-se que a hipótese de número de Lewis unitário é válida mesmo em escoamentos turbulentos, sendo possível utilizar a difusividade térmica na equação de conservação de espécies, ao invés do coeficiente de difusividade mássico. A difusividade térmica efetiva possui definição semelhante à viscosidade efetiva:

$$\alpha_{eff} = \alpha + \alpha_{esm} \quad (3.24)$$

Para a equação de conservação da entalpia sensível, Equação 2.13, o processo de filtragem fornece a seguinte expressão:

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{h}_s}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}} \tilde{h}_s) = \frac{D\bar{p}}{Dt} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \alpha_{eff} \nabla \tilde{h}_s) + \bar{q}_c - \nabla \cdot \bar{\mathbf{q}}_R \quad (3.25)$$

Por fim, a equação da pressão fica com aspecto semelhante ao original, resultando em:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\bar{p}_d}{RT} \right) + (\mathbf{g} \cdot \mathbf{x}) \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\bar{\rho}}{RT} \right) + \nabla \cdot \left(\frac{\bar{\rho} \mathbf{H}(\tilde{\mathbf{u}})}{a_p} - \bar{\rho} \frac{(\mathbf{g} \cdot \mathbf{x}) \nabla \bar{\rho}}{a_p} \right) - \nabla \cdot \left(\frac{\bar{\rho}}{a_p} \nabla \bar{p}_d \right) = 0 \quad (3.26)$$

Após estabelecer as equações do LES, resta modelar as variáveis μ_{esm} e α_{esm} necessárias para se obter o fechamento do sistema de equações diferenciais parciais filtradas.

3.2.2 Viscosidade Turbulenta

Assumindo o valor do número de Prandtl turbulento como unitário, $\alpha_{esm} = \nu_{esm} = \mu_{esm}/\rho$, sendo necessário modelar apenas μ_{esm} para o fechamento das equações LES. O modelo de Smagorinsky prevê a seguinte equação [6]:

$$\mu_{esm} = \rho (C_S \Delta)^2 |\bar{\mathbf{S}}| = \rho (C_S \Delta)^2 \sqrt{2\bar{\mathbf{S}} : \bar{\mathbf{S}}} \quad (3.27)$$

em que C_{esm} é a constante de Smagorinsky e $\bar{\mathbf{S}}$ é o tensor taxa de deformação filtrado. Lilly [60] apresentou uma análise teórica da taxa de decaimento dos vórtices isotrópicos na faixa submalha do espectro de energia, o que sugeriu um valor para C_S entre 0,17 e 0,21. Rogallo e Moin [61] no trabalho de revisão de simulação numérica de escoamentos turbulentos indicaram valores entre 0,19 e 0,24, e para o caso de escoamentos internos o valor ideal seria de 0,1.

Os diversos valores possíveis para C_S ilustram que os vórtices na escala submalha não são tão homogêneos e isotrópicos quanto se supunha, e que uma modelagem LES bem-sucedida deve ajustar corretamente a constante C_S ou procurar uma abordagem mais sofisticada [6].

Existem os modelos chamados de dinâmicos, que envolvem o cálculo da constante C_S em tempo de execução, onde a ideia principal é introduzir um filtro $\tilde{\Delta}$ que possui largura maior que o original, ou seja, $\tilde{\Delta} > \Delta$, onde usualmente $\tilde{\Delta} = 2\Delta$ [54]. Um modelo dinâmico de destaque é o modelo dinâmico de Germano *et al.* [62], que foi posteriormente revisado por Lilly [63] dando origem ao modelo dinâmico de Smagorinsky-Lilly. Este

filtro é aplicado nas equações filtradas de conservação (resultando em dupla filtragem), resultando no valor de C_S que será aplicado na Equação 3.27 [64]. Um exemplo de sua aplicação à combustão é o estudo apresentado por Di Sarli *et al.* [65] discorrendo sobre o efeito da modelagem reacional estar acoplada ao modelo de turbulência, utilizando o modelo dinâmico de Smagorinsky-Lilly para chamas pré-misturadas. O modelo de vórtice a uma equação envolve a resolução de uma equação diferencial a mais para resolver a viscosidade turbulenta, sendo o utilizado neste trabalho e descrito na próxima seção.

3.2.3 Modelo de Viscosidade Turbulenta a Uma Equação

No modelo de vórtice a uma equação (*One Equation Eddy*) substitui-se o termo $\Delta\sqrt{2\bar{\mathbf{S}}:\bar{\mathbf{S}}}$ da Equação 3.27 por outro mais representativo das velocidades da escala submalha, \sqrt{k} , onde k é a energia cinética turbulenta. Sendo assim, a equação para a viscosidade turbulenta submalha tem o seguinte aspecto:

$$\mu_{esm} = \bar{\rho}C_k\Delta\sqrt{k} \quad (3.28)$$

Para a resolução de k , é preciso definir uma nova equação. Os modelos a uma equação utilizam uma equação de transporte para definir o seu valor, sendo usualmente empregada a Equação 3.29. Villiers [54] apresenta este modelo de equação para escoamentos incompressíveis, para este trabalho, no entanto, é utilizada a versão para casos compressíveis:

$$\frac{\partial\bar{\rho}k}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho}\tilde{\mathbf{u}}k) = \nabla \cdot (\mu_{eff}\nabla k) - \bar{\rho} \mathbf{B} : \tilde{\mathbf{S}} - C_e \bar{\rho} \frac{k^{3/2}}{\Delta} \quad (3.29)$$

Ou ainda, calculando o termo $-\bar{\rho} \mathbf{B} : \tilde{\mathbf{S}}$, obtém-se a equação para a energia cinética turbulenta utilizada neste trabalho:

$$\frac{\partial\bar{\rho}k}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho}\tilde{\mathbf{u}}k) = \nabla \cdot (\mu_{eff}\nabla k) + 2\mu_{esm} \left(\nabla\tilde{\mathbf{u}} : dev \left(\tilde{\mathbf{S}} \right) \right) - \frac{2}{3}\bar{\rho} k \nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}} - C_e \bar{\rho} \frac{k^{3/2}}{\Delta} \quad (3.30)$$

Na Equação 3.30 os termos $2\mu_{esm} \left(\nabla\tilde{\mathbf{u}} : dev \left(\tilde{\mathbf{S}} \right) \right)$ e $-\frac{2}{3}\bar{\rho} k \nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}}$ representam a taxa de produção de energia cinética turbulenta, enquanto que o termo restante $-C_e\bar{\rho} k^{3/2}/\Delta$ é responsável pela taxa de dissipação desta energia. É possível definir a dissipação turbulenta ϵ a partir deste último termo, onde $\epsilon = C_e k^{3/2}/\Delta$. Convém salientar que neste

modelo, apesar de ser mais refinado que os modelos a zero-equações, possui ainda duas constantes a serem definidas, C_k e C_e . Observa-se que o modelo padrão de Smagorinsky é recuperado do modelo de uma equação se a produção se igualar a dissipação, sendo possível fazer a correspondência entre as constantes. Desta forma Xiao e Jenny, utilizando o valor padrão para a constante de Smagorinsky de $C_S = 0,167$ e empregando a relação $C_S = C_k^{3/4}/C_e^{1/4}$, expõem os valores padrão de $C_k = 0,094$ e $C_e = 1,048$ [66]. Estes são os valores já incluídos no OpenFOAM e foram utilizadas neste trabalho.

3.2.4 Modelo Reacional de Dissipação de Vórtices

Definido o modelo de turbulência, é possível escolher qual é o tratamento reacional mais adequado. Como comentado na Seção 2.1.3, para uma chama de metano, a taxa de reação $\overline{\omega_i}$ será função apenas da taxa de mistura entre as espécies, assumindo como hipótese que a cinética de reação é infinitamente rápida. Neste caso, dois modelos são os mais empregados em códigos computacionais, o Modelo de Quebra de Vórtices (*Eddy Break-Up Model - EBM*) e o Modelo de Dissipação de Vórtices (*Eddy Dissipation Model - EDM*), descritos em Yeoh e Yuen [2].

O EBM foi introduzido por Spalding [67] baseando-se no princípio de que a taxa de reação pode ser modelada utilizando-se apenas a flutuação de concentração das espécies e a taxa de quebra de vórtices. No entanto, a modelagem da flutuação da concentração é complexa, e requer mais uma equação de transporte para definir este termo, como exposto em Yeoh e Yuen [2]. Neste trabalho, é utilizado o EDM.

Howard e Toporov [28] apresentam uma revisão sobre modelos reacionais aplicados a simulação de grandes escalas, focando no estudo de Modelo de Dissipação de Vórtices acoplado com o Modelo de Arrhenius. Utilizou três diferentes abordagens LES, o Modelo de Smagorinsky, o Modelo WALE (*Wall-Adapting Local Eddy Viscosity*) e o Modelo Dinâmico de Smagorinsky. Também descreve em seu trabalho os modelos reacionais de Arrhenius e o Modelo de Dissipação de Vórtices aplicado para abordagens RANS e LES, sendo esta a modelagem utilizada neste trabalho.

Magnussen e Hjertager [68] introduziram um modelo alternativo de combustão no qual considera-se a taxa de reação governada pela média das concentrações das espécies, e não das flutuações das espécies. Desta forma, sabendo que o sistema trata-se de uma chama não pré-misturada, e adaptando a taxa de reação para a abordagem LES, tem-se a seguinte expressão [2]:

$$\overline{\omega_{fu}} = C_r \bar{\rho} \frac{\epsilon}{k} \min \left[\widetilde{Y_{fu}}, \frac{\widetilde{Y_{ox}}}{s} \right] \quad (3.31)$$

em que C_r é uma constante do modelo, $\overline{\omega_{fu}}$ é a taxa de reação da espécie combustível (no caso CH_4), $\widetilde{Y_{fu}}$ é a concentração da espécie combustível, $\widetilde{Y_{ox}}$ é a concentração de oxigênio e s é a razão estequiométrica entre as espécies $\widetilde{Y_{ox}}$ e $\widetilde{Y_{fu}}$. Nota-se que a fração k/ϵ é a escala de tempo da turbulência, logo, quanto menor for esta escala, mais rápido se dará a mistura entre os reagentes e maior será a taxa de reação.

As taxas de reação para as outras espécies são facilmente obtidas a partir de $\overline{\omega_{fu}}$, sabendo que:

$$\overline{\omega_i} = \nu_i \overline{\omega_{fu}} \quad (3.32)$$

em que ν_i é o coeficiente estequiométrico da espécie i . A constante C_r ainda precisa ter o seu valor definido, e é utilizado o valor recomendado por Magnussen e Hjertager [68], onde $C_r = 4$. Ressalta-se que com $\overline{\omega_{fu}}$ é possível obter $\overline{q_c}$ através de:

$$\overline{q_c} = \Delta H_c^\circ \overline{\omega_{fu}} \quad (3.33)$$

Como apresentado na Seção 2.1.4, $\Delta H_c^\circ = 50144 \text{ kJ/kgCH}_4$ segundo Rogers e Mayhew [33].

3.3 Cálculo da Radiação Térmica

A Equação 2.49 representa uma dificuldade adicional na resolução da equação da energia. Isto se deve pelo cálculo da irradiância total G que depende da integração da intensidade radiante espectral I_λ em todo ângulo sólido Ω e em todo espectro de onda λ . Além disso, é necessário resolver a Equação 2.44 (RTE) para obter I_λ . Estas dificuldades

representam desafios de modelagem, já que o cálculo de I_λ precisa ser ao mesmo tempo preciso e eficiente computacionalmente. Modest [41] e Siegel [69] apresentam revisões de algoritmos numéricos desenvolvidos para este cálculo.

Os métodos principais para resolução da RTE são: método das ordenadas discretas (*Discrete Ordinate Method - DOM*), método dos harmônicos esféricos ou aproximação P_N , método de transferência discreta de radiação por raio traçador (*Discrete Transfer Ray tracing Method - DTRM*) e método de Monte Carlo. Todos os métodos possuem vantagens e inconvenientes, cabendo ao desenvolvedor a escolha mais adequada. O método de Monte Carlo é reconhecidamente o mais preciso, mas requer longo tempo de processamento e é incompatível com a maioria dos códigos de CFD. Já a técnica P_N é facilmente implementada em CFD, mas possui acurácia reduzida devido à série de suposições consideradas na modelagem do código e deve ser usado apenas em casos específicos. O DOM é mais preciso que o P_N , e apesar de possuir maior custo de processamento não é proibitivo computacionalmente [70]. O DTRM é, assim como o método de Monte Carlo, um método que usa raios traçadores e apesar de também possuir alto nível de precisão é difícil de ser aplicado em CFD.

3.3.1 Método das Ordenadas Discretas baseado em Volumes Finitos

O método das ordenadas discretas baseado em volumes finitos (*Finite Volume Discrete Ordinate Method - FVDOM*), também chamado de método dos volumes finitos, é uma evolução natural do DOM, tem sido empregada amplamente em códigos CFD e é o método utilizado neste trabalho. Modest [41] apresenta uma descrição detalhada do DOM. Será exposta neste trabalho a abordagem apresentada por Mangani [3]. Este método consiste em discretizar o domínio radiante em um determinado número de raios, alocados de maneira que possam cobrir a maior área possível do domínio. Desta forma, é necessário dividir a área do domínio esférico em diversos ângulos sólidos Ω^m , e calcular a intensidade de radiação térmica nos raios que atravessam estes ângulos, para depois somá-los e obter

a irradiância total G .

Como é um método baseado em volumes finitos, é necessário integrar a Equação 2.44 (RTE) em todo espaço. Integrando o termo $\mathbf{s} \cdot \nabla I_\lambda$ no volume de controle V , obtém-se:

$$\int_V \mathbf{s} \cdot \nabla I_\lambda dV = \int_V \nabla \cdot (\mathbf{s} I_\lambda) dV - \int_V I_\lambda \nabla \cdot (\mathbf{s}) dV \quad (3.34)$$

O segundo termo do lado direito da Equação 3.34 é nulo, pois o vetor \mathbf{s} depende das coordenadas angulares que são independentes das coordenadas espaciais. Aplicando o teorema de Gauss, é possível transformar a integral no volume em integral de área, resultando a seguinte expressão:

$$\int_V \nabla \cdot (\mathbf{s} I_\lambda) dV = \int_\Gamma I_\lambda \mathbf{s} \cdot \mathbf{n} d\Gamma \quad (3.35)$$

em que Γ é a superfície do volume de controle V , e \mathbf{n} é o vetor normal à superfície Γ . Logo, integrando a Equação 2.44 no volume de controle V e no ângulo sólido Ω^m :

$$\int_{\Omega^m} \int_\Gamma I_\lambda \mathbf{s} \cdot \mathbf{n} d\Gamma d\Omega = \int_{\Omega^m} \int_V \kappa_\lambda I_{b\lambda} dV d\Omega - \int_{\Omega^m} \int_V \kappa_\lambda I_\lambda dV d\Omega \quad (3.36)$$

Assumindo que a intensidade de radiação é constante em cada face do volume de controle, e que o valor em seu interior também é constante, sendo igual ao centroide do volume de controle, a Equação 3.36 torna-se:

$$\sum_k I_{\lambda k}^m (\mathbf{D}^m \cdot \mathbf{n}_k) A_k = \kappa_\lambda (I_{\lambda bp}^m - I_{\lambda p}^m) V \Omega^m \quad (3.37)$$

em que $I_{\lambda k}^m$ é a intensidade radiativa espectral através da face k , de área A_k , na m -ésima direção, enquanto que $I_{\lambda bp}^m$, $I_{\lambda p}^m$ e $\kappa_{\lambda p}$ representam respectivamente a intensidade de radiação espectral de um corpo negro no centroide p e na direção m , a intensidade de radiação espectral em p e em m , e o coeficiente de absorção no centroide. O modelo de emissão e absorção utilizado não leva em consideração as variações espectrais, sendo empregada apenas a equação global através da uso do Coeficiente de Absorção Médio de Planck, κ_p , reduzindo a Equação 3.37 a:

$$\sum_k I_k^m (\mathbf{D}^m \cdot \mathbf{n}_k) A_k = \kappa_p (I_{bp}^m - I_p^m) V \Omega^m \quad (3.38)$$

O modelo do Coeficiente de Absorção Médio de Planck é apresentado na Seção 3.3.3. \mathbf{D}^m é o vetor apontando em uma direção média dentro de um elemento de ângulo sólido Ω^m ,

definido como:

$$\mathbf{D}^m = \int_{\Omega^m} \mathbf{s} d\Omega \quad (3.39)$$

A diferenciação entre o DOM e o FVDOM se dá neste ponto, onde para o DOM o vetor \mathbf{D}^m é aproximado por quadraturas, enquanto que para o FVDOM ele é discretizado em relações exatas [3]. A dedução deste versor é apresentada em Mishra e Roy [7] e será apresentada em seguida.

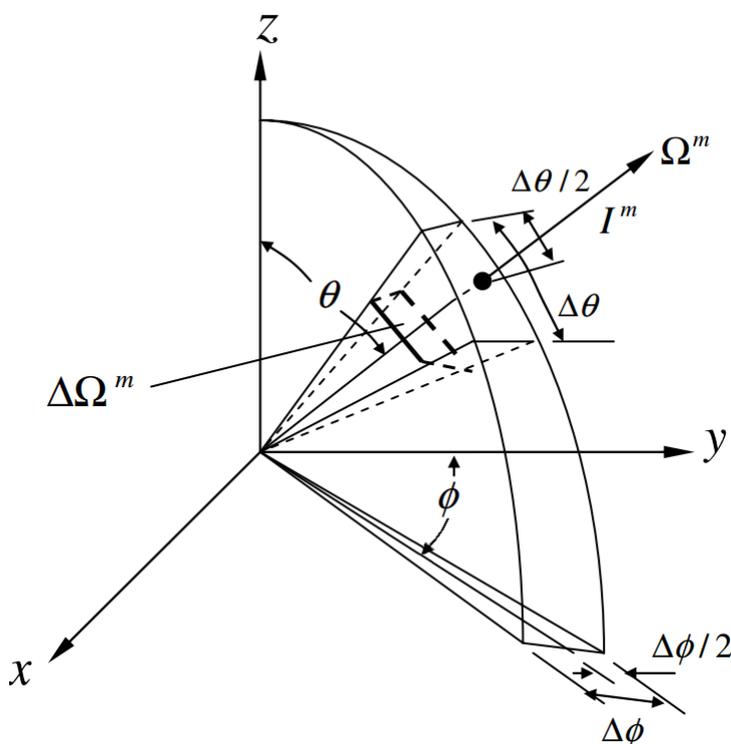


Figura 3.5: Sistema de coordenadas para discretização angular - adaptado de Mishra e Roy [7].

De acordo com a Figura 3.5, o ângulo azimute ϕ parte do eixo Y, enquanto que o ângulo polar θ parte do eixo Z. Logo, em coordenadas esféricas, o vetor \mathbf{s} pode ser escrito como:

$$\mathbf{s} = (\sin\theta \sin\phi, \sin\theta \cos\phi, \cos\theta) \quad (3.40)$$

Lembrando da definição de um ângulo sólido diferencial, $d\Omega = \sin\theta d\theta d\phi$, e que o domínio de integração é:

$$\Omega^m = \left[\phi^m - \frac{\Delta\phi^m}{2}, \phi^m + \frac{\Delta\phi^m}{2} \right] \times \left[\theta^m - \frac{\Delta\theta^m}{2}, \theta^m + \frac{\Delta\theta^m}{2} \right] \quad (3.41)$$

leva a calcular o vetor \mathbf{D}^m como:

$$\mathbf{D}^m = \int_{\phi^m - \frac{\Delta\phi^m}{2}}^{\phi^m + \frac{\Delta\phi^m}{2}} \int_{\theta^m - \frac{\Delta\theta^m}{2}}^{\theta^m + \frac{\Delta\theta^m}{2}} \mathbf{s} \, \text{sen}\theta \, d\theta \, d\phi \quad (3.42)$$

Integrando o vetor \mathbf{s} , obtém-se a expressão final para o vetor \mathbf{D}^m :

$$\begin{aligned} \mathbf{D}^m = & \begin{pmatrix} \text{sen } \phi^m \text{ sen } \left(\frac{\Delta\phi^m}{2} \right) (\Delta\theta^m - \cos(2\theta^m)), \\ \cos \phi^m \text{ sen } \left(\frac{\Delta\phi^m}{2} \right) (\Delta\theta^m - \cos(2\theta^m)), \\ \left(\frac{\Delta\phi^m}{2} \right) \text{sen } 2\theta^m \text{ sen } \Delta\phi^m \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (3.43)$$

Após o cálculo do vetor \mathbf{D}^m , ainda é necessário integrar o ângulo sólido $d\Omega^m$ no domínio representado pela Equação 3.41 para tornar possível a resolução da Equação 3.38. Realizando a integral, a expressão para o ângulo sólido Ω^m obtida é:

$$\Omega^m = 2 \text{ sen } \theta^m \text{ sen } \left(\frac{\Delta\theta^m}{2} \right) \Delta\phi^m \quad (3.44)$$

As Equações 3.43 e 3.44 definem variáveis utilizadas na resolução da Equação 3.38, necessária para obter a intensidade de radiação térmica I_p^m .

Após definir o número de direções m , é necessários alocá-las preferencialmente de maneira simétrica no espaço. Esta alocação é discutida em Modest [41] e Siegel [69]. Calculando I_p^m para todos os volumes de controle, é possível obter a irradiância total G_p utilizando a Equação 2.31 na forma:

$$G_p = \int_{4\pi} I_p(\theta, \phi) \, d\Omega \approx \sum_{k=1}^{M_\phi} \sum_{l=1}^{M_\theta} I_p^m(\theta_l^m, \phi_k^m) 2 \text{ sen } \theta_l^m \text{ sen } \left(\frac{\Delta\theta_l^m}{2} \right) \Delta\phi_k^m \quad (3.45)$$

em que M_ϕ e M_θ representam os números de intervalos nos ângulos azimute ($0 \leq \phi \leq 2\pi$) e polar ($0 \leq \theta \leq \pi$) considerados. Dessa forma, o número total de direções m será $M_\phi M_\theta$. A última variável que falta para fechar o sistema de equações é o coeficiente de absorção e emissão. Seu cálculo não é trivial, e métodos para sua obtenção são discutidos em seguida.

3.3.2 Modelos de Absorção e Emissão

Diferentes categorias de modelos para estabelecer o coeficiente de absorção em meios que absorvem e emitem foram desenvolvidas para aplicações em CFD. Nota-se que as espécies mais importantes no cálculo, considerando o sistema em análise, são CH_4 , CO_2 e H_2O . As moléculas de N_2 e O_2 possuem efeito negligenciável, já que são moléculas diatômicas e não apresentam fortes linhas de emissão na região de infravermelho do espectro [70]. As três principais categorias de métodos são os métodos linha por linha, modelos de banda e modelos globais.

O método linha por linha resolve a equação do transporte radiante considerando toda a variação espectral do coeficiente de absorção para diferentes temperaturas e concentrações encontradas nas misturas de gases resultantes da combustão [30]. Este método é o mais preciso, porém proibitivo computacionalmente em aplicações como combustão devido ao excessivo número de equações necessário para descrever todo o espectro dos gases.

Já os modelos de banda baseiam-se no cálculo dos comprimentos de onda mais representativos apenas, e incluem métodos como o modelo estatístico de Goody para bandas estreitas, modelo exponencial de Edwards para bandas largas e distribuição-K [70].

Os modelos globais, a princípio, não realizam diferenciação por comprimentos de onda. Devido à esta simplificação, é a categoria de métodos que possui menor custo computacional, sendo usualmente empregados em softwares comerciais de CFD. Entre os principais cita-se o modelo de soma ponderada de gases cinzas (*Weighted Sum of Gray-Gases Method - WSGGM*), modelo de soma ponderada de gases cinzas baseado nas linhas espectrais (*Spectral Line Weighted Sum of Gray-Gases Method*), método de distribuição-K correlacionado para espectro completo (*Full Spectrum Correlated-K Distribution - FSK*) e método função distribuição de absorção (*Absorption Distribution Function Method - ADF*) [70]. O modelo utilizado neste trabalho é um modelo global que emprega o coeficiente de absorção médio de Planck, descrito em seguida.

3.3.3 Coeficiente de Absorção Médio de Planck

Como apresentado em Modest [41], o coeficiente de absorção médio de Planck tem a seguinte definição:

$$\kappa_p \equiv \frac{\int_0^\infty I_{b\lambda} \kappa_\lambda d\lambda}{\int_0^\infty I_{b\lambda} d\lambda} \quad (3.46)$$

No entanto, é preciso realizar aproximações para que o κ_p possa ser utilizado na RTE. Lembrando a equação de fluxo radiante:

$$\nabla \cdot \mathbf{q}_R = \int_0^\infty \nabla \cdot \mathbf{q}_{R\lambda} d\lambda = \int_0^\infty \kappa_\lambda (4\pi I_{b\lambda} - G_\lambda) d\lambda \quad (2.49)$$

É possível dividir o lado direito da Equação 2.49 em duas integrais, gerando a seguinte expressão:

$$\nabla \cdot \mathbf{q}_R = \int_0^\infty \kappa_\lambda 4\pi I_{b\lambda} d\lambda - \int_0^\infty \kappa_\lambda G_\lambda d\lambda \quad (3.47)$$

O primeiro termo do lado direito da Equação 3.47 pode ser facilmente integrado, resultando em:

$$\nabla \cdot \mathbf{q}_R = \kappa_p 4\pi I_b - \int_0^\infty \kappa_\lambda G_\lambda d\lambda \quad (3.48)$$

O segundo termo deve ser integrado baseando-se na aproximação de meio opticamente fino, onde cada ponto do domínio tem uma visão isotrópica da incidência de radiação do contorno [71]. Neste caso, a irradiância é aproximada por:

$$G_\lambda = \int_{4\pi} I_{b\lambda}(\mathbf{r}_c) d\Omega = 4\pi I_{b\lambda}(\mathbf{r}_c) \quad (3.49)$$

em que \mathbf{r}_c é o vetor posição do contorno do domínio, ou seja, a irradiância é avaliada apenas no contorno. Desta forma, o segundo termo do lado direito da Equação 3.47 pode ser escrito como:

$$\int_0^\infty \kappa_\lambda G_\lambda d\lambda = \kappa_p 4\pi \int_0^\infty I_{b\lambda}(\mathbf{r}_c) d\lambda = \kappa_p G \quad (3.50)$$

Portanto, a equação de fluxo radiante total é expressa como:

$$\nabla \cdot \mathbf{q}_R = \kappa_p (4\pi I_b - G) \quad (3.51)$$

Ressalta-se que para a obtenção da Equação 3.51 a aproximação de meio opticamente fino foi empregada, com a irradiância sendo avaliada apenas no contorno. Desta forma, o coeficiente médio de Planck só é recomendado para utilização em meio opticamente fino, e seu uso em meios com espessura óptica pode produzir resultados não adequados. Porém, há forte absorção do CO_2 na banda $4,3 \mu\text{m}$ e comumente se deseja levar em consideração a absorção da chama para cálculos mais precisos. Para isso, o modelo radiante FVDM utiliza a Equação 3.51 avaliando a irradiância localmente, e não apenas no contorno. Esta extrapolação do modelo precisa ser verificada, pois se a chama apresentar grande espessura óptica, o coeficiente médio de Planck torna-se impreciso.

Percebe-se ainda que κ_p necessita de resolução numérica para ser calculado. O RADCAL é um código numérico desenvolvido pelo NIST (*National Institute of Standards and Technology*) por Grosshandler [72] e calcula o coeficiente de absorção médio de Planck a partir de modelo de bandas estreitas em combinação com propriedades espectrais e aproximações teóricas das bandas de vibração/rotação. Barlow *et al.* [8], utilizando resultados do RADCAL, obtiveram expressões polinomiais para κ_p em função da temperatura, como pode ser verificado na Figura 3.6 para os coeficientes médios das espécies CO_2 , H_2O e CH_4 .

O polinômio obtido para as espécies CO_2 e H_2O é da seguinte forma:

$$\kappa_p = c_0 + c_1 \left(\frac{1000}{T} \right) + c_2 \left(\frac{1000}{T} \right)^2 + c_3 \left(\frac{1000}{T} \right)^3 + c_4 \left(\frac{1000}{T} \right)^4 + c_5 \left(\frac{1000}{T} \right)^5 \quad (3.52)$$

Os coeficientes da Equação 3.52 utilizados são apresentados na Tabela 3.1, e são expostos pelo *Sandia National Laboratories* em *International Workshop on Measurement and Computation of Turbulent Nonpremixed Flames* [73].

Para o CH_4 , o polinômio tem o formato apresentado na Equação 3.53, e os coeficientes utilizados são apresentados na Tabela 3.2, também retirados de [73].

$$\kappa_p = c_0 + c_1 T + c_2 T^2 + c_3 T^3 + c_4 T^4 \quad (3.53)$$

O valor de κ_p para a mistura dos gases é obtido através da ponderação entre as pressões

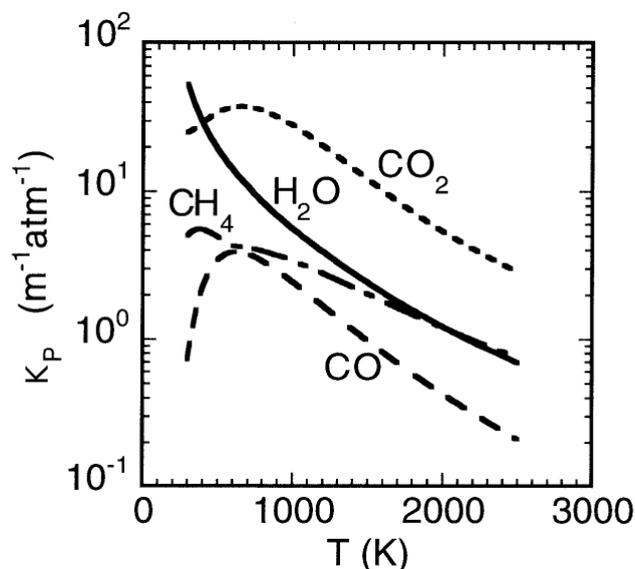


Figura 3.6: Dependência do Coeficiente Médio de Planck (determinados usando o RAD-CAL) para as espécies CO_2 , H_2O , CH_4 e CO com a temperatura - adaptado de Barlow *et al.* [8].

parciais de cada espécie participante na radiação, de maneira que:

$$\kappa_p = p_{CO_2} \kappa_{pCO_2} + p_{H_2O} \kappa_{pH_2O} + p_{CH_4} \kappa_{pCH_4} \quad (3.54)$$

Como κ_p é um valor médio para todo o espectro de onda, não é necessário realizar cálculos espectrais, de maneira que apenas as equações totais são resolvidas neste trabalho. É importante notar que a Equação 3.54 não considera a superposição de bandas. Consequentemente, qualquer auto-absorção é desconsiderada e é gerado maior emissão para uma chama de metano, que possui superposição na banda $2,7 \mu\text{m}$ entre CO_2 e H_2O [41]. Ao fim deste capítulo, se consolida o embasamento teórico necessário para a compreensão da modelagem numérica utilizada neste trabalho.

Tabela 3.1: Coeficientes dos polinômios de κ_p para H_2O e CO_2

<i>Coeficiente</i>	H_2O	CO_2
c_0	-0,23093	18,741
c_1	-1,12390	-121,310
c_2	9,41530	273,500
c_3	-2,99880	-194,050
c_4	0,51382	56,310
c_5	$-1,86840 \times 10^{-05}$	-5,8169

Tabela 3.2: Coeficientes do polinômio de κ_p para CH_4

<i>Coeficiente</i>	CH_4
c_0	6,6334
c_1	-0,0035686
c_2	$1,6682 \times 10^{-08}$
c_3	$2,5611 \times 10^{-10}$
c_4	$2,6558 \times 10^{-14}$

Capítulo 4

Metodologia

Com o conhecimento das equações governantes utilizadas para modelar a combustão, assim como suas hipóteses, e dos métodos matemáticos empregados para resolvê-las, pode-se verificar como analisar os dados experimentais obtidos da literatura para validação do problema em questão. Objetiva-se neste capítulo descrever o código FireFOAM assim como a abordagem empregada no tratamento das simulações fluidodinâmicas.

4.1 OpenFOAM

Esta seção tem por finalidade apresentar o OpenFOAM (*Open Source Field Operation and Manipulation*), além de fazer uma breve introdução à linguagem de programação C++ e demonstrar o algoritmo FireFOAM, utilizado para resolver as equações diferenciais parciais. O OpenFOAM é um *software* livre, sem qualquer custo para o usuário, desenvolvido em C++ para aplicações em CFD utilizando o ambiente Linux. Utiliza o método dos volumes finitos, possui suporte para malhas não-estruturadas e é altamente escalável em computação paralela. Tem ganhado crescente interesse da comunidade científica devido ao fato de possuir código aberto, permitindo que o próprio usuário, com o conhecimento dos métodos empregados, da física do problema e técnicas de programação, atue como desenvolvedor.

4.1.1 Interface C++

O OpenFOAM é primeiramente uma biblioteca C++, utilizada para criar executáveis, conhecidos como aplicações. Duas categorias de aplicações são utilizadas: *solvers*, usados para resolver um problema específico da mecânica do contínuo; e *utilities*, que são ferramentas desenvolvidas para realizar tarefas que envolvem a manipulação de dados [9]. O OpenFOAM possui ainda ambientes de pré e pós-processamento. A Figura 4.1 apresenta a estrutura do programa.

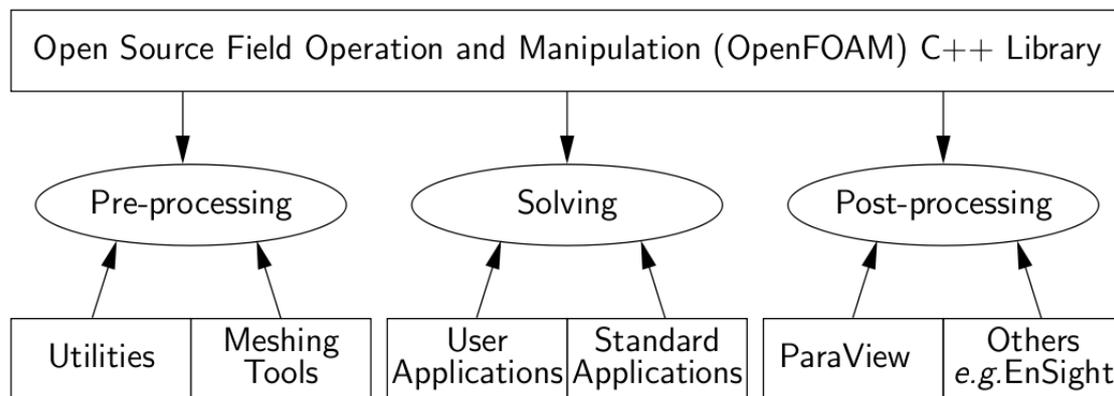


Figura 4.1: Visão geral da estrutura do OpenFOAM - retirado de [9].

A linguagem C++ possui paradigmas de programação que auxiliam na elaboração do código do OpenFOAM, e o objetivo desta seção é mostrar de maneira resumida as principais. Para um entendimento mais completo da linguagem C++, recomenda-se a referência Yang [74]. Um paradigma importante desta linguagem é a orientação a objetos, que permite o tratamento dos dados como elementos do programa, não sendo permitidos alterá-los livremente. Os objetos são, então, associados a funções que os acessam e os operam, protegendo-os de modificações por funções externas, facilitando a reusabilidade do código por usuários diferentes [75].

Outro paradigma essencial ao entendimento da linguagem C++ é a abstração, característica que permite representar aspectos essenciais do código sem incluir detalhes de programação. Utilizando este conceito, classes são definidas como uma lista de atributos abstratos. Classes podem armazenar uma coleção de elementos de diferentes tipos, armazenamento que é conhecido como encapsulamento.

Classes herdam as propriedades de outra classe. Mangani [3] mostra uma metáfora como exemplo, em que, considerando a classe *ser humano*, ela teria características específicas (dois braços, inteligência, etc.) além de outras derivadas da classe *mamíferos* (sangue quente, por ex.). Assim como a classe *mamíferos* herda características de outras classes como *vertebrados* ou *animais*. Logo, é possível criar novas classes a partir das já existentes, mas estas terão as características das classes predecessoras, assim como as suas novas características estabelecidas.

Por fim, o polimorfismo é a capacidade de usar um operador ou uma função de diferentes maneiras, permitindo diferentes significados de acordo com o contexto. É extensivamente utilizado na implementação da herança do código [75].

Como exemplo, no OpenFOAM o campo de velocidade é expresso pelo símbolo \mathbf{U} . No caso, a velocidade é um campo vetorial, que é representado pela classe *vectorField*. Logo, a velocidade \mathbf{U} é um objeto da classe *vectorField*. A própria classe *vectorField* pode ser derivada das classes *vector* e *Field* herdando propriedades destas duas classes.

Assim, para descrever as equações no OpenFOAM são empregadas as classes, permitindo uma sintaxe clara, que se assemelha bastante às próprias equações diferenciais parciais. Por exemplo, a equação do *momentum* para fluidos newtonianos incompressíveis:

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{U}\mathbf{U} - \nabla \cdot \nu \nabla \mathbf{U} = -\nabla p \quad (4.1)$$

é representada pelo seguinte código:

```
solve
(
    fvm::ddt(U)
  + fvm::div(phi,U)
  - fvm::laplacian(nu,U)
  ==
  - fvc::grad(p)
);
```

onde ϕ é fluxo através das faces do volume de controle, neste caso, $\phi = \mathbf{U} \cdot \mathbf{S}_f$, sendo \mathbf{S}_f o vetor área da face f . Este exemplo demonstra uma das grandes vantagens oferecidas pelo OpenFOAM, a clareza na leitura e compreensão do código, o que permite ao usuário com conhecimento básicos de C++ sua utilização ou até mesmo desenvolvimento, concentrando seus esforços na física do problema ao invés da programação pura.

4.1.2 Algoritmo FireFOAM

O FireFOAM é um código de CFD com abordagem LES para modelagem de chama e supressão de fogo para uso em escoamentos a baixos números de Mach, desenvolvido pela empresa de análise de risco FM Global®. Possui três versões consolidadas, apresentadas abaixo:

- Versão 1.0: Lançada em 2009 e desenvolvida para o OpenFOAM 1.6, esta versão emprega a equação da energia em termos de entalpia total e o modelo de fração de mistura para o transporte de espécies. Possui suporte para radiação e pirólise.
- Versão 1.2: Lançada em 2011 e desenvolvida para o OpenFOAM 1.7.x, nesta versão ocorre a modificação da equação da energia, que passa a ser tratada em termos de entalpia sensível. Assim como na versão predecessora, utiliza o modelo de fração de mistura e possui suporte para pirólise e radiação, com o adicional de que é apresentado seu primeiro modelo absorção e emissão para fuligem (*soot*).
- Versão 1.4: Também lançada em 2011 e desenvolvida para o OpenFOAM 1.7.x, esta versão é a primeira a utilizar uma equação de transporte para cada espécie modelada, ao invés de um modelo de fração de mistura. Além de herdar as implementações anteriores, inicia o desenvolvimento de um método lagrangeano para modelagem de supressão de fogo por injeção de água através de bicos aspersores, e de um modelo de película de superfície para tratamento da mudança de fase líquido-vapor.

Optou-se neste trabalho abordar o caso proposto com a última versão do FireFOAM. É conveniente lembrar aqui as principais equações implementadas em seu código, já pre-

viamente deduzidas nos Capítulos 2 e 3.

- Equação da continuidade:

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}}) = 0 \quad (3.13)$$

- Equação de conservação do *momentum*:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}} \tilde{\mathbf{u}}) = & \dots \\ & \dots - \nabla \bar{p}_d - (\mathbf{g} \cdot \mathbf{x}) \nabla \bar{\rho} + \nabla \cdot \left[\mu_{eff} \left(\nabla \tilde{\mathbf{u}} + (\nabla \tilde{\mathbf{u}})^T - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}}) \mathbf{I} \right) \right] \end{aligned} \quad (3.22)$$

- Equação de conservação de espécies:

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Y}_i}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}} \tilde{Y}_i) = \nabla \cdot (\bar{\rho} \alpha_{eff} \nabla \tilde{Y}_i) + \bar{\omega}_i \quad (3.23)$$

- Equação de conservação da energia:

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{h}_s}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}} \tilde{h}_s) = \frac{D \bar{p}}{Dt} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \alpha_{eff} \nabla \tilde{h}_s) + \bar{q}_c - \nabla \cdot \bar{\mathbf{q}}_R \quad (3.25)$$

- Equação da pressão:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\bar{p}_d}{R \tilde{T}} \right) + (\mathbf{g} \cdot \mathbf{x}) \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\bar{\rho}}{R \tilde{T}} \right) + \dots \\ \dots \nabla \cdot \left(\bar{\rho} \frac{\mathbf{H}(\tilde{\mathbf{u}})}{a_p} - \bar{\rho} \frac{(\mathbf{g} \cdot \mathbf{x}) \nabla \bar{\rho}}{a_p} \right) - \nabla \cdot \left(\frac{\bar{\rho}}{a_p} \nabla \bar{p}_d \right) = 0 \end{aligned} \quad (3.26)$$

- Equação de conservação da energia cinética turbulenta:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\rho} k}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}} k) = & \dots \\ & \dots \nabla \cdot (\mu_{eff} \nabla k) + 2 \mu_{esm} \left(\nabla \tilde{\mathbf{u}} : dev(\tilde{\mathbf{S}}) \right) - \frac{2}{3} \bar{\rho} k \nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}} - C_e \bar{\rho} \frac{k^{3/2}}{\Delta} \end{aligned} \quad (3.30)$$

As etapas de resolução do algoritmo são descritas em seguida. É válido ressaltar que o FireFOAM emprega a técnica PIMPLE para o acoplamento pressão-velocidade.

1. Avanço do passo de tempo;
2. Resolve-se a equação da continuidade, com valores da iteração anterior ou iniciais, para se obter uma estimativa para a densidade;
3. Etapa de *momentum predictor*, onde se resolve a equação de conservação de *momentum* com valores antigos de pressão e densidade;
4. Resolução das equações de conservação de espécies, entalpia e de transporte de energia radiante, além de atualização de propriedades termodinâmicas (viscosidade, difusividade térmica, etc.). Nesta etapa também são atualizados os valores de $\bar{\omega}_i$, \bar{q}_c , e $\nabla \cdot \bar{q}_R$;
5. Novo cálculo da densidade a partir da equação dos gases;
6. Resolução da equação de pressão e da continuidade;
7. Correção explícita da velocidade, usando o novo valor do campo de pressão na equação semi-discretizada do *momentum*;
8. Retorna-se ao item 5 até que o número de *loops* internos seja atingido;
9. Resolução da equação de energia cinética turbulenta e atualização das variáveis de turbulência (ϵ , μ_{esm} , etc);
10. Retorna-se ao item 3 até que o número de *loops* externos seja atingido;
11. Nova atualização dos valores de densidade a partir da equação dos gases;
12. Retorna-se à primeira etapa caso não tenha chegado ao último passo de tempo;

Com o conhecimento do código numérico implementado para modelagem de chama, elaborou-se uma estratégia de simulações para que fossem atingidos valores refinados de variáveis importantes, como concentração e velocidade, e que pudesse ser feita a comparação dos valores simulados com os dados experimentais do problema. O experimento, disponível na literatura, também é apresentado na sequência.

4.2 Estudo de Caso

Por ser tratar de um código ainda em desenvolvimento, o FireFOAM necessita de uma etapa de validação, que é verificar se os valores simulados estão de acordo com os dados medidos de um caso real (experimento). A fim de se realizar tal procedimento para o código FireFOAM, foi escolhido um caso da literatura relativamente simples, em que as hipóteses assumidas possam ser empregadas com baixo prejuízo de precisão.

4.2.1 Experimento Analisado

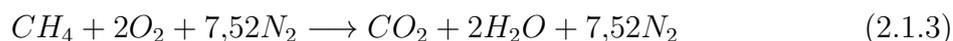
Os dados experimentais estão disponíveis nos trabalhos de Xin *et al.* [18] e Zhou e Gore [10]. Trata-se de um experimento de uma chama de metano não pré-misturada, utilizando um queimador difusivo, ou seja, que só produz chama quando o oxigênio entra em contato com o combustível através de difusão no ambiente. O queimador possui 7,1 cm de diâmetro e localiza-se em espaço aberto, com temperatura ambiente de 15°C. A alimentação é constituída de metano com alto grau de pureza na vazão de 84,3 mg/s.

A técnica PIV (*Particle-Image Velocimetry*) foi empregada para medir o campo de velocidade, descrito em Zhou e Gore [10], durante o tempo de 2 horas para que se possa obter um campo médio $\langle \mathbf{u} \rangle$. Como a chama tem a característica de ser altamente transiente, a obtenção de pontos experimentais confiáveis só pode ser realizada através de variáveis médias.

Para medir a concentração, um cromatógrafo gasoso foi utilizado para medir as frações volumétricas das espécies N_2 , O_2 , H_2 , CH_4 , CO , CO_2 , C_2H_4 e C_2H_2 . Amostras locais em base seca foram obtidas através de um micro-amostrador de quartz com uma abertura de 200 μm . A fração molar de H_2O foi estimada utilizando balanço atômico entre os átomos C e H. Os dados resultantes foram usados para calcular a fração de mistura média $\langle F_t \rangle$.

4.3 Configuração das Simulações

As simulações foram configuradas de maneira a reproduzir a geometria e as condições físicas do experimento. Como apresentado no Capítulo 2, foi considerado uma reação de passo único do metano com o ar, negligenciando a formação de fuligem:



O método utilizado neste trabalho resolve as equações de conservação para cada espécie química. No entanto, os dados da literatura fornecem apenas a fração de mistura, e como abordado no Capítulo 2, é uma propriedade escalar que representa todas as espécies. No entanto, o FireFOAM está habilitado a calcular a fração de mistura através da composição das espécies em tempo de execução.

A discretização temporal foi realizada utilizando o esquema de segunda ordem de diferenças regressivas (*backward differencing*). Os termos difusivos e gradientes foram discretizados utilizando diferenças centrais. O esquema TVD (*Total Variation Diminishing*) foi usado para os termos advectivos.

As equações discretizadas do *momentum*, transporte de espécies, e energia, foram resolvidas utilizando o método do gradiente bi-conjugado preconditionado (*Preconditioned Bi-Conjugated Gradient - PBiCG*). O método Multigrid foi empregado para resolver as equações discretizadas da pressão, energia cinética turbulenta e transporte de energia radiante, enquanto que a equação da continuidade é resolvida explicitamente.

Para o modelo de radiação FVDOM, foi verificada a convergência do número de ângulos sólidos discretizados necessários nas simulações. Foram avaliados dois valores, o primeiro com 100 ângulos, dispostos em 5 subdivisões no intervalo polar $[0, \pi]$ e 20 subdivisões no intervalo azimute $[0, 2\pi]$. Também foi verificado o número de 320 ângulos, dispostos em 10 subdivisões no intervalo polar $[0, \pi]$ e 32 subdivisões no intervalo azimute $[0, 2\pi]$.

No PIMPLE, o número de *loops* utilizado nas simulações foi de 3 para os externos, e 5 para os internos, o que se mostrou suficiente para atingir a convergência em cada passo

de tempo.

Além disso, o tamanho do passo de tempo não foi escolhido *a priori*. O OpenFOAM possui como opção limitar o passo de tempo de maneira de que o número médio de Courant–Friedrichs–Lewy (CFL) não ultrapasse o valor estipulado. Testes preliminares com CFL médio de 5, 3 e 2 indicaram pouca estabilidade do código. Portanto, para todas as simulações, a limitação de valor unitário (um) para o CFL médio foi empregado, para garantir estabilidade numérica.

4.3.1 Condições de Contorno e Iniciais

O experimento realizado possui geometria simples, o que leva a condições de contorno e iniciais não complexas. Por exemplo, para as espécies químicas, a condição inicial é de total presença de ar e no contorno é especificada uma condição de entrada e saída. No caso de saída, qualquer espécie pode sair para a entrada apenas de ar, exceto para o próprio bocal do queimador onde é configurada a injeção de 84,3 mg/s de metano puro. Nota-se que foi atribuído um perfil uniforme na entrada de metano, não sendo especificado um perfil parabólico, turbulento ou com qualquer perturbação.

Como condição inicial para o *momentum* tem-se o fluido estagnado, e como condição de contorno há a condição de gradiente zero, exceto novamente para o bocal do queimador, onde há a velocidade uniforme de entrada do metano, calculada para a vazão especificada de 84,3 mg/s. Usualmente se estabelece o escoamento não-reativo do metano na geometria como estratégia de partida para servir de condição inicial para a simulação com reação, mas optou-se por não realizar esta etapa.

Para a equação da energia, a temperatura inicial é estabelecida como a do ar (15°C ou 288 K), assim como as condições de contorno de todo domínio. Para a condição de contorno no cálculo da equação de radiação térmica todas as superfícies obedecem ao mesmo critério, atuando como corpos negros. Partindo deste princípio, toda radiação térmica incidida no contorno do problema é absorvida, e as superfícies, para qualquer

ponto \mathbf{r}_w , emitem como corpo negro a 288 K de acordo com:

$$I(\mathbf{r}_w, \mathbf{s}) = I_b(\mathbf{r}_w) \quad (4.2)$$

4.3.2 Descrição das Malhas

As malhas utilizadas são hexaédricas e não-ortogonais, feitas na utilidade *blockMesh* do OpenFOAM, e representam um mesmo domínio cilíndrico, variando apenas no número total de elementos, de maneira a realizar o teste de convergência de malha para uma mesma geometria. Em resultados preliminares foi feita a análise de sensibilidade do domínio, estabelecendo o diâmetro do domínio de 6 vezes o tamanho do diâmetro do bocal do queimador, para evitar efeitos do contorno da geometria na chama. A altura especificada para o domínio é de 48 cm, considerada suficiente para a altura da chama. A representação da geometria é apresentada na Figura 4.2.

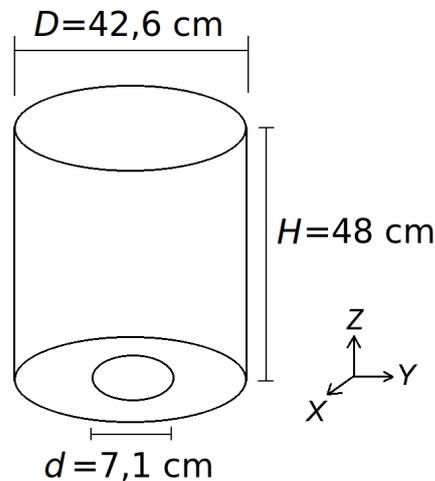


Figura 4.2: Geometria utilizada nas simulações, onde D é o diâmetro do domínio, d é o diâmetro do bocal do queimador e H é altura do domínio.

Quatro malhas foram utilizadas na aplicação do teste de convergência de malha. Todas as malhas apresentam gradual crescimento de tamanho dos elementos, tanto radial quanto axial, permitindo que a zona perto do queimador possua o maior refino de malha. As malhas são demonstradas na Tabela 4.1, junto com seus índices de qualidade, que são descritos em seguida:

- Não-ortogonalidade: o conceito de ortogonalidade já foi introduzido no Capítulo 3. Este índice mede o ângulo máximo (ou médio) entre o vetor ligando dois centros de elementos de volume e o vetor normal à face que liga estes elementos.
- Máxima razão de aspecto: maior razão entre a maior e a menor arestas de cada volume de controle da malha.

Tabela 4.1: Índices de Qualidade das Malhas

<i>Malha</i>	<i>Número de elementos</i>	<i>Máxima não-ortogonalidade</i>	<i>Não-ortogonalidade média</i>	<i>Máxima razão de aspecto</i>	<i>Elementos próximos ao bocal</i>
<i>M1</i>	465.080	38,44	4,44	22,35	48.400
<i>M2</i>	560.040	38,97	4,53	23,59	57.600
<i>M3</i>	640.030	39,20	4,52	23,69	65.625
<i>M4</i>	757.215	39,61	4,59	24,78	80.190

A Tabela 4.2 ilustra o número de elementos próximos ao bocal, ou seja, o número de volumes de controle na região cilíndrica compreendida pela distância radial do centro de 3,55 cm (raio do queimador) e entre as alturas de 0 cm até 10 cm.

Tabela 4.2: Número de elementos na região a jusante do queimador.

<i>Malha</i>	<i>Elementos</i>
<i>M1</i>	48.400
<i>M2</i>	57.600
<i>M3</i>	65.625
<i>M4</i>	80.190

A malha M1 será apresentada em seguida. As demais malhas não serão expostas pois apresentam as mesmas características, *O-grid*, apenas alterando o número de volumes de controle. A Figura 4.3 apresenta a visão isométrica da malha, enquanto que a Figura 4.4 apresenta a vista inferior e demonstra como foi elaborada a região de injeção de metano, estabelecendo a região central em toda a malha. A região externa que preenche o resto

do domínio até o contorno é apresentada na Figura 4.5. Por fim, a evolução da malha no eixo Z é apresentada na Figura 4.6, em que é apresentado um corte transversal da malha até a altura de 10 cm.

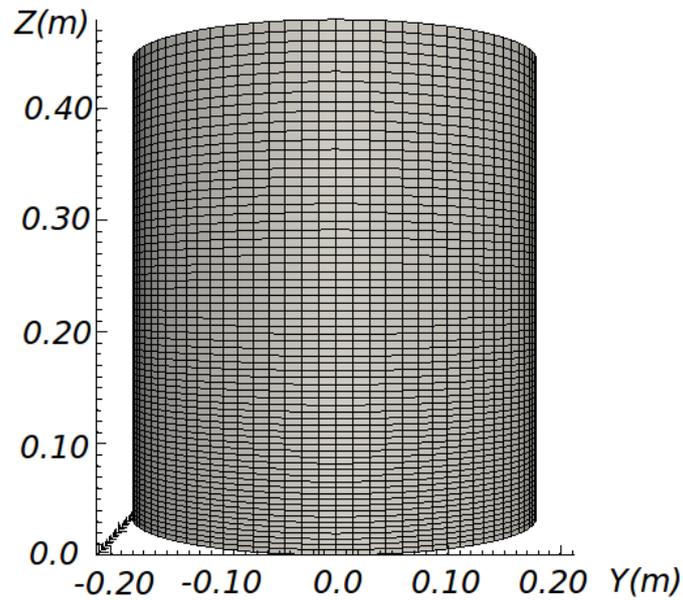


Figura 4.3: Vista isométrica da malha M1.

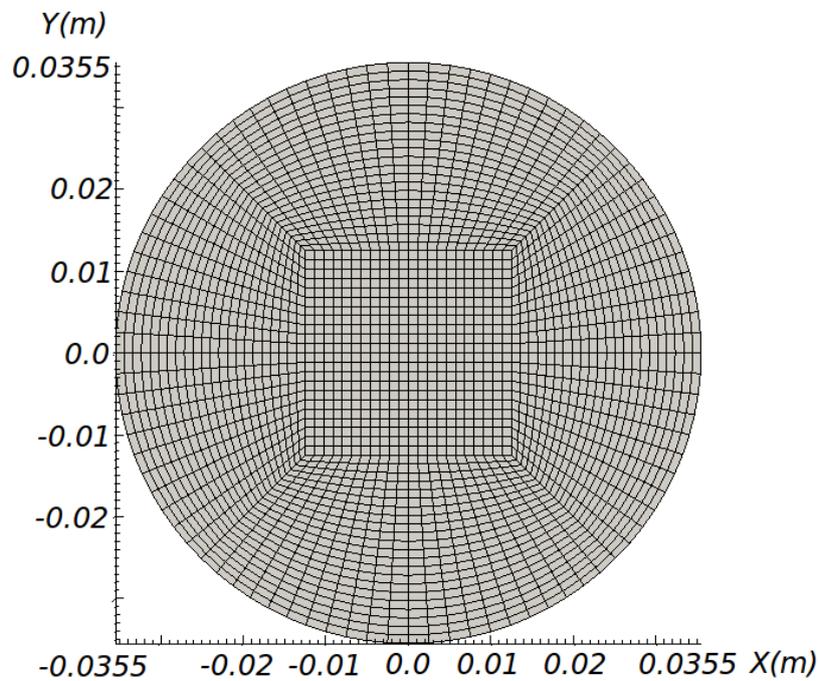


Figura 4.4: Região central da malha M1, vista inferior.

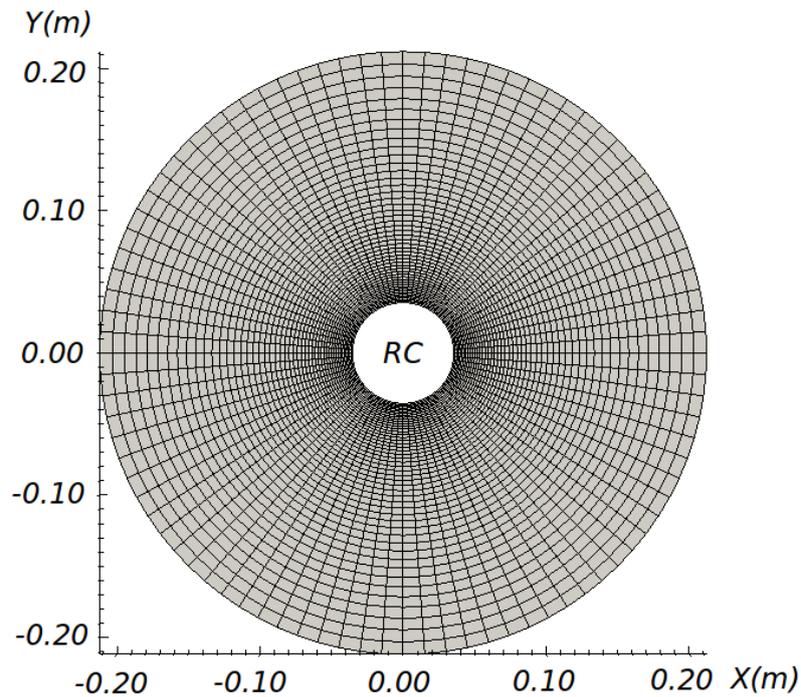


Figura 4.5: Região da malha M1 externa ao bocal, vista inferior, em que RC é a região central apresentada na Figura 4.4.

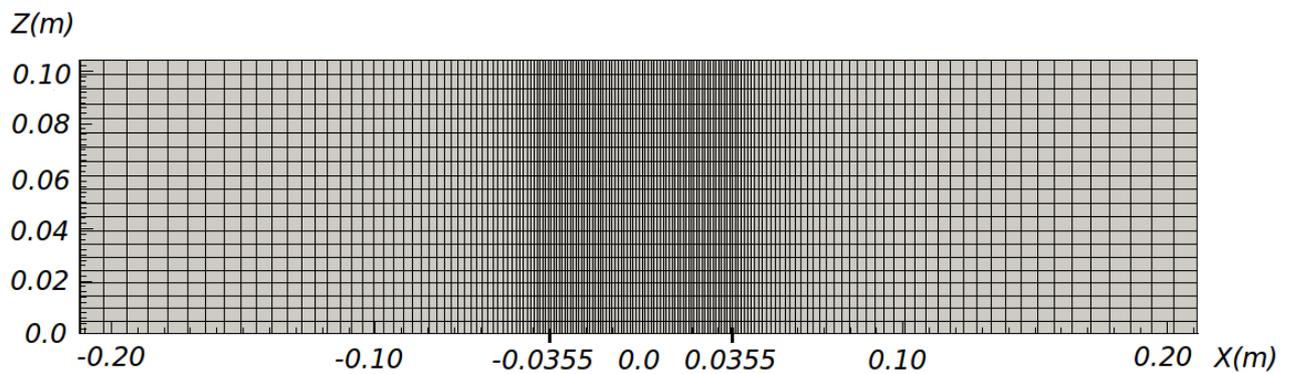


Figura 4.6: Corte transversal X-Z, apresentando a malha M1 até $Z = 0,12$ m.

4.4 Cálculo das Médias Temporais

As simulações realizadas são intrinsecamente transientes, uma vez que o modelo de turbulência utilizado é o de simulação de grandes escalas (LES). Neste modelo, como demonstrado no Capítulo 3, as variáveis obtidas são variáveis filtradas, ao contrário dos

valores médios experimentais. Portanto, a fim de comparar os valores calculados com os da literatura, é preciso obter a média das variáveis filtradas analisadas.

A média temporal para uma função f é:

$$\langle f \rangle(t_0, t_f) = \frac{1}{t_f - t_0} \int_{t_0}^{t_f} f(t) dt \quad (4.3)$$

em que t_0 é o tempo inicial da média, e t_f é o tempo final. Seus valores são desconhecidos para todas as variáveis do problema, inclusive para as funções $\langle \mathbf{u} \rangle$ e $\langle F_t \rangle$. O OpenFOAM tem a capacidade de calcular médias de variáveis em tempo de execução, desde que especificados t_0 e t_f . Em um caso complexo como modelagem de chama, é praticamente proibitivo computacionalmente simular um longo intervalo de tempo, de maneira que para contornar esta dificuldade é necessário encontrar os menores valores possíveis de t_0 e t_f e se assegurar que são resultados médios convergidos. Nota-se ainda que a simulação LES resolve as escalas no tamanho da malha, logo, quanto mais fina for a malha, mais escalas de frequência das oscilações são resolvidas. Portanto, deve-se calcular t_0 e t_f para cada malha. O tempo final pode ser encontrado através de:

$$t_f \approx t_0 + N\Delta t \quad (4.4)$$

em que Δt é o intervalo de tempo de um único ciclo transiente, e N é o número de ciclos suficientemente grande para que $\langle f \rangle(t_0, t_0 + N\Delta t) \approx \langle f \rangle(t_0, t_0 + (N - 1)\Delta t)$. Quando isso ocorrer, pode-se dizer que os resultados médios da chama convergiram no tempo. Somente após a obtenção de médias temporais convergidas é que é possível realizar o teste de convergência de malha e a comparação com os dados experimentais.

Para verificar o comportamento temporal das variáveis médias, pontos de monitoramento próximos às coordenadas dos pontos experimentais foram escolhidos. As coordenadas analisadas se localizam no plano y-z, possuindo a distância radial (distância do eixo principal da chama), R , entre 0 e 5 cm, e em diversas alturas h acima da superfície do queimador. As alturas escolhidas para esta análise são 0,5 cm, 1 cm, 5 cm e 10 cm. A Figura 4.7 apresenta estas posições no domínio do problema.

É preciso também verificar se a chama possui simetria axial para os resultados médios,

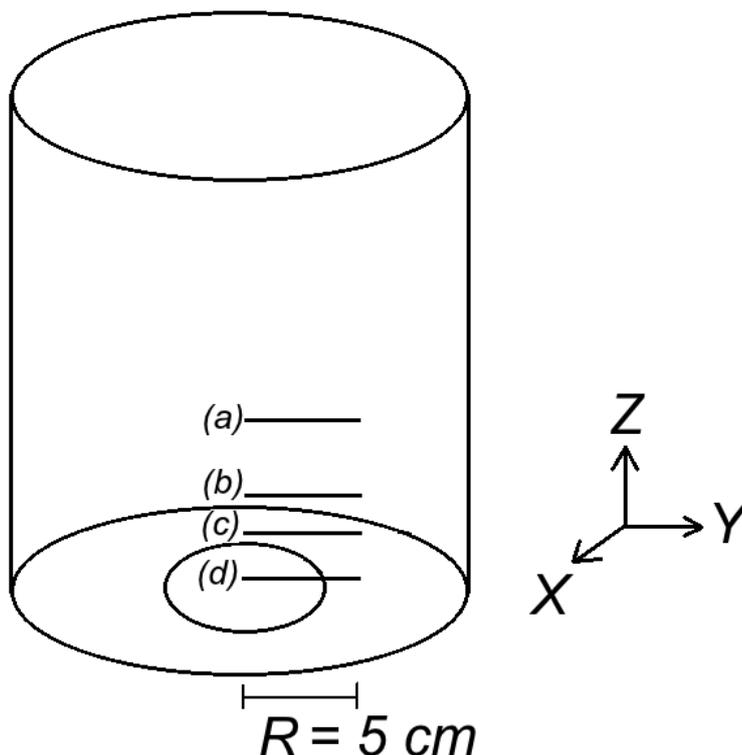


Figura 4.7: Pontos de amostragem no domínio. Figura fora de escala para facilitar a visualização. Em (a) $h = 10 \text{ cm}$, (b) $h = 5 \text{ cm}$, (c) $h = 1 \text{ cm}$ e (d) $h = 0,5 \text{ cm}$.

tornando independente a análise sobre o eixo x ou eixo y . É esperado que as variáveis médias da simulação possuam comportamento axialmente simétrico pois isto ocorre naturalmente em chamas de pequeno porte [18].

Após análises preliminares, Δt foi estimado em 2 s. Para verificar se os ciclos transientes são realizados neste intervalo de tempo, é necessário verificar as médias $\langle f \rangle(0, 2)$, $\langle f \rangle(2, 4)$, $\langle f \rangle(4, 6)$, ..., $\langle f \rangle(t, t + \Delta t)$. De fato, o intervalo de tempo estará adequado se as médias fornecerem valores próximos. Os valores de média para os intervalos iniciais também são utilizados para determinar t_0 . Somente quando a simulação apresentar ciclos transientes estáveis é que se pode obter a média das variáveis. Uma vez que t_0 e Δt são determinados, N é calculado em sequência, bastando analisar o tempo necessário para as variáveis apresentarem $\langle f \rangle(t_0, t_0 + (N - 1)\Delta t) \approx \langle f \rangle(t_0, t_0 + N\Delta t)$.

As variáveis médias escolhidas para monitoramento foram $\langle F_t \rangle$, $\langle T \rangle$, $\langle U_y \rangle$ e $\langle U_z \rangle$, a fração de mistura, temperatura, componente radial e componente axial da velocidade no

plano y-z, respectivamente. As componentes de velocidade e a fração de mistura média são parâmetros que serão utilizados para validação, sendo de suma importância verificar suas convergências temporais. A temperatura ainda foi escolhida por ser uma variável de extrema relevância no estudo de combustão. Cabe ressaltar que as médias são calculadas diretamente pelo OpenFOAM, em tempo de execução.

Por fim, nota-se que o PIV é uma técnica baseada em médias temporais, sendo adequada para gerar resultados comparativos para o emprego de equações médias de Reynolds [57]. Neste trabalho, após o cálculo das médias obtém-se variáveis médias de Favre, ou seja, ponderadas pela densidade, diferentes das médias de Reynolds fornecidas pelo experimento. De acordo com Veynante e Vervisch [11], a relação entre esses resultados não é simples e suas diferenças podem ser significantes, principalmente em fortes gradientes de densidade e temperatura.

Portanto, a existência de uma possível discrepância entre valores experimentais e os resultados simulados de velocidade podem existir, já que são médias diferentes. A cromatografia gasosa foi realizada utilizando médias temporais para a obtenção direta das frações mássicas, estando também sujeita à uma possível diferença entre os valores simulados, que são médias ponderadas pela densidade. Além da natureza dos resultados da simulação ser diferente da natureza dos resultados experimentais, outros aproximações como a não produção de fuligem, condições de contorno (injeção sem perturbação de metano), modelo reacional e o modelo de radiação térmica podem contribuir para possíveis desvios.

Capítulo 5

Resultados

Neste capítulo são apresentados todos os resultados obtidos. A primeira e a segunda seção demonstram a validade da metodologia proposta na obtenção dos resultados médios. A convergência de malha é exposta na terceira seção, onde é vista a independência dos valores obtidos em relação ao tamanho dos elementos. Por fim, a última seção apresenta a validação do *solver* FireFOAM, realizando a comparação com dados experimentais da literatura. Nos gráficos, o eixo das abscissas possui a legenda R , indicando a distância radial ao eixo central da chama. Os casos foram simulados utilizando computação paralela por meio de um *Beowulf cluster*, com configuração de 60 Intel i7-960 3,20 GHz *cores*, 180 Gb RAM e com comunicação Infiniband QDR. O OpenFOAM realiza o paralelismo por meio do OpenMPI. Na Tabela 5.1, é apresentado o número de núcleos utilizado em cada malha, além do tempo computacional aproximado necessário para simular 10 segundos de chama. Nota-se o ganho de velocidade de processamento obtido na malha M4, onde foram utilizados consideravelmente mais núcleos.

5.1 Definição dos Parâmetros t_0 e Δt

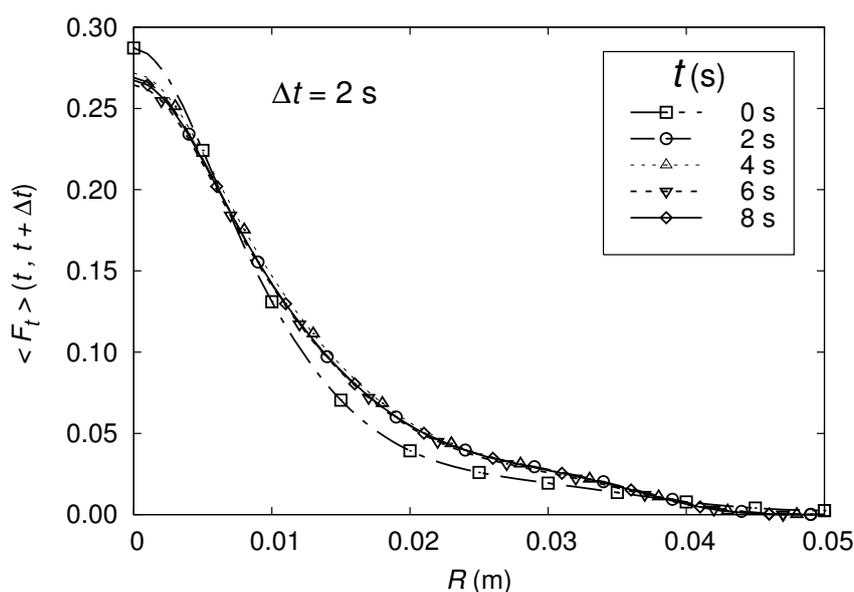
A análise para as variáveis médias propostas, $\langle F_t \rangle$, $\langle T \rangle$, $\langle U_y \rangle$ e $\langle U_z \rangle$, foi realizada nas alturas indicadas de 0,5, 1, 5 e 10 cm. Foi verificado, inclusive, que independentemente

Tabela 5.1: Tempo aproximado de processamento computacional para simular 10 s

Malha	N° de núcleos	Tempo (dias)
M1	20	7,1
M2	20	10,1
M3	24	10,8
M4	32	8,5

da malha os resultados são bem semelhantes. Desta forma, serão apenas apresentados os resultados obtidos para a altura de 10 cm, tanto para a malha com menos elementos (M1) e quanto para a com mais elementos (M4).

Analisando os gráficos mostrados nas Figuras 5.1 a 5.8, percebe-se que as curvas obtidas são bem próximas, com exceção das médias $\langle f \rangle(0 \text{ s}, 2 \text{ s})$ e $\langle f \rangle(2 \text{ s}, 4 \text{ s})$, onde $\langle f \rangle$ é uma variável média qualquer. De fato, pequenas oscilações são esperadas entre os ciclos transientes, no entanto, as médias $\langle f \rangle(4 \text{ s}, 6 \text{ s})$, $\langle f \rangle(6 \text{ s}, 8 \text{ s})$ e $\langle f \rangle(8 \text{ s}, 10 \text{ s})$ possuem valores praticamente coincidentes em todas as curvas, provando que $\Delta t = 2 \text{ s}$ está adequado. Além disso, somente após o tempo de 4 segundos é que a chama está estabelecida e que se obtém ciclos transientes estáveis, validando o valor de $t_0 = 4 \text{ s}$.

Figura 5.1: Fração de Mistura Média $\langle F_t \rangle$ em $h=10 \text{ cm}$, obtida na malha M1.

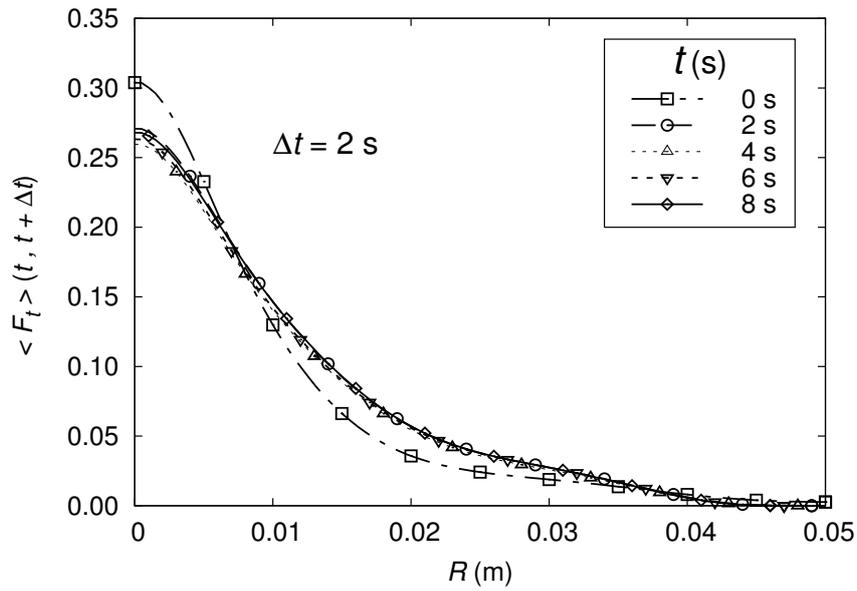


Figura 5.2: Fração de Mistura Média $\langle F_t \rangle$ em $h=10$ cm, obtida na malha M4.

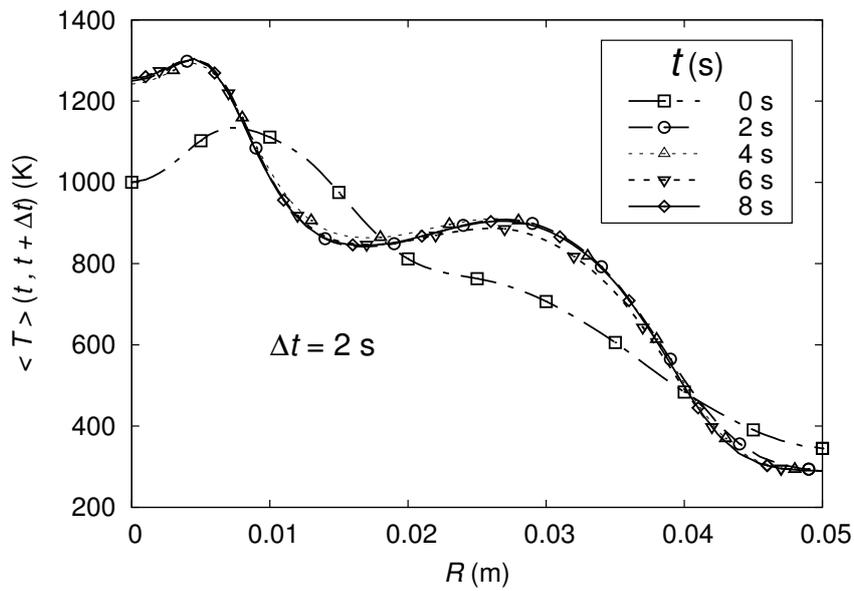


Figura 5.3: Temperatura Média $\langle T \rangle$ (K) em $h=10$ cm, obtida na malha M1.

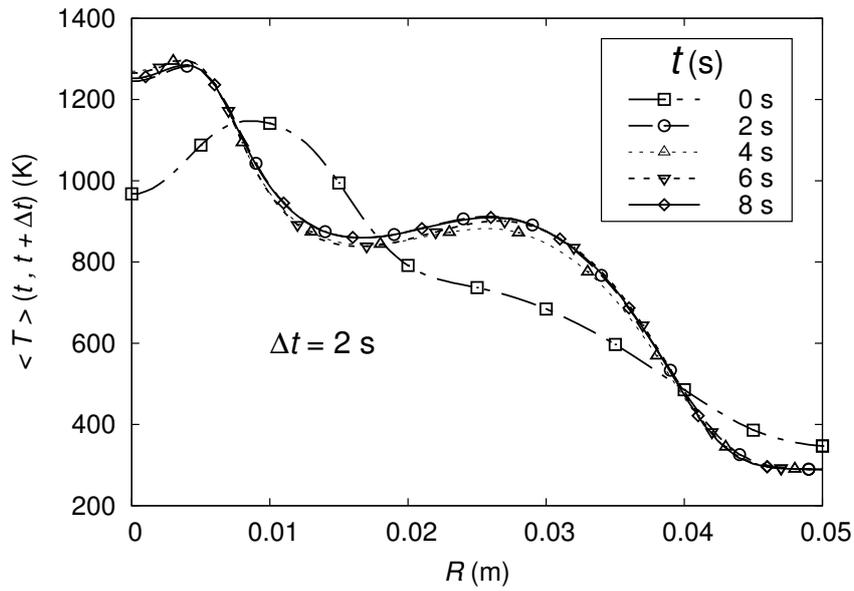


Figura 5.4: Temperatura Média $\langle T \rangle$ (K) em $h=10$ cm, obtida na malha M4.

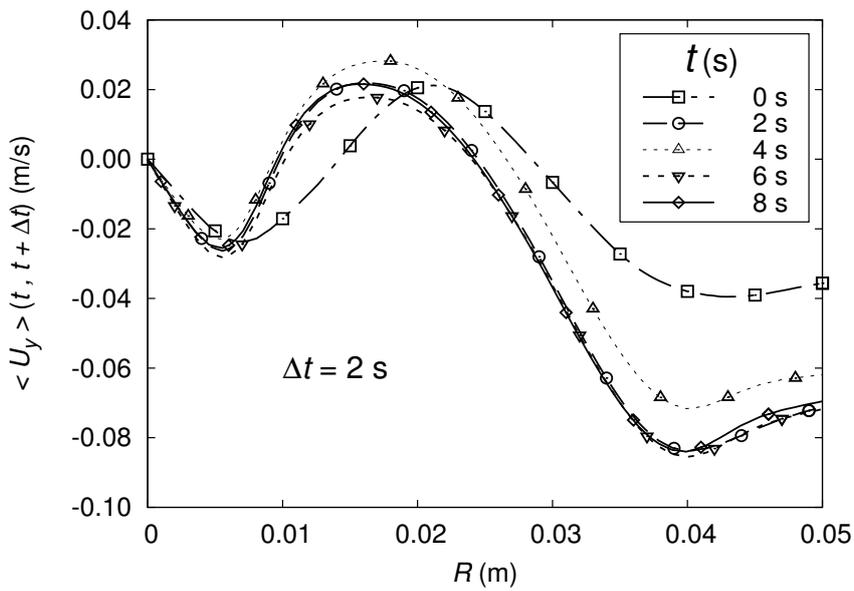


Figura 5.5: Velocidade Radial Média $\langle U_y \rangle$ (m/s) em $h=10$ cm, obtida na malha M1.

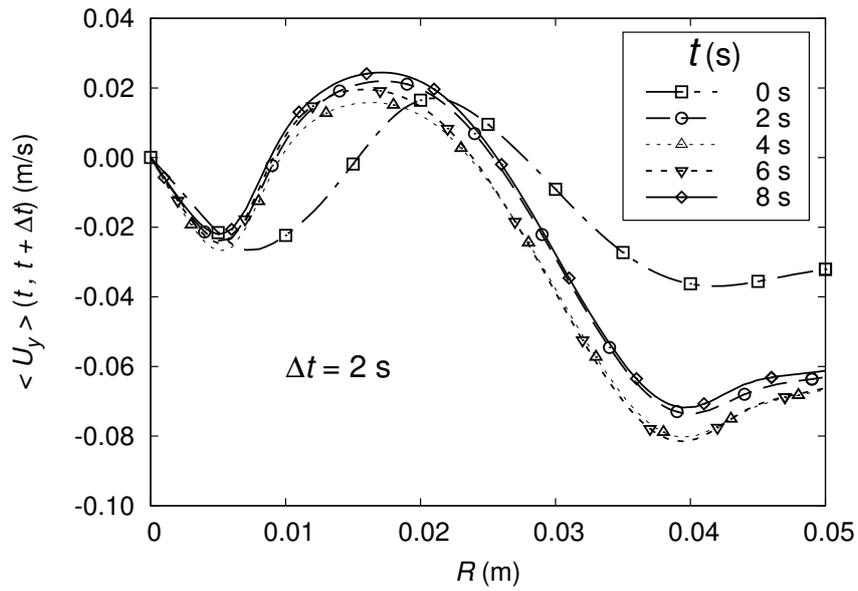


Figura 5.6: Velocidade Radial Média $\langle U_y \rangle$ (m/s) em $h=10$ cm, obtida na malha M4.

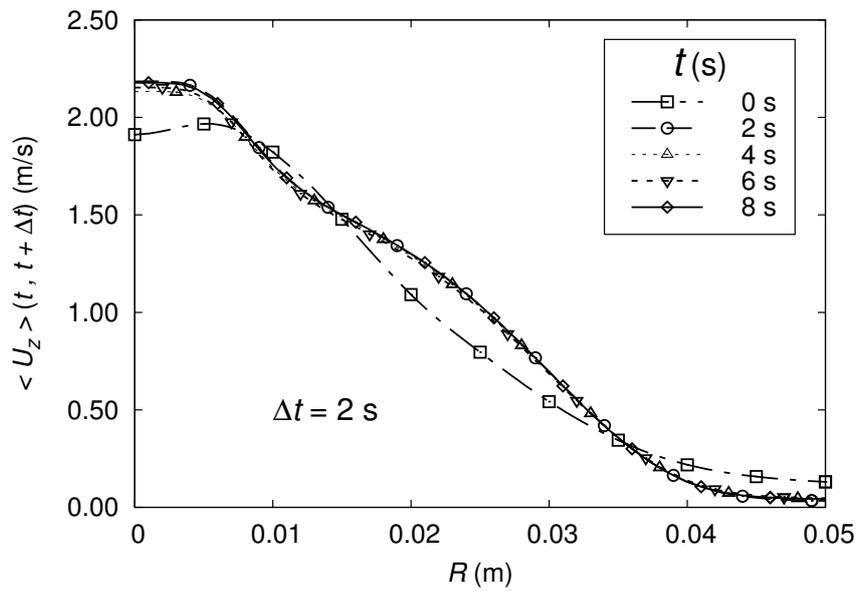


Figura 5.7: Velocidade Axial Média $\langle U_z \rangle$ (m/s) em $h=10$ cm, obtida na malha M1.

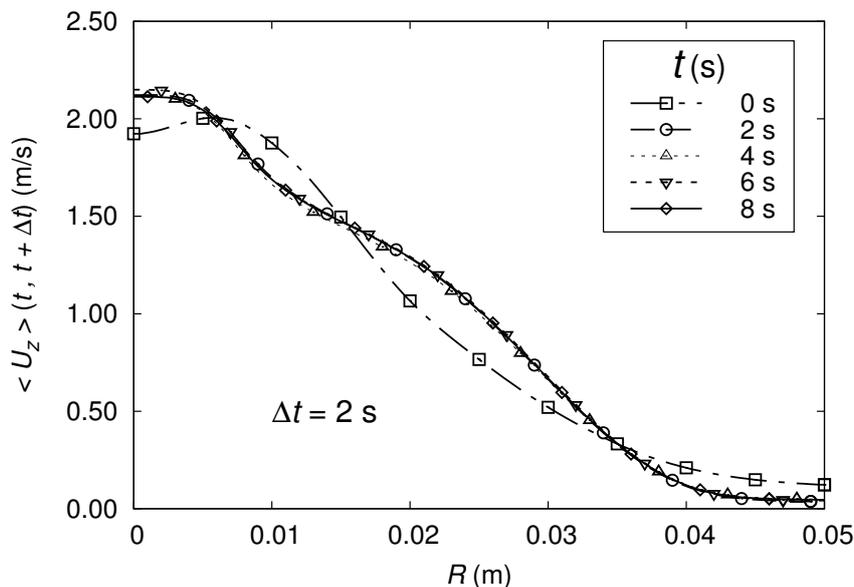


Figura 5.8: Velocidade Axial Média $\langle U_z \rangle$ (m/s) em $h=10$ cm, obtida na malha M4.

5.2 Convergência Temporal das Simulações

Validados os valores de t_0 e Δt , é possível calcular N . Novamente, após a análise das variáveis médias $\langle F_t \rangle$, $\langle T \rangle$, $\langle U_y \rangle$ e $\langle U_z \rangle$ nas alturas consideradas de 0,5 cm, 1 cm, 5 cm e 10 cm, foi possível verificar que as médias obtidas no intervalo (4 s, 8 s) possuem altíssima concordância com as médias obtidas em (4 s, 10 s), provando que as médias temporais obtidas neste último intervalo já estão convergidas. Os resultados também demonstraram que $N = 3$ é válido para todas as malhas simuladas, sendo somente apresentados os valores obtidos para a malha com menor número de elementos (M1) e com o maior número de elementos (M4). Optou-se nesta seção por novamente expor apenas os gráficos gerados na altura de 10 cm, mostrados nas Figuras 5.9 a 5.16.

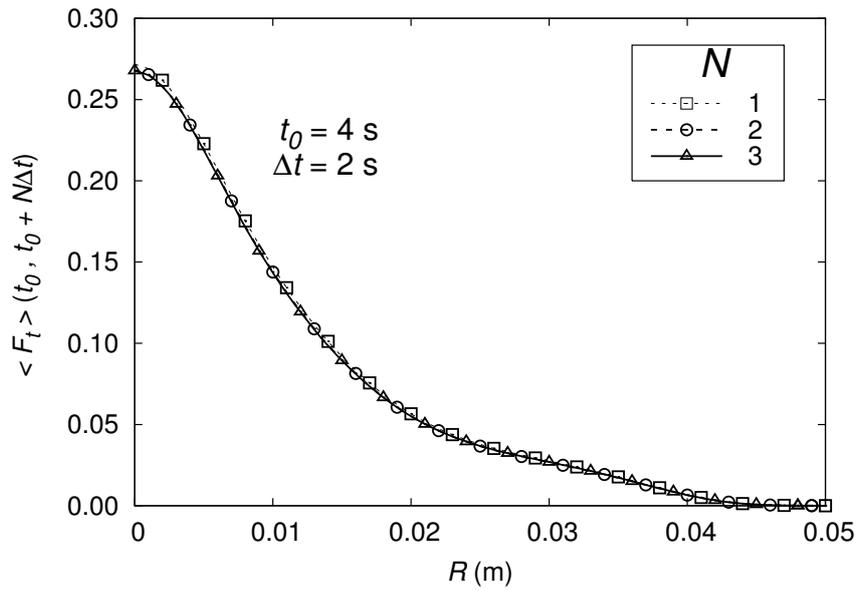


Figura 5.9: Fração de Mistura Média $\langle F_t \rangle$ em $h=10$ cm, obtida na malha M1.

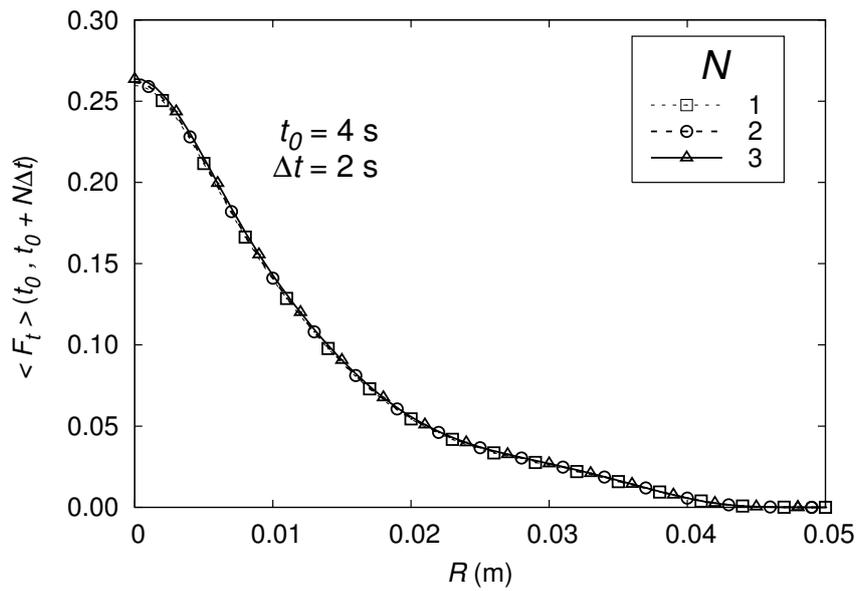


Figura 5.10: Fração de Mistura Média $\langle F_t \rangle$ em $h=10$ cm, obtida na malha M4.

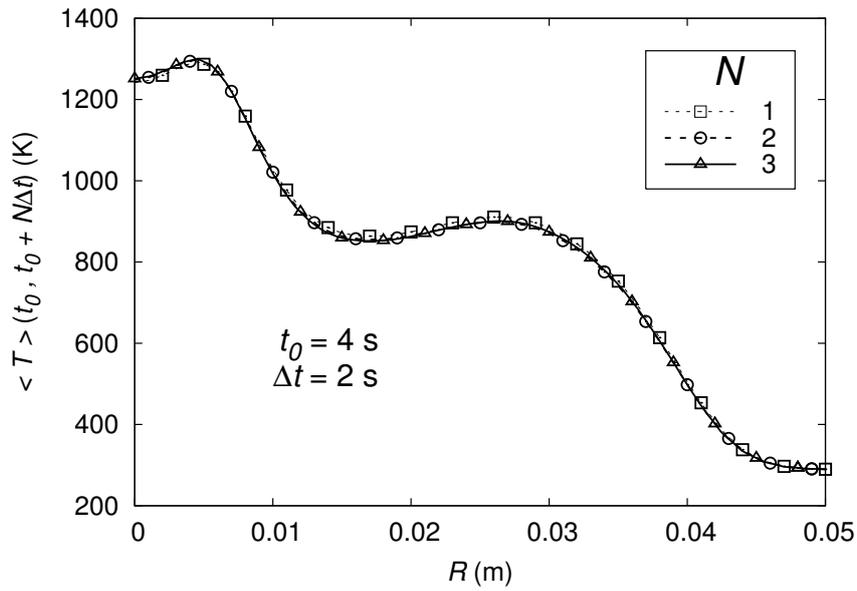


Figura 5.11: Temperatura Média $\langle T \rangle$ (K) em $h=10$ cm, obtida na malha M1.

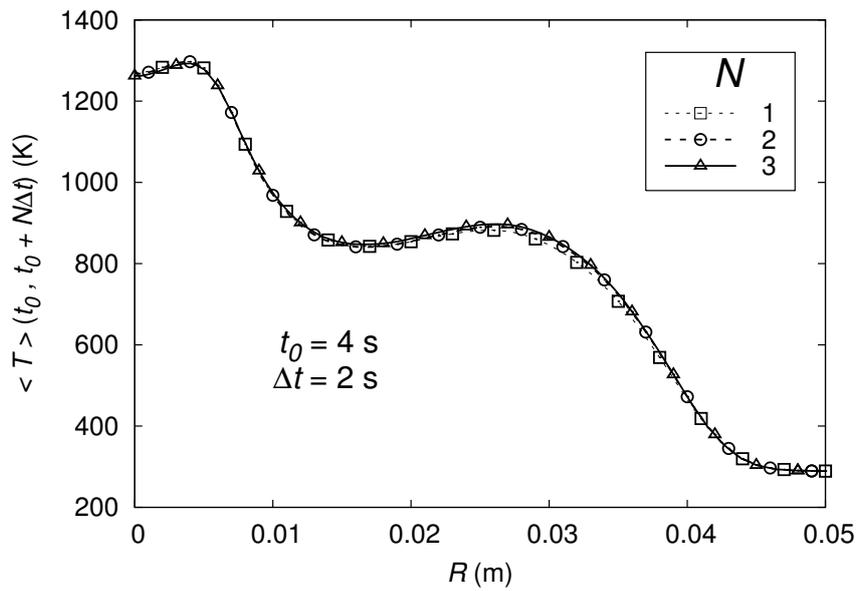


Figura 5.12: Temperatura Média $\langle T \rangle$ (K) em $h=10$ cm, obtida na malha M4.

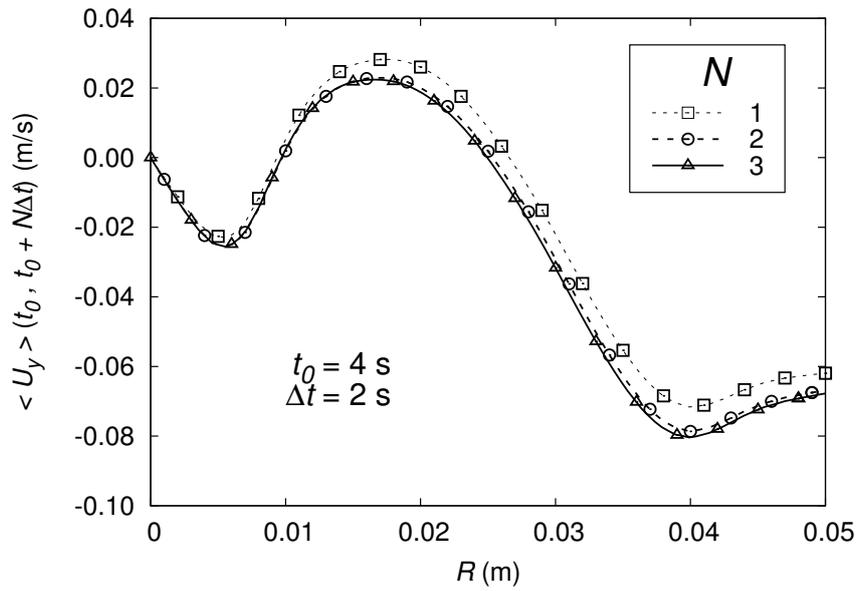


Figura 5.13: Velocidade Radial Média $\langle U_y \rangle$ (m/s) em $h=10$ cm, obtida na malha M1.

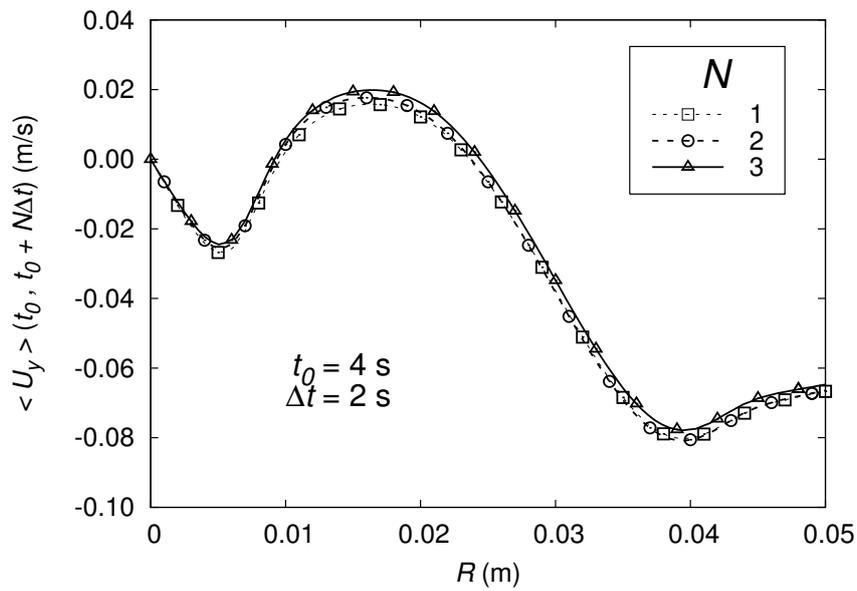


Figura 5.14: Velocidade Radial Média $\langle U_y \rangle$ (m/s) em $h=10$ cm, obtida na malha M4.

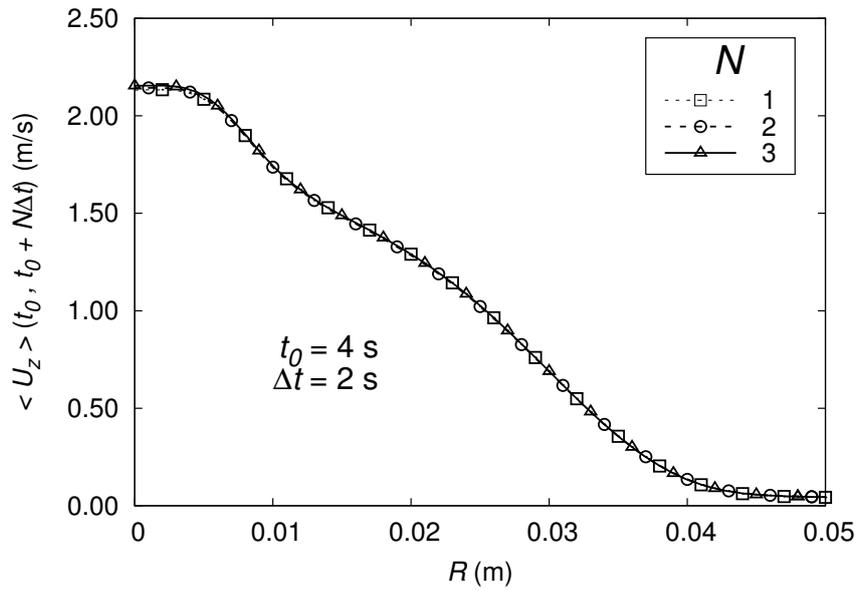


Figura 5.15: Velocidade Axial Média $\langle U_z \rangle$ (m/s) em $h=10$ cm, obtida na malha M1.

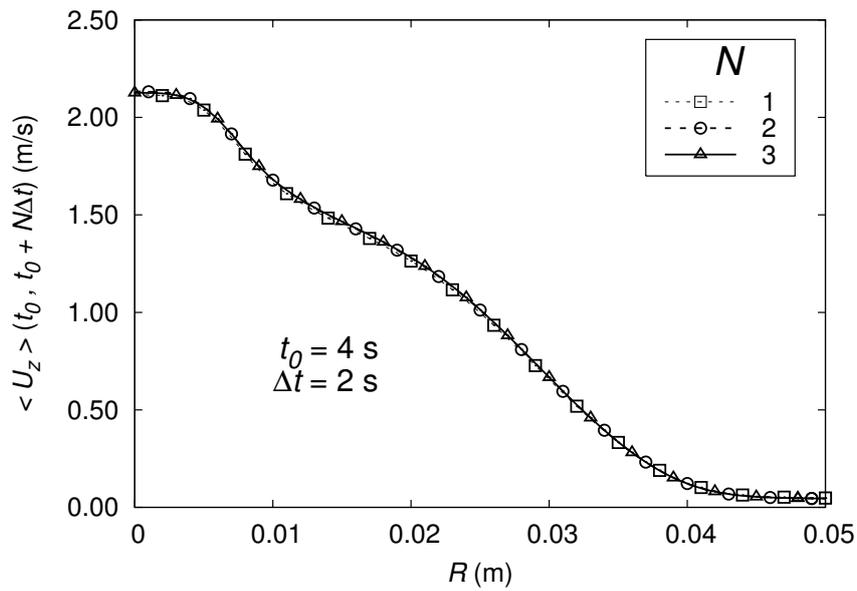


Figura 5.16: Velocidade Axial Média $\langle U_z \rangle$ (m/s) em $h=10$ cm, obtida na malha M4.

5.3 Convergência de Malha e Discretizações Angulares

Após a obtenção dos valores médios finais para cada simulação, foi verificada a independência dos resultados em relação ao tamanho da malha e ao número de discretizações angulares, m , do FVDOM. As Figuras 5.17 a 5.20 mostram os resultados de convergência de malha para as quatro alturas propostas, alternando-se as variáveis expostas. Em todas as regiões de análise e variáveis médias avaliadas, a última malha, M4, apresentou resultado semelhante a malha anterior, M3, indicando que a convergência de malha foi atingida. As Tabelas 5.2 a 5.5 apresentam quantitativamente esta convergência, demonstrando o erro relativo em relação à malha M4. Para velocidade e fração de mistura só foram analisados valores absolutos acima de 0,01 para evitar inconsistências e divisões por zero.

Em sequência são exibidos resultados de convergência no número de discretizações angulares, m , realizada na malha menos refinada, M1, variando o número de discretizações de 100 para 320. As Figuras 5.21 e 5.22 mostram resultados de temperatura média, variável mais sensível à convergência do modelo radiante, para as alturas de 10 cm e 0,5 cm. Por fim, as Figuras 5.23 e 5.24 apresentam os resultados para a velocidade axial média em 10 cm e velocidade radial média em 0,5 cm, respectivamente. Os resultados demonstram que o número de 100 discretizações angulares já é suficiente sendo, portanto, utilizado este valor nas simulações de malha mais pesada.

Tabela 5.2: Análise quantitativa da convergência de malha para $\langle T \rangle$ (K) em $h=10$ cm

<i>Malhas</i>	<i>Máximo erro relativo %</i>	<i>Posição radial (cm)</i>
<i>M1 e M4</i>	6,20	4,15
<i>M2 e M4</i>	4,84	4,15
<i>M3 e M4</i>	1,81	4,25

Tabela 5.3: Análise quantitativa da convergência de malha para $\langle U_y \rangle$ (m/s) em $h=5$ cm

<i>Malhas</i>	<i>Máximo erro relativo %</i>	<i>Posição radial (cm)</i>
<i>M1 e M4</i>	10,81	1,30
<i>M2 e M4</i>	6,59	1,30
<i>M3 e M4</i>	2,86	1,30

Tabela 5.4: Análise quantitativa da convergência de malha para $\langle U_z \rangle$ (m/s) em $h=1$ cm

<i>Malhas</i>	<i>Máximo erro relativo %</i>	<i>Posição radial (cm)</i>
<i>M1 e M4</i>	15,29	0,05
<i>M2 e M4</i>	9,55	0,05
<i>M3 e M4</i>	5,61	0,40

Tabela 5.5: Análise quantitativa da convergência de malha para $\langle F_t \rangle$ em $h=0,5$ cm

<i>Malhas</i>	<i>Máximo erro relativo %</i>	<i>Posição radial (cm)</i>
<i>M1 e M4</i>	6,58	3,40
<i>M2 e M4</i>	4,00	3,40
<i>M3 e M4</i>	2,55	3,40

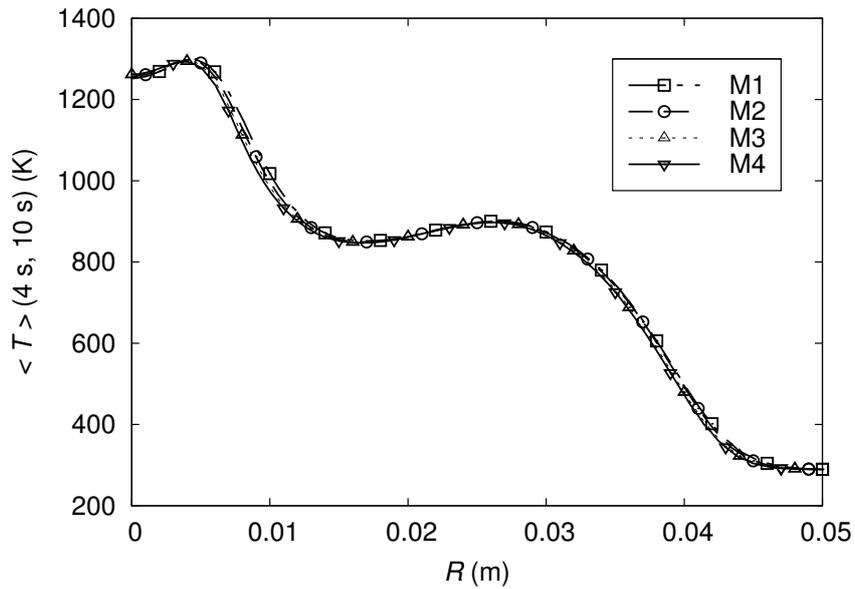


Figura 5.17: Temperatura Média $\langle T \rangle$ (K) em $h=10$ cm.

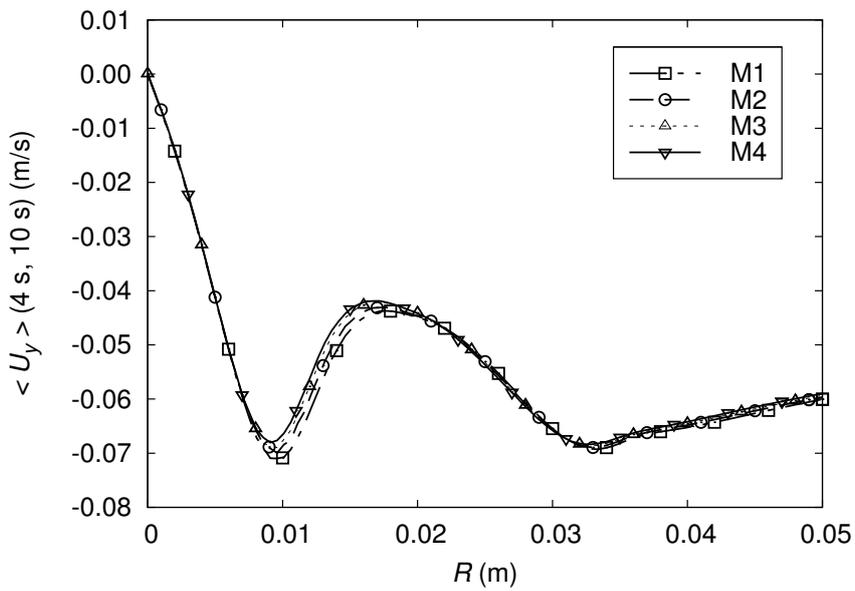


Figura 5.18: Velocidade Radial Média $\langle U_y \rangle$ (m/s) em $h=5$ cm.

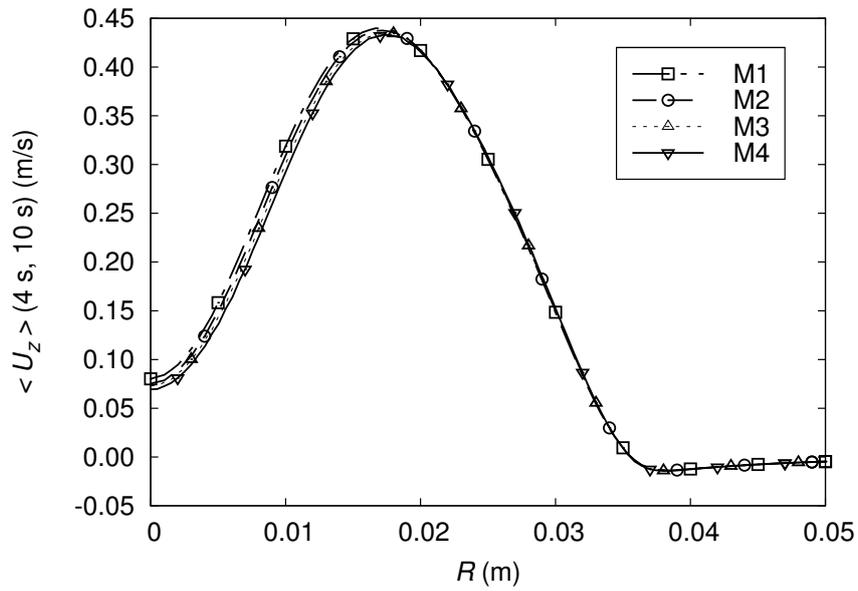


Figura 5.19: Velocidade Axial Média $\langle U_z \rangle$ (m/s) em $h=1$ cm.

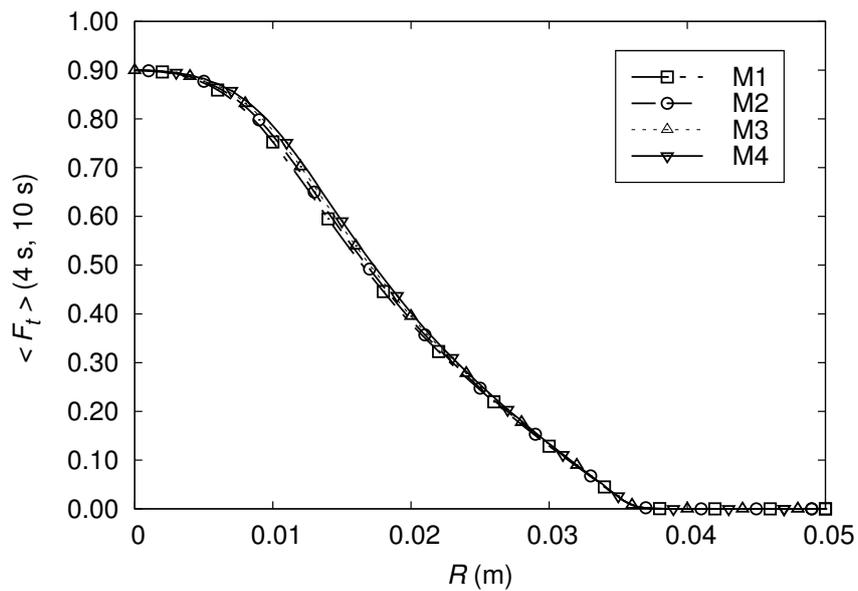


Figura 5.20: Fração de Mistura Média $\langle F_t \rangle$ em $h=0,5$ cm.

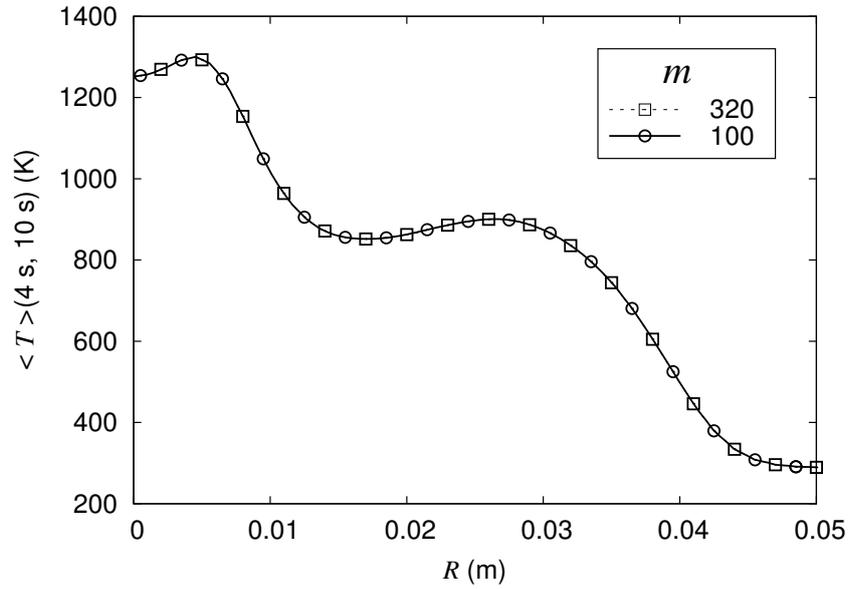


Figura 5.21: Temperatura Média $\langle T \rangle$ (K) em $h=10$ cm, obtida na malha M1.

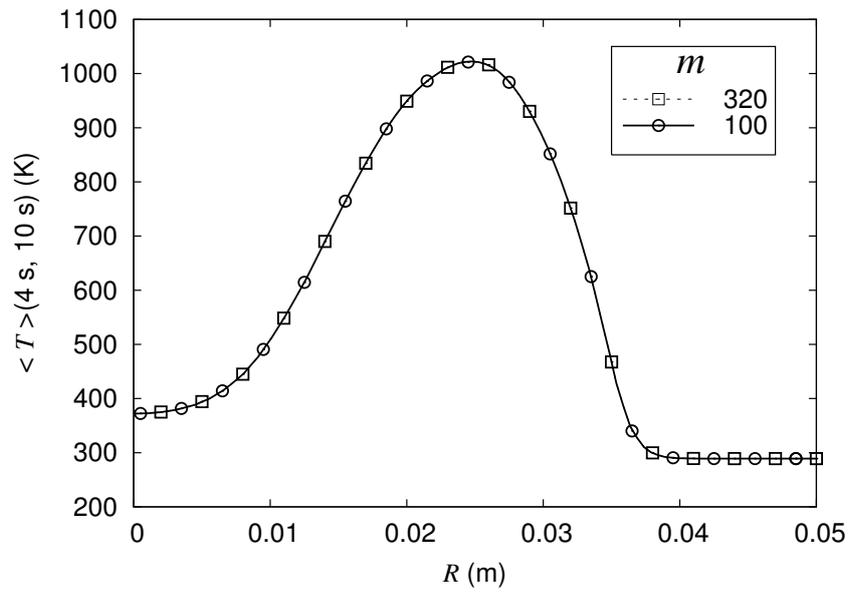


Figura 5.22: Temperatura Média $\langle T \rangle$ (K) em $h=0,5$ cm, obtida na malha M1.

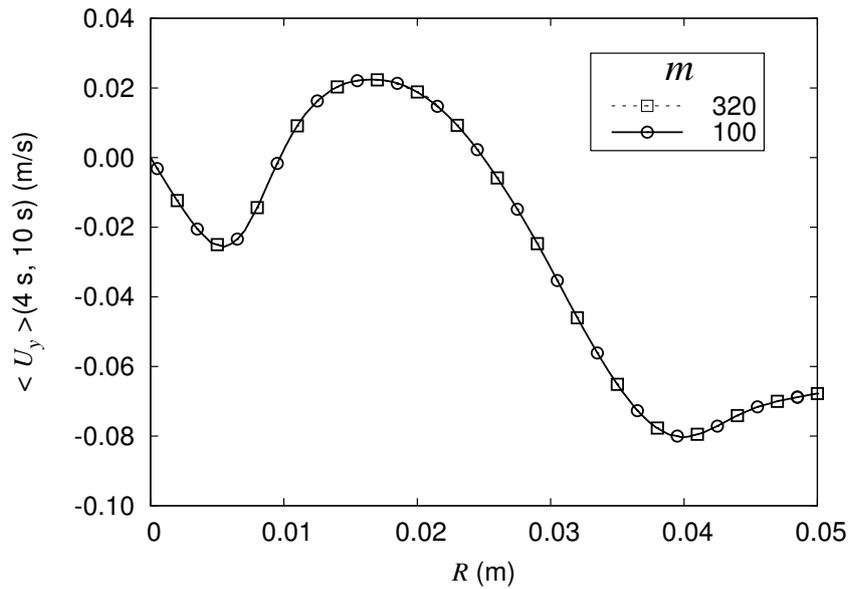


Figura 5.23: Velocidade Radial Média $\langle U_y \rangle$ (m/s) em $h=10$ cm, obtida na malha M1.

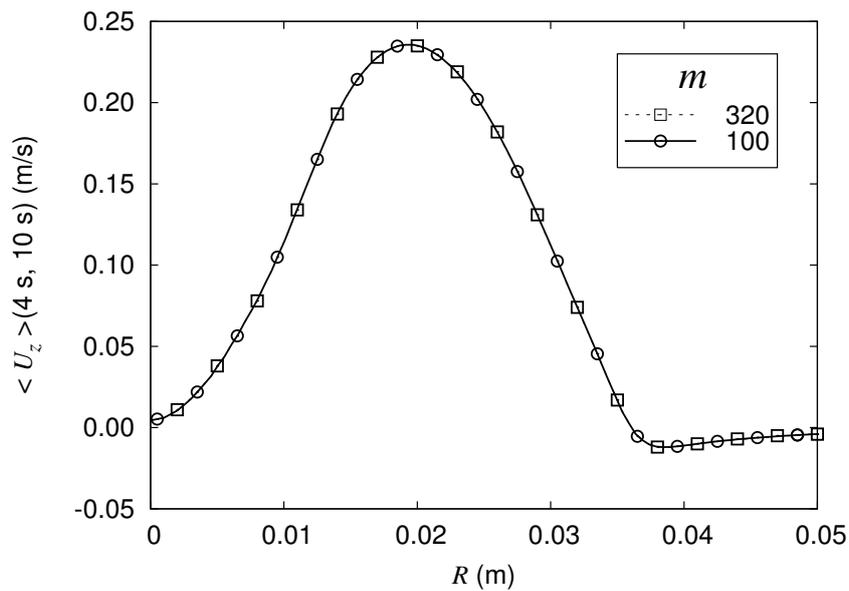


Figura 5.24: Velocidade Axial Média $\langle U_z \rangle$ (m/s) em $h=0,5$ cm, obtida na malha M1.

5.4 Simetria Axial

A verificação da simetria axial foi realizada para a malha mais refinada (M4) analisando os componentes horizontais da velocidade nas alturas de 10 e 5 cm já convergidos no tempo

em intervalos de 4 a 10 s. As Figuras 5.25 e 5.26 demonstram a perfeita concordância entre ambos os componentes, provando o já esperado comportamento axialmente simétrico das variáveis médias da chama.

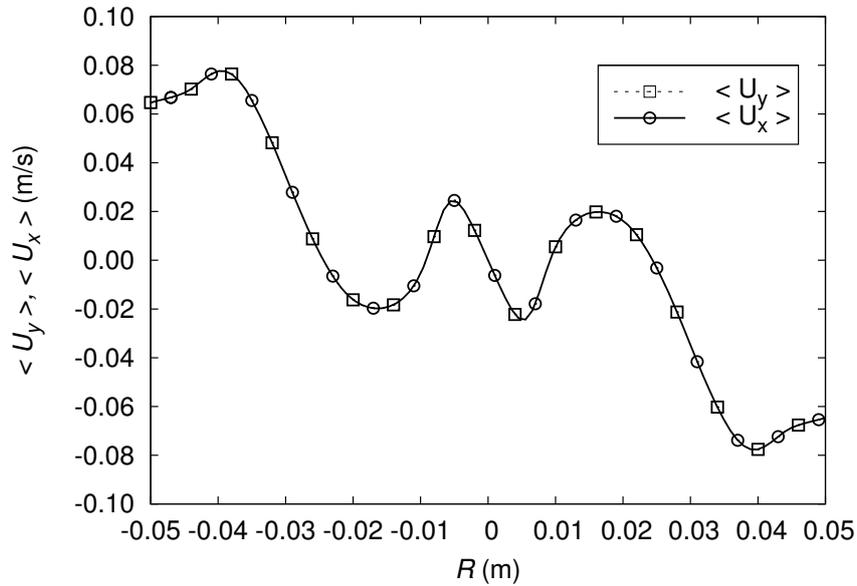


Figura 5.25: Componentes horizontais médios da velocidade média (m/s) em $h=10$ cm, obtidas na malha M4.

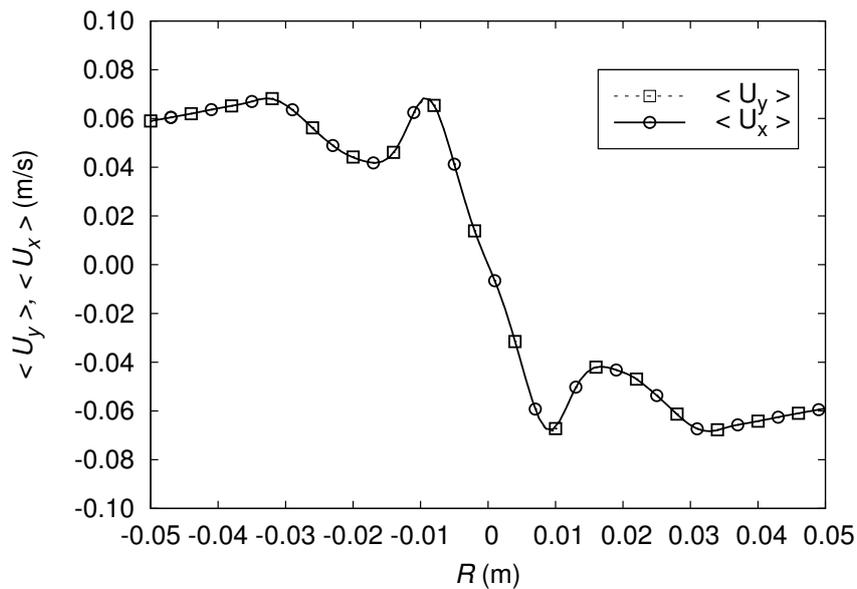


Figura 5.26: Componentes horizontais médios da velocidade média (m/s) em $h=5$ cm, obtidas na malha M4.

5.5 Validação do FireFOAM

Após verificar a convergência de malha, foi feita a comparação dos resultados médios no intervalo (4 s, 10 s) da simulação final (M4) com os dados experimentais. Os resultados para a malha mais refinada são demonstrados em seguida. Além da comparação experimental, são apresentadas análises de outras variáveis que possam contribuir no entendimento físico da chama, e que vão servir de suporte para as conclusões obtidas.

5.5.1 Comparação Experimental

Os resultados simulados são apresentados em conjunto com os dados apresentados em [18]. Convém lembrar que o erro experimental para a fração de mistura é de 10%, enquanto que para a velocidade é de 15%, podendo chegar até 25% nas regiões perto da superfície do queimador [10]. Porém, para tornar a análise mais rigorosa, os dados experimentais de velocidade utilizaram 15% de margem de erro em todas as alturas. As Figuras 5.27 a 5.30 mostram os resultados de validação para a fração de mistura média.

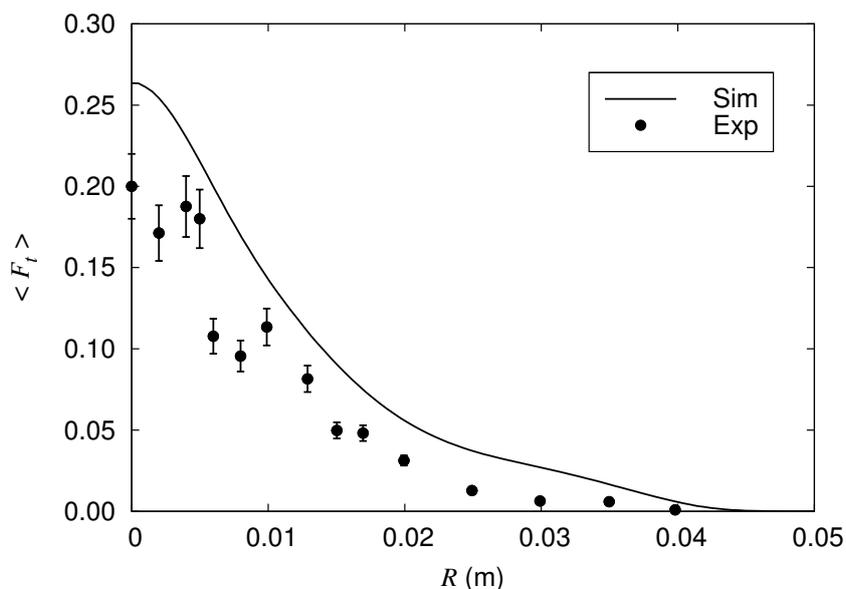


Figura 5.27: Validação - Fração de Mistura Média $\langle F_t \rangle$ em $h=10$ cm.

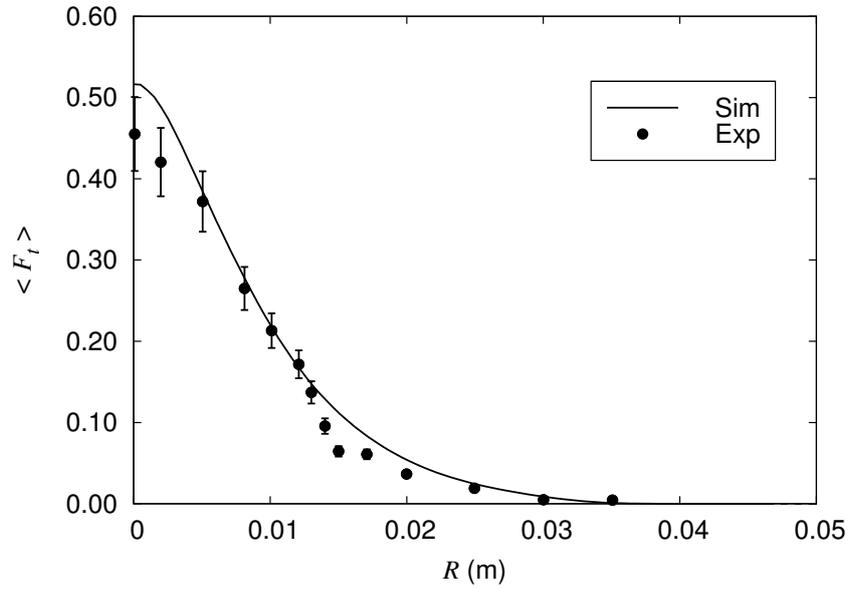


Figura 5.28: Validação - Fração de Mistura Média $\langle F_t \rangle$ em $h=5$ cm.

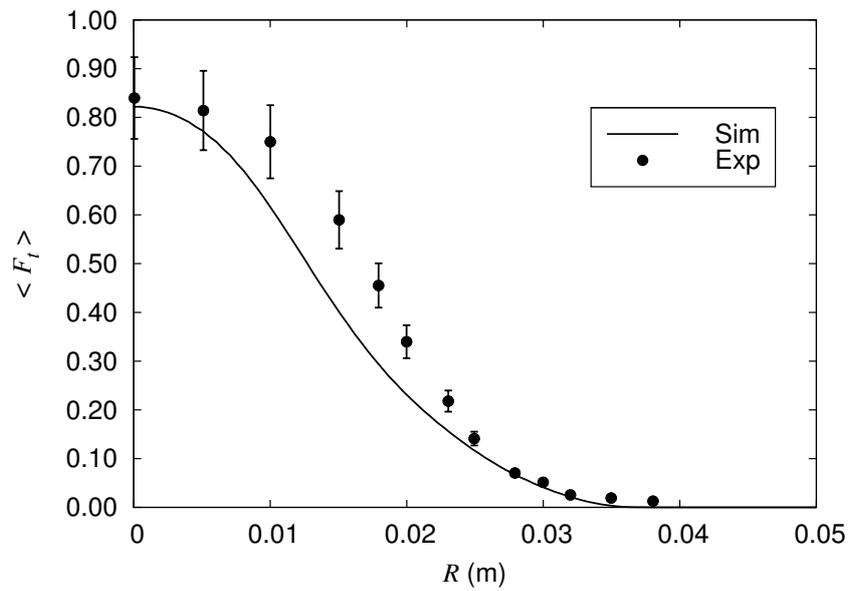


Figura 5.29: Validação - Fração de Mistura Média $\langle F_t \rangle$ em $h=1$ cm.

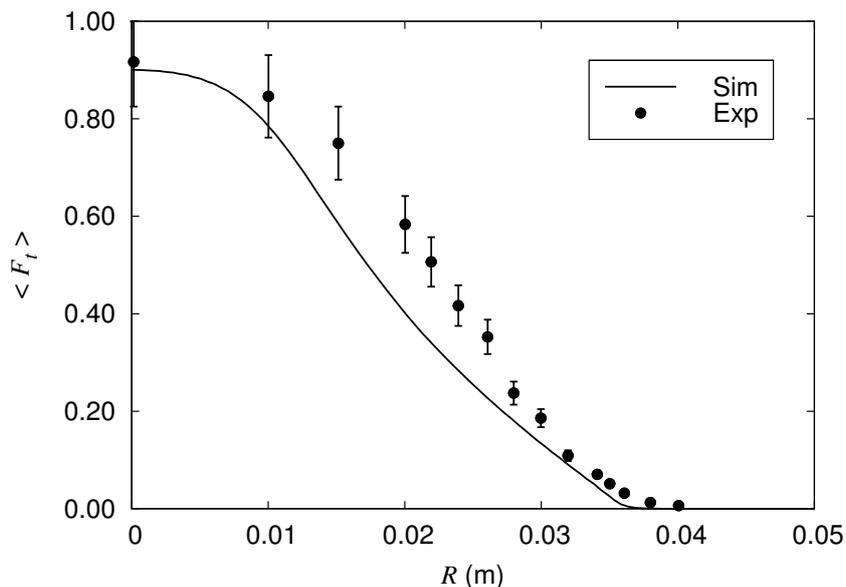


Figura 5.30: Validação - Fração de Mistura Média $\langle F_t \rangle$ em $h=0,5$ cm.

Os valores simulados de $\langle F_t \rangle$ são menores do que as medições experimentais em posições próximas à superfície do queimador, Figuras 5.30 e 5.29, mas são maiores a medida que a distância aumenta, Figura 5.27. Portanto, a simulação forneceu uma pobre mistura entre os reagentes, abaixo da esperada apresentada pelos dados experimentais. Provavelmente isto ocorreu devido ao baixo grau de turbulência simulada, levando a uma reação ineficiente e a uma chama estreita e alta, em consequência da maior demora para a queima do metano.

As Figuras 5.31, 5.32, 5.33 e 5.34 apresentam os resultados para a componente horizontal da velocidade, $\langle U_y \rangle$. Apesar dos resultados estarem convergidos tanto em relação ao tempo quanto em relação ao tamanho da malha, eles não representam bem os dados experimentais na região de fora da chama. Isto também está relacionado com o pouco grau de mistura dos reagentes, já que a velocidade horizontal corresponde ao entranhamento de ar na região da chama. Além disso, ressalta-se o fato de que os dados experimentais obtidos pelo PIV são diferentes da média de Favre calculada nas simulações.

As Figuras 5.35, 5.36, 5.37 e 5.38 demonstram os resultados para a velocidade axial média da chama. Os resultados possuem razoável acordo qualitativo com as medições experimentais, uma vez que estas apresentam leve falta de simetria, não apresentada

na simulação convergida. Dessa forma, acredita-se as discrepâncias entre os dados do experimento e da simulação são causados pela ausência de simulação das perturbações na injeção de metano inerentes ao experimento.

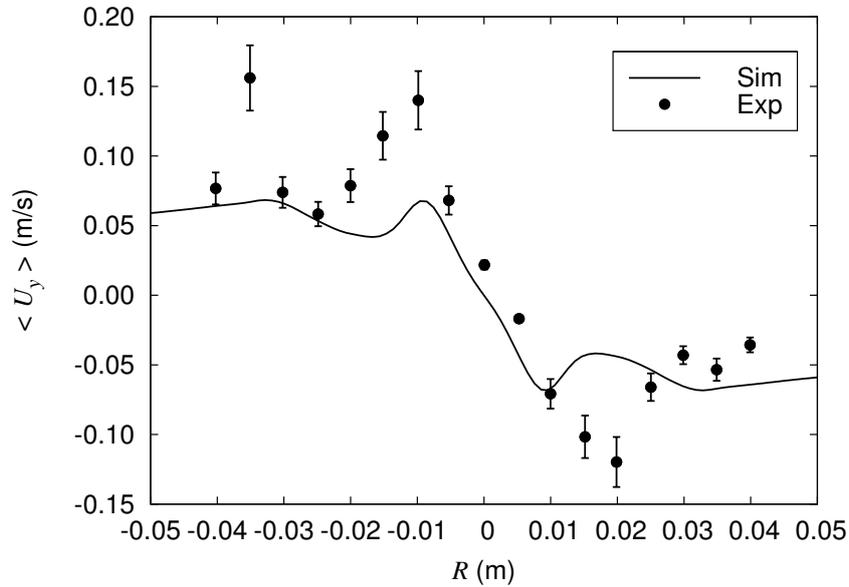


Figura 5.31: Validação - Velocidade Radial Média $\langle U_y \rangle$ (m/s) em $h=5$ cm.

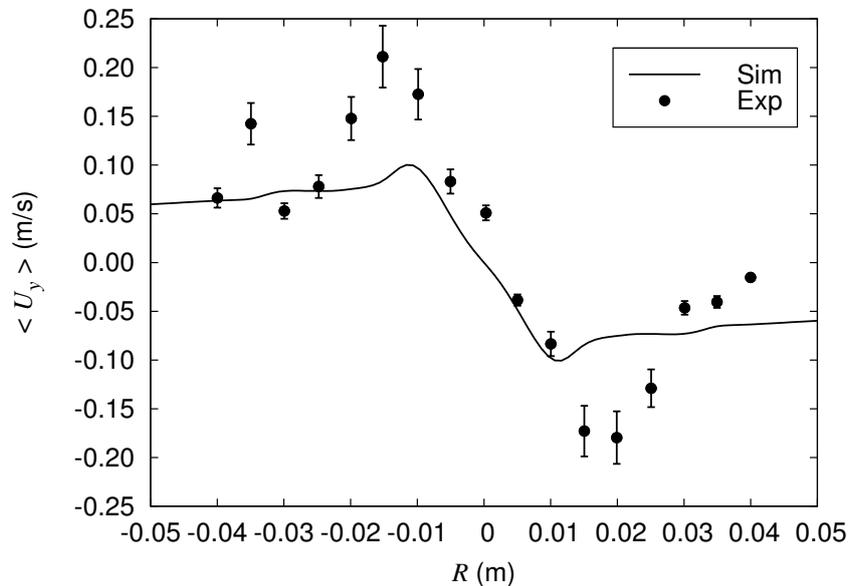


Figura 5.32: Validação - Velocidade Radial Média $\langle U_y \rangle$ (m/s) em $h=4$ cm.

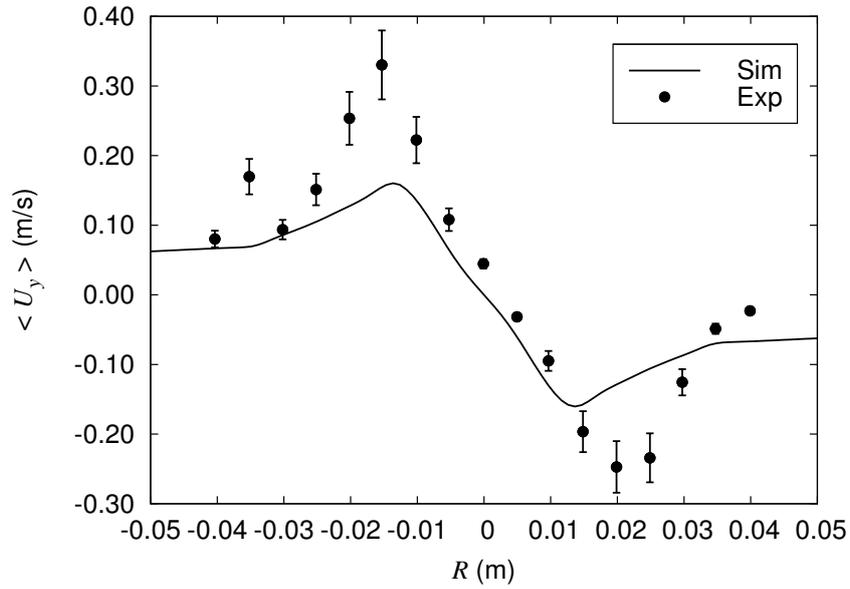


Figura 5.33: Validação - Velocidade Radial Média $\langle U_y \rangle$ (m/s) em $h=3$ cm.

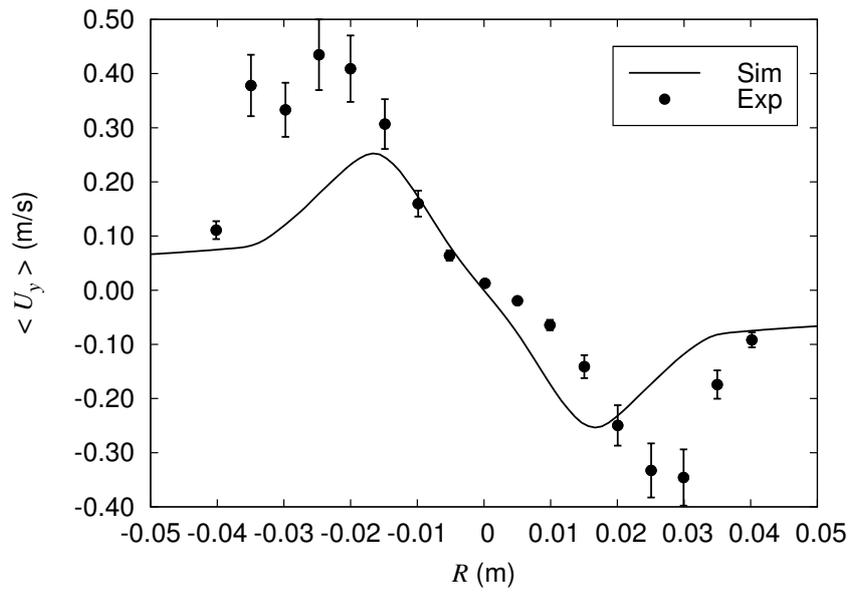


Figura 5.34: Validação - Velocidade Radial Média $\langle U_y \rangle$ (m/s) em $h=2$ cm.

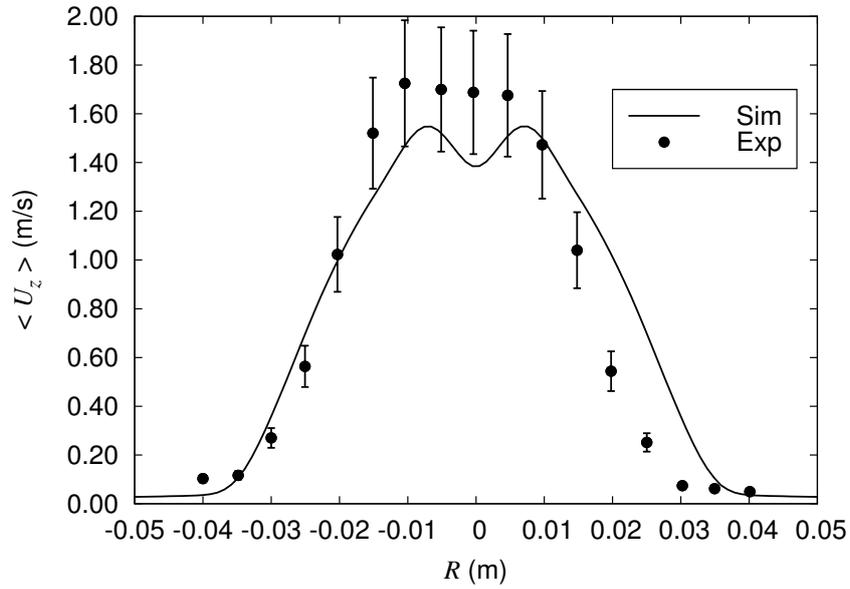


Figura 5.35: Validação - Velocidade Axial Média $\langle U_z \rangle$ (m/s) em h=6 cm.

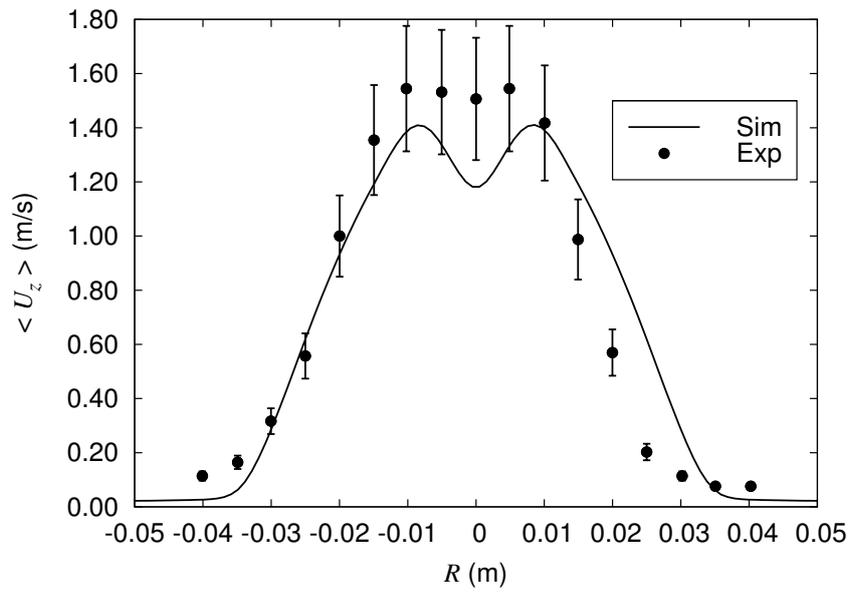


Figura 5.36: Validação - Velocidade Axial Média $\langle U_z \rangle$ (m/s) em h=5 cm.

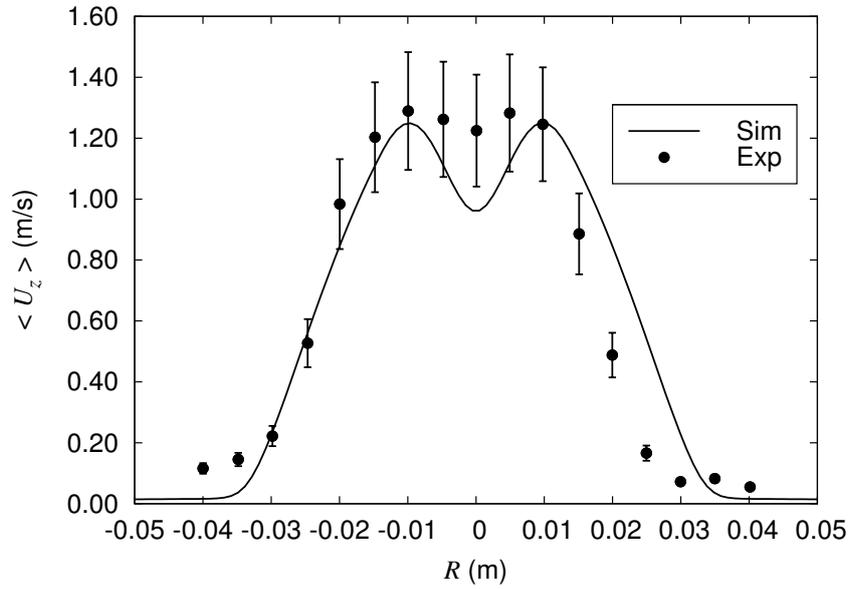


Figura 5.37: Validação - Velocidade Axial Média $\langle U_z \rangle$ (m/s) em $h=4$ cm.

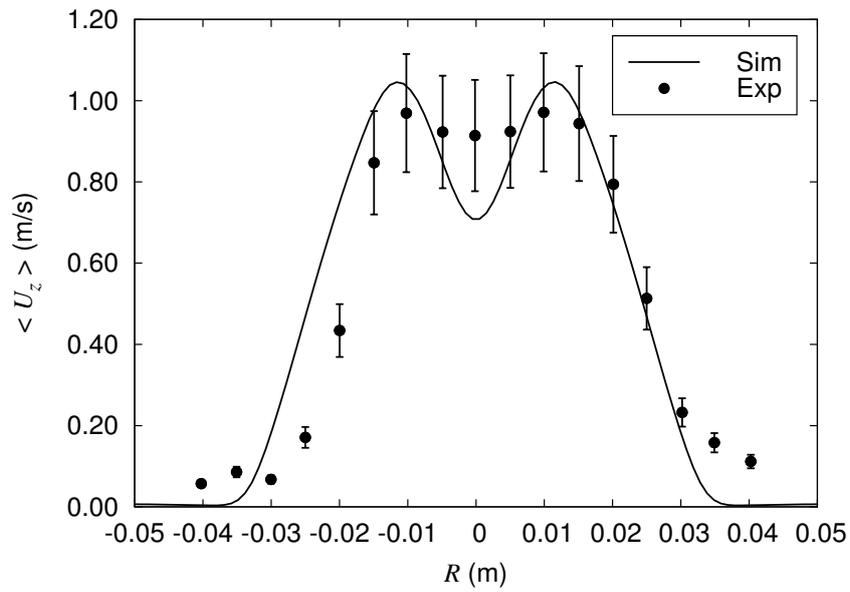


Figura 5.38: Validação - Velocidade Axial Média $\langle U_z \rangle$ (m/s) em $h=3$ cm.

Como demonstrado nos resultados, quanto maior a altura, maior a velocidade axial, o que pode ser facilmente explicado pelo efeito acumulado da força de empuxo relacionada ao aumento da temperatura causado pela reação de combustão. Em cada altura, o perfil de velocidade axial média apresenta um pico em uma posição radial que está relacionado a posição da frente da chama. Próximo à superfície do queimador, os picos são maiores e, a medida que a chama avança a jusante, os picos vão suavizando devido a mistura turbulenta.

No intuito de aprofundar a análise da chama, outros resultados relevantes obtidos são apresentados.

5.5.2 Perfis de Escoamento

Dois campos vetoriais de velocidade são apresentados nas Figuras 5.39 e 5.40, um campo médio e um campo instantâneo em $t = 10$ s, respectivamente. Verifica-se no campo médio que a medida que a chama progride a jusante a velocidade se dissipa, devido em grande parte à turbulência presente no escoamento que difunde *momentum* radialmente. No campo instantâneo de velocidade nota-se a presença de vórtices ocasionados pela tensão de cisalhamento gerada pela velocidade da chama.

A Figura 5.41 apresenta o perfil de velocidade média obtido na linha de centro. Como esperado, a velocidade média aumenta a jusante da chama. No entanto, quando a taxa de reação diminui os produtos da combustão começam a resfriar e a chama perde força de empuxo, reduzindo sua velocidade. Além disso, os efeitos turbulentos dissipam o *momentum* radialmente, ocasionando também em perda de velocidade na linha de centro.

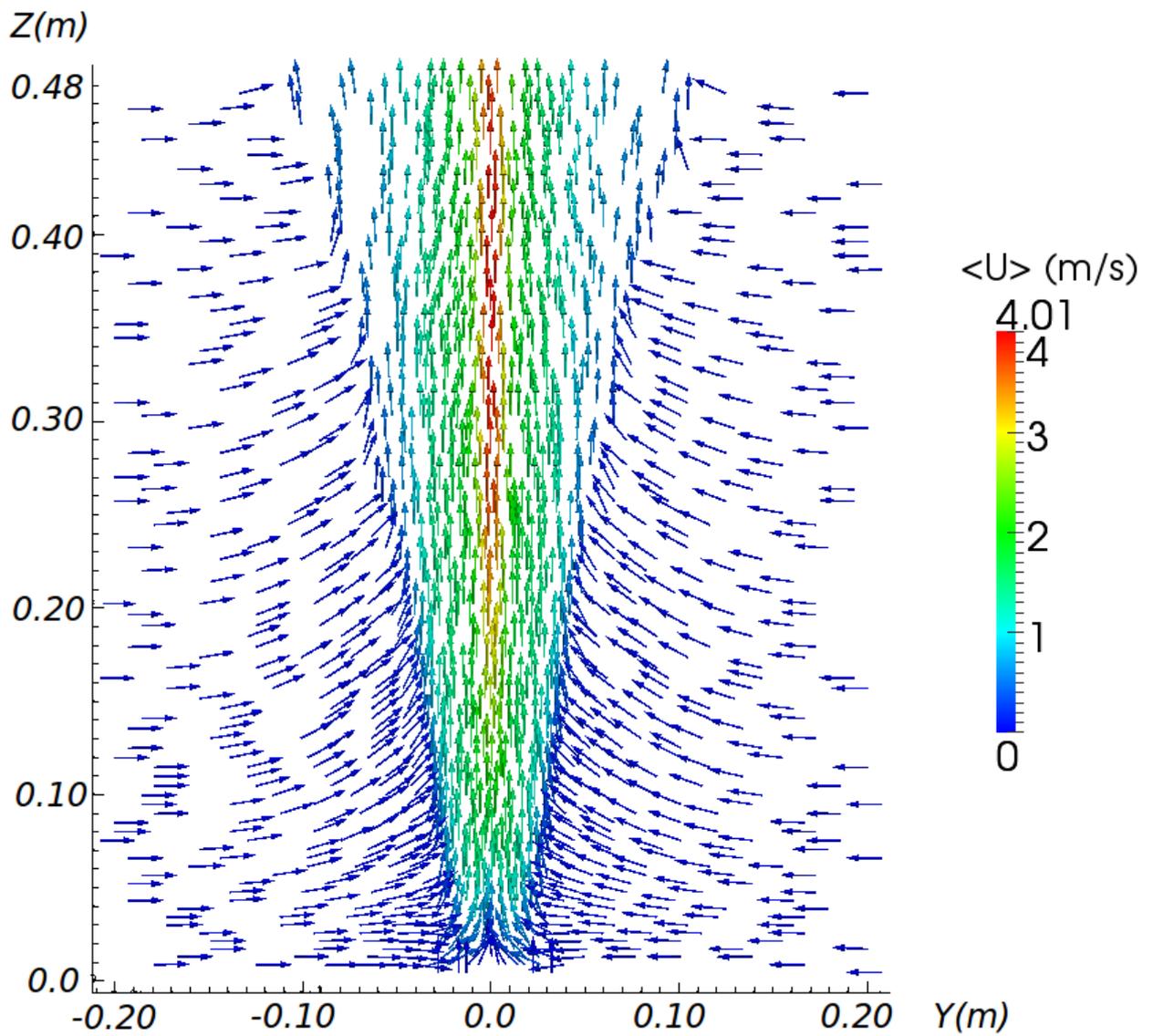


Figura 5.39: Campo vetorial de velocidade média $\langle U \rangle$ (m/s) - Corte transversal Y-Z.

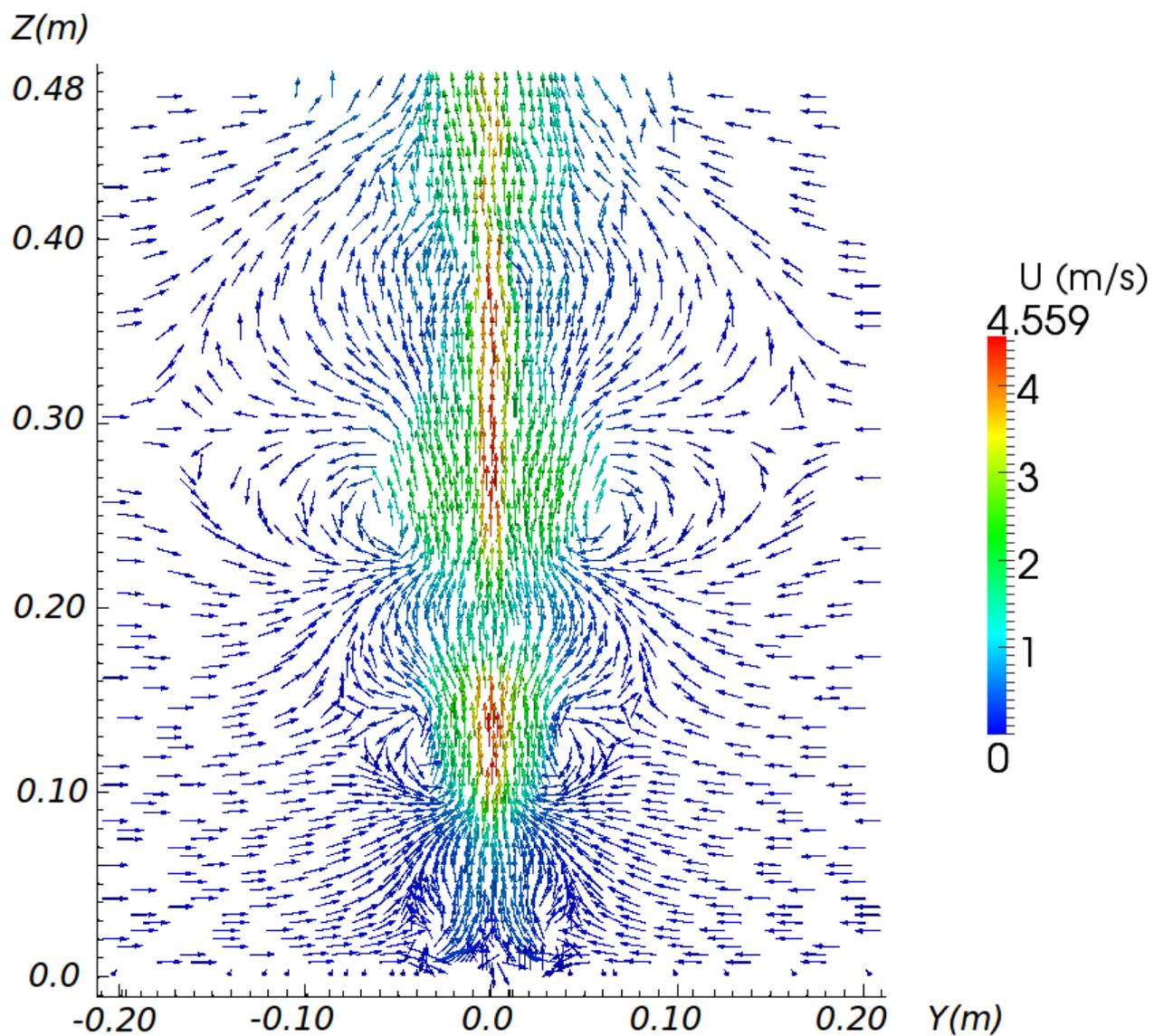


Figura 5.40: Campo vetorial de velocidade instantânea U (m/s) - Corte transversal $Y-Z$ em $t=10$ s.

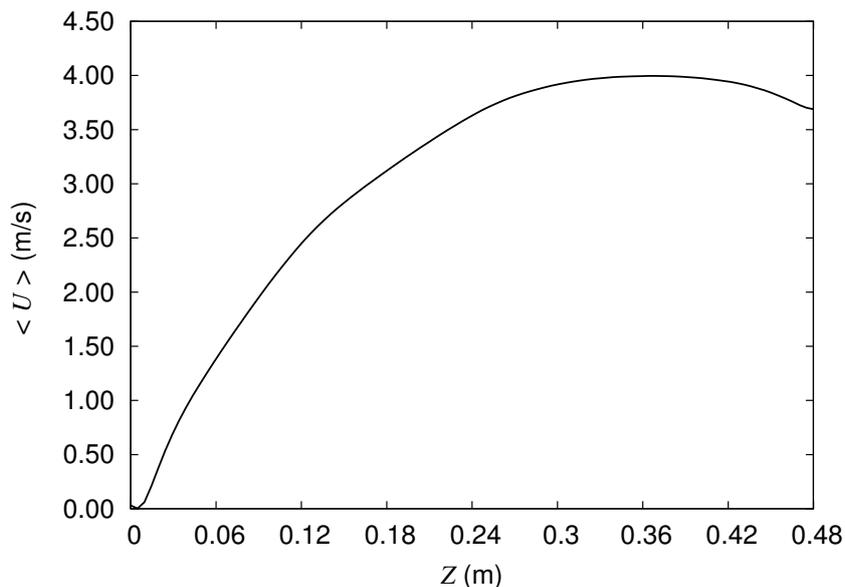


Figura 5.41: Velocidade média $\langle U \rangle$ (m/s) na linha de centro da chama.

5.5.3 Perfis de Temperatura

Dois perfis de temperatura média são apresentados, Figuras 5.42 e 5.43, resultados obtidos nas alturas de 10 e 0,5 cm, respectivamente. Nota-se na Figura 5.43, representando uma altura bem próxima ao queimador, um pico de temperatura bem definido em uma posição radial próxima a 2,5 cm. Já na Figura 5.42, em uma altura mais afastada, verifica-se um perfil mais suave da temperatura média, com máximo localizado praticamente no eixo da chama. Estes picos indicam a zona de reação da chama, e o perfil suave apresentado na maior elevação se deve à mistura turbulenta dos produtos quentes da combustão.

É possível fazer a comparação entre o perfil de temperatura instantâneo com uma fotografia de uma chama produzida pelo queimador com a mesma geometria da simulação, exposta em Zhou e Gore [10]. Nota-se a alta similaridade entre o formato da chama apresentado na Figura 5.45, no tempo de 6,9 s, e a chama real exposta na Figura 5.44. Ainda analisando a Figura 5.45, verifica-se que a temperatura máxima atingida possui valor aproximado de 1.800 K, abaixo da temperatura adiabática de chama em uma combustão do metano com ar que, segundo Turns [76], é de 2.226 K. É esperado que o valor

obtido esteja abaixo da temperatura adiabática pois a chama perde calor principalmente emissão de energia radiante.

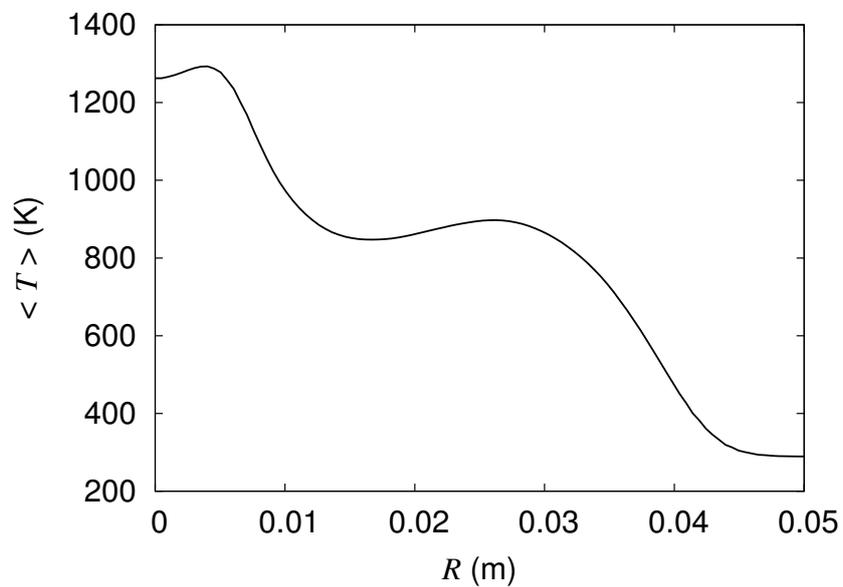


Figura 5.42: Temperatura Média $\langle T \rangle$ (K) em $h=10$ cm.

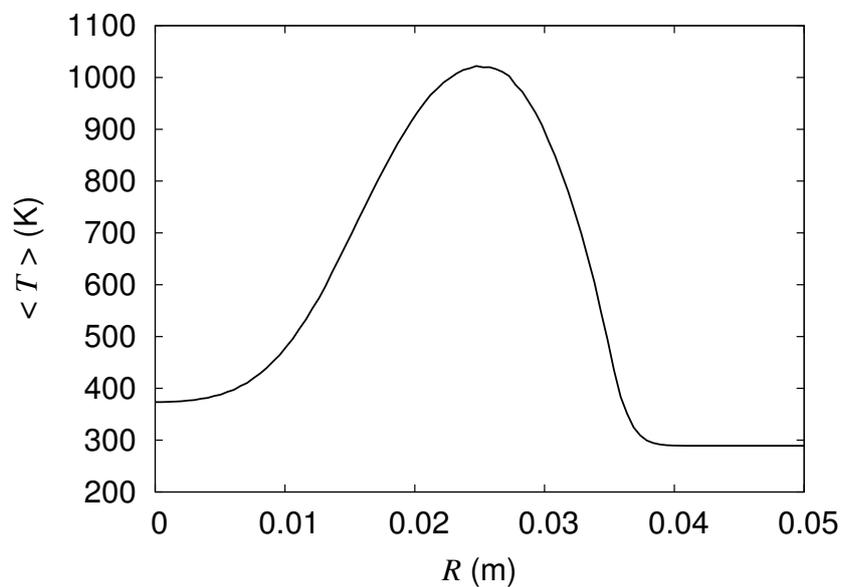
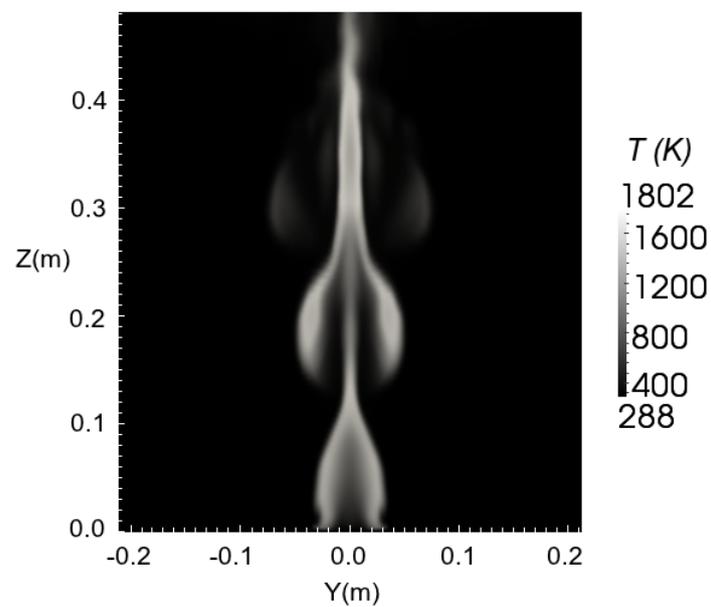


Figura 5.43: Temperatura Média $\langle T \rangle$ (K) em $h=0,5$ cm.



Figura 5.44: Fotografia da chama - Retirado de Zhou e Gore [10]

Figura 5.45: Perfil de Temperatura Instantânea T (K) em 6,9 s.

5.5.4 Perfis de Vorticidade

A vorticidade é definida como a aplicação do operador rotacional sobre o campo de velocidade, e trata-se de uma propriedade muito útil para compreender o escoamento

obtido, pois indica a presença de rotação no fluido. A Figura 5.46 apresenta os vetores de vorticidade projetados no plano x-y em uma distância de 5 cm do queimador.

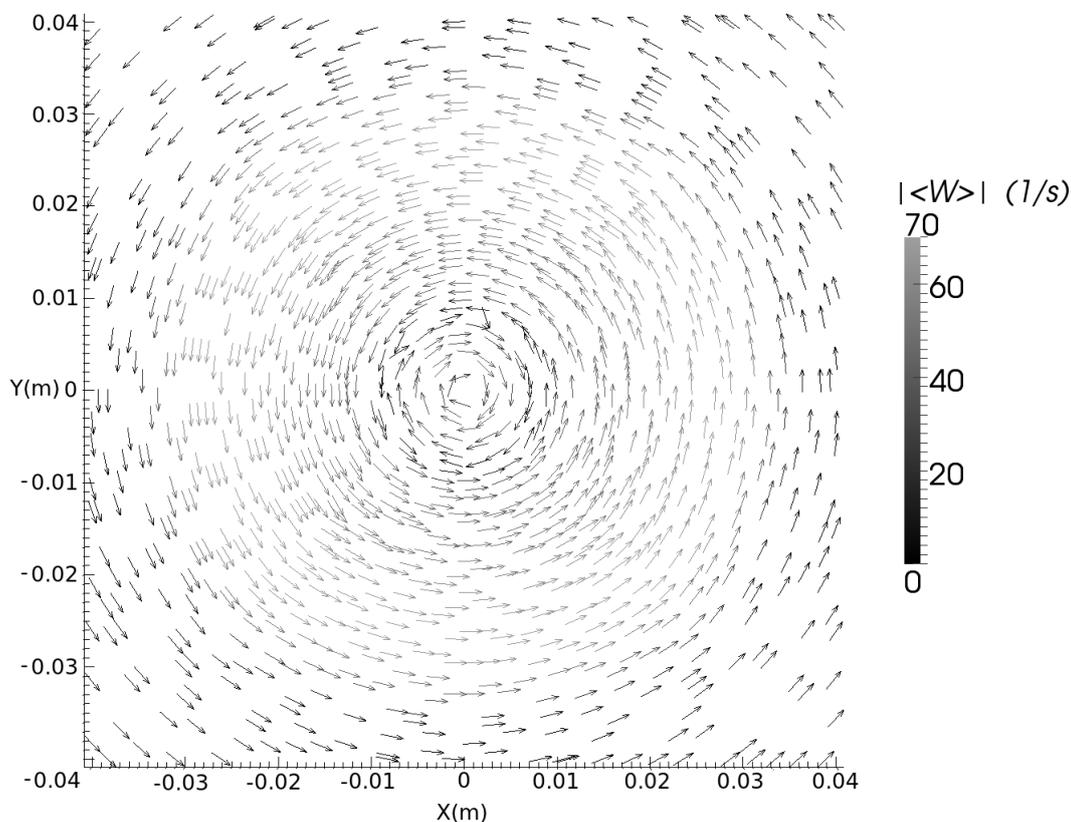


Figura 5.46: Campo vetorial de vorticidade média $\langle W \rangle$ (1/s) em $h=5$ cm.

Na região de fora da chama, os vetores de vorticidade estão orientados em sentido anti-horário, o que indica uma circulação toroidal do ar que se aproxima da chama por baixo do plano, com velocidade radial negativa. No interior da chama, os vetores estão orientados em sentido horário, o que também indica uma circulação toroidal do metano na direção da frente da chama, com velocidade radial positiva. A Figura 5.47 apresenta o resultado de vorticidade média na altura de 5 cm acima da superfície do queimador apenas para a reta $-5 \text{ cm} < R < 5 \text{ cm}$. É possível notar quatro transições no gráfico relacionadas a inversão do sentido da rotação do escoamento, assim como na Figura 5.46.

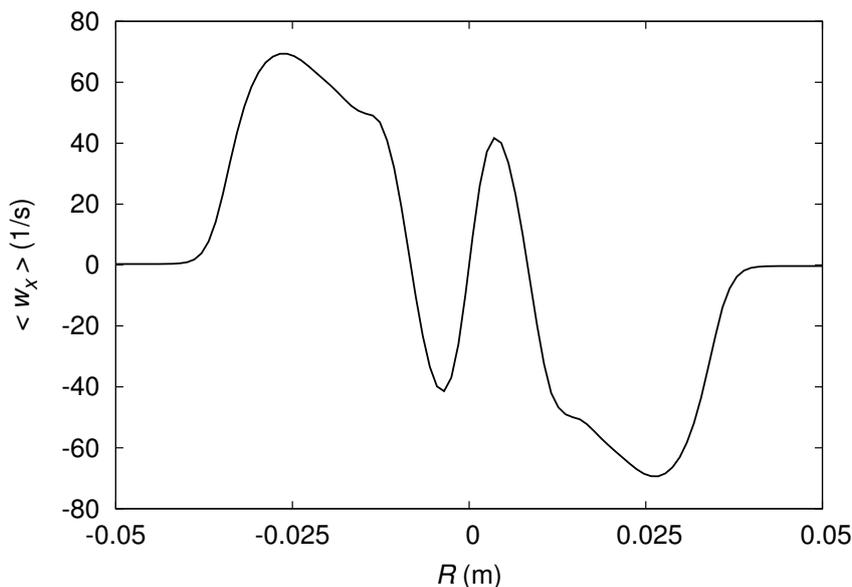


Figura 5.47: Vorticidade média $\langle W \rangle$ (1/s) em $h=5$.

Nota-se que a frente da chama pode ser localizada na zona de transição entre as orientações dos vetores. Nesta região, inclusive, a vorticidade é nula pois o escoamento médio é quase totalmente ascendente e ausente de rotação. Foi verificado que a componente vertical da vorticidade média é muito próximo de zero, razão pela qual não será apresentada, indicando que a chama não adquiriu rotação em torno de seu próprio eixo.

5.5.5 Taxa de Liberação de Calor - HRR

Um possível resultado quantitativo que pode ser calculado é a taxa de liberação de calor (*Heat Release Rate - HRR*), que é um importante fator para verificar se a simulação está apresentando resultados condizentes. O *HRR* pode ser definido como a integral volumétrica da taxa de liberação de calor q_c :

$$HRR = \int_V q_c dV \quad (5.1)$$

Para uma combustão completa, utilizando o calor de combustão do metano $\Delta H_c^\circ = -50144 \text{ kJ/kgCH}_4$ [33], e para uma vazão de 84,3 mg/s, tem-se o valor teórico de 4,23 kW. Logo, é possível realizar a comparação com o valor simulado para saber o quanto a simulação desviou de um caso ideal. A Figura 5.48 apresenta a evolução de *HRR* ao

longo do tempo. Utilizando a mesma metodologia para a obtenção das médias aritméticas

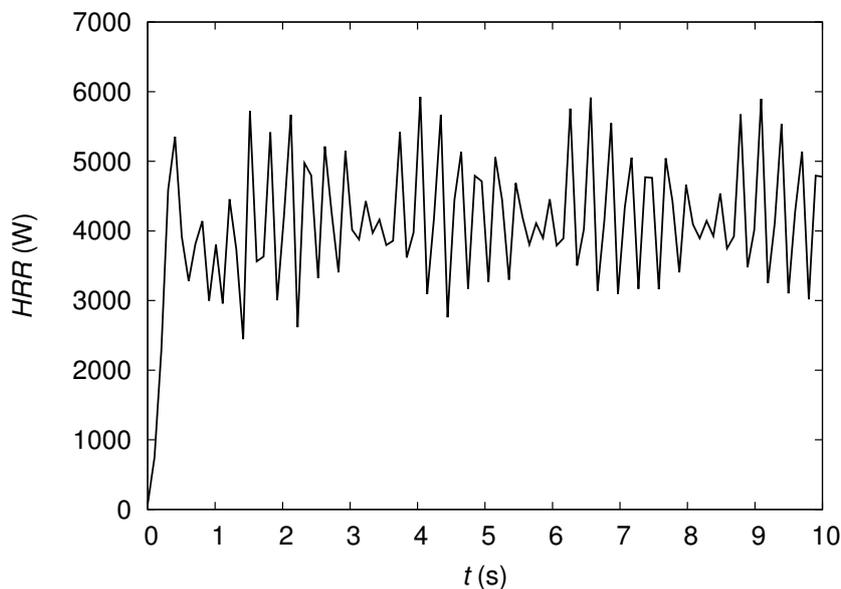


Figura 5.48: Taxa de Liberação de Calor HRR (W) em 10 segundos de simulação.

foi calculado o valor médio de HRR entre os instantes de tempo 4 e 10 s. Dessa forma, obteve-se $\langle HRR \rangle(4s, 10s) = 4,24$ kW, em grande acordo com o valor teórico de 4,23 kW. Este resultado é um parâmetro que revela que possivelmente todo o metano está sendo queimado dentro do domínio, e que a altura da geometria da simulação foi adequada.

5.5.6 Coeficiente de Absorção Médio de Planck

Por fim, para verificar a confiabilidade do modelo coeficiente de absorção médio de Planck é demonstrado o perfil instantâneo do coeficiente de absorção obtido na Figura 5.49 no instante de tempo de 10 s.

Os maiores valores de κ_p , como 5 (1/m), estão na região de combustível ainda não queimado, com maior concentração de CH_4 . Sabendo que as outras duas espécies participantes, H_2O e CO_2 , são formadas em regiões com excesso de ar, e conseqüentemente com alto índice de N_2 , é de se esperar que seus coeficientes gerados nesta região sejam mais baixos, já que o modelo também depende da concentração das espécies, gerando valores de κ_p por volta de 3 (1/m).

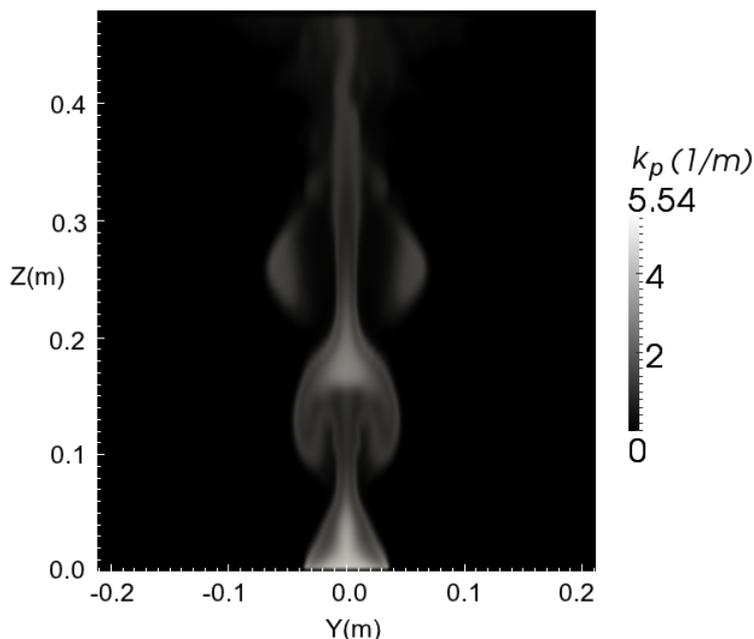


Figura 5.49: Coeficiente de absorção κ_p em $t = 10$ s.

Sabendo que o uso do coeficiente de absorção médio de Planck na RTE é adequado para chamas opticamente finas, é conveniente saber a ordem de grandeza da espessura óptica da chama. Levando-se em conta que o diâmetro do queimador D é de 7,1 cm, e que a chama só é considerada opticamente fina se $\kappa_p D \ll 1$, é possível estimar que nas regiões de alta influência da radiação térmica (alta temperatura) κ_p possui valor próximo de 3 (1/m) e, portanto, $\kappa_p D \approx 0,21$. Logo, o modelo de absorção e emissão utilizado está relativamente adequado ao modelo radiante FVDOM usado no caso proposto, pois a chama apresenta pequena espessura óptica embora $\kappa_p D$ não seja tão menor que 1. Ressalta-se ainda que o resultado de uma chama com pequena espessura óptica deve ocasionar algum erro para mais na radiação emitida, simulando temperaturas de chamas que podem ser menores que as reais.

Capítulo 6

Conclusões

O presente trabalho propôs a simulação de uma chama de metano através do pacote computacional OpenFOAM, empregando um escoamento reativo a partir de equações compressíveis a baixos números de Mach, considerando a radiação térmica em meio participante e utilizando o modelo de turbulência LES. Foi realizada a revisão bibliográfica dos principais aspectos do trabalho, sendo apresentados os seus desafios e hipóteses simplificadoras para obtenção do resultado final.

Avaliou-se o modelo de radiação térmica FVDOM empregado em conjunto com o modelo de coeficiente de absorção médio de Planck, que acoplados à equação da energia gerou perfis médios de temperatura condizentes com o esperado. O modelo reacional de dissipação de vórtices mostrou-se adequado à resolução do problema quando utilizado com o modelo de turbulência LES.

De acordo com estes resultados, o *solver* FireFOAM foi capaz de simular a chama em pequeno desacordo com os dados experimentais, validando o seu uso para este tipo de caso. O teste de malha foi realizado, assim como a obtenção de médias temporais para aprimoramento dos dados. A análise das variáveis médias de concentração e velocidade elucidam que os modelos numéricos empregados são capazes de prever o comportamento de chamas de metano de pequeno porte com sucesso. A mais importante discrepância se

deve à baixa mistura dos reagentes prevista pela modelagem.

6.1 Sugestões para Trabalhos Futuros

Alguns aspectos do trabalho ainda precisam ser investigados, principalmente para tratar o problema em escala de engenharia. Portanto, sugere-se como possíveis temas para próximos estudos:

- Utilização de maior número de reações químicas para modelar a combustão, empregando outros modelos numéricos como o *PDF flamelet*, tanto para a combustão do metano quanto para combustíveis mais pesados. É provável que, com o aumento da escala do problema, haja considerável presença de novas espécies derivadas de reações incompletas que precisam ser modeladas.
- Impor alguma perturbação ou um perfil turbulento na condição de contorno de injeção de metano, que foi simulada como uniforme. Provavelmente o aparato experimental apresenta algum grau de perturbação que não foi simulado no estudo realizado, o que poderia contribuir para melhor acordo com os dados experimentais.
- Levar em consideração a interação da radiação térmica por espalhamento. A formação de material particulado é grande responsável por espalhamento da radiação térmica, e precisa ser considerada na modelagem de chamas de maior escala e para combustíveis mais pesados.
- Emprego de modelos mais robustos para cálculo da constante de emissão e absorção, já que para chamas de larga escala, a hipótese de meio opticamente fino não é mais válida e comprometeria o uso do coeficiente médio de Planck. Neste caso, novos modelos de resolução espectral da RTE precisam ser investigados.
- Analisar a eficiência computacional comparando com outras técnicas, como o modelo de turbulência RANS, para estabelecer os métodos numéricos mais eficientes e auxiliar no futuro uso da ferramenta em problemas de engenharia.

Referências Bibliográficas

- [1] ZENG, W. R.; CHOW, W. K. A note on modeling combustion of common fuels with mixture fraction. *International Journal on Engineering Performance-Based Fire Codes*, p. 6–11, 2011.
- [2] YEOH, G. H.; YUEN, K. K. *Computational fluid dynamics in fire engineering*. 1. ed. Oxford: Butterworth-Heinemann, 2009.
- [3] MANGANI, L. *Development and validation of an object oriented cfd solver for heat transfer and combustion modeling in turbomachinery applications*. 2009. Tese (Doutorado) - Università degli Studi di Firenze, Firenze, 2009.
- [4] RUSCHE, H. *Computational fluid dynamics of dispersed two-phase flows at high phase fractions*. 2002. Tese (Doutorado) - Imperial College of Science, Technology and Medicine, Londres, 2002.
- [5] SCHÄFER, M. *Computational engineering – introduction to numerical methods*. 1. ed. Berlin: Springer, 2006.
- [6] VERSTEEG, H. K.; MALALASEKERA, W. *An introduction to computational fluid dynamics - the finite volume method*. 2. ed. Reino Unido: Longman Scientific and Technical, 2007.
- [7] MISHRA, S. C.; ROY, H. K. Solving transient conduction and radiation heat transfer problems using the lattice boltzmann method and the finite volume method. *Journal of Computational Physics*, v. 223, p. 89–107, 2007.

- [8] BARLOW, R. S.; KARPETIS, A. N.; FRANK, J. H.; CHEN, J. Y. Scalar profiles and no formation in laminar opposed-flow partially premixed methane/air flames. *Combustion and Flame*, v. 127, p. 2102–2118, 2001.
- [9] OPENFOAM. *User guide*. Openfoam Foundation, 2012.
- [10] ZHOU, X. C.; GORE, J. P. Experimental estimation of thermal expansion and vorticity distribution in a buoyant diffusion flame. *Twenty-Seventh Symposium (International) on Combustion/The Combustion Institute*, p. 2767–2773, 1998.
- [11] VEYNANTE, D.; VERVISCH, L. Turbulent combustion modeling. *Progress in Energy and Combustion Science*, v. 28, p. 193–266, 2002.
- [12] MCGRATTAN, K. Fire modeling: Where are we? where are we going? *Fire Safety Science – Proceedings of the Eighth International Symposium*, p. 53–68, 2005.
- [13] CFX. *Solver theory guide*. ANSYS, 2009.
- [14] FLUENT. *Theory guide*. ANSYS, 2009.
- [15] MAGNUSSEN, B. F.; RIAN, K. E.; GRIMSMO, B.; LILLEHEIE, N. I.; KLEIVELAND, R. N.; VEMBE, B. E. Computational analysis of large-scale fires in complex geometries - a means to safeguard people and structural integrity in the oil and gas industry. *Chemical Engineering Transactions*, v. 31, p. 793–798, 2013.
- [16] LUDWIG, J. C.; MORTIMORE, S. *Phoenics-vr reference guide*. CHAM, 2011.
- [17] MCGRATTAN, K.; HOSTIKKA, S.; FLOYD, J.; BAUM, H.; REHM, R.; MELL, W.; R., M. *Fire dynamics simulator (version 5) technical reference guide*. 1. ed. National Institute of Standards and Technology, 2010.
- [18] XIN, Y.; GORE, J. P.; MCGRATTAN, K. B.; REHM, R. G.; BAUM, H. R. Fire dynamics simulation of a turbulent buoyant flame using a mixture-fraction-based combustion model. *Combustion and Flame*, v. 141, p. 329–335, 2005.
- [19] XIN, Y.; FILATYEV, S. A.; BISWAS, K.; GORE, J. P.; REHM, R. G.; BAUM, H. R. Fire dynamics simulations of a one-meter diameter methane fire. *Combustion and Flame*, v. 153, p. 499–509, 2008.

- [20] SKARSBØ, L. R. *An experimental study of pool fires and validation of different cfd fire models*. 2011. Dissertação (Mestrado) - University of Bergen, Bergen, 2011.
- [21] WEN, J. X.; KANG, K.; DONCHEV, T.; KARWATZKI, J. M. Validation of fds for the prediction of medium-scale pool fires. *Fire Safety Journal*, v. 42, p. 127–138, 2006.
- [22] SANTOS, E. D. *Análise de escoamentos não-isotérmicos, incompressíveis, utilizando simulação de grandes escalas e o método de elementos finitos*. 2007. Dissertação (Mestrado) - Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2007.
- [23] MALISKA, C. R. *Transferência de calor e mecânica dos fluidos computacional*. 2. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2004.
- [24] FOX, R. W.; PRITCHARD, P. J.; MCDONALD, A. T. *Introduction to fluid mechanics*. 7. ed. Wiley, 2008.
- [25] BIRD, R. B.; STEWART, W. E.; LIGHTFOOT, E. N. *Fenômenos de transporte*. 2. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2002.
- [26] FERZIGER, J. H.; PERIC, M. *Computational methods for fluid dynamics*. 3. ed. Berlin: Springer, 2004.
- [27] FICK, A. Ueber diffusion. *Annalen der Physik*, v. 170, p. 59–86, 1855.
- [28] HOWARD, R. J. A.; TOPOROV, D. The eddy dissipation combustion model developed for large eddy simulation. *Combustion and Flame*, C4207.
- [29] PANJWANI, B.; ESTESVAG, I. S.; RIAN, K. E.; GRUBER, A. Subgrid combustion modeling for large eddy simulation (les) of turbulent combustion using eddy dissipation concept. *V European Conference on Computational Fluid Dynamics*, 2010.
- [30] MOSSI, A. *Modelagem da radiação térmica em chamas laminares da combustão de metano em ar*. 2011. Tese (Doutorado) - Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2011.
- [31] HAUKE, G. *An introduction to fluid mechanics and transport phenomena*. 1. ed. Berlin: Springer, 2008.

- [32] WELLER, H.; JANSSENS, M.; GREENSHIELDS, C.; HEATHER, A.; FERRARIS, S.; MACPHERSON, G.; BLANCHONNET, H.; COLLINGS, J. Openfoam release notes for version 1.7.0. <http://www.openfoam.org/archive/1.7.0/docs/release-notes.php>. 06 Jan. 2013.
- [33] ROGERS, G. F. C.; MAYHEW, Y. R. *Thermodynamic and transport properties of fluids*. Wiley, 1995.
- [34] SMITH, J. M.; VAN NESS, H. C.; ABBOTT, M. M. *Introduction to chemical engineering thermodynamics*. 5. ed. Nova York: McGraw-Hill, 1996.
- [35] BAUKAL, C. E.; SCHWARTZ, R. E. *The john zink combustion handbook*. 1. ed. Oklahoma: CRC Press, 2001.
- [36] ASPDEN, A. J.; DAY, M. S.; BELL, J. B. Lewis number effects in distributed flames. *Proceedings of the Combustion Institute*, v. 33, p. 1473–1480, 2011.
- [37] POLING, B. E.; PRAUSNITZ, J. M.; O'CONNELL, J. P. *The properties of gases and liquids*. 5. ed. Nova York: The McGraw-Hill, 2001.
- [38] INCROPERA, F. P.; DEWITT, D. P. *Transferência de calor e de massa*. 5. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2003.
- [39] CASSOL, F. *Aplicação da análise inversa via otimização extrema generalizada em projetos de iluminação*. 2009. Dissertação (Mestrado) - Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2009.
- [40] PLANCK, M. On the law of distribution of energy in the normal spectrum. *Annalen der Physik*, v. 4 (3), p. 553–563, 1901.
- [41] MODEST, M. F. *Radiative heat transfer*. 2. ed. San Diego: Academic Press, 2003.
- [42] HARTMANN, F.; KATZ, C. *Structural analysis with finite elements*. 2. ed. Berlin: Springer, 2007.
- [43] JASAK, H. *Error analysis and estimation for definite volume method with applications to fluid flow*. 1996. Tese (Doutorado) - Imperial College of Science, Technology and Medicine, Londres, 1996.

- [44] PATANKAR, S. V.; SPALDING, D. B. A calculation procedure for heat, mass and momentum transfer in three-dimensional parabolic flows. *Int. J. Heat Mass Transfer*, v. 15, p. 1787–1806, 1972.
- [45] NETO, A. S. *Turbulência nos fluidos aplicada*. Universidade Federal de Uberlândia, 1995.
- [46] LUO, K.; PITSCHE, H.; PAI, M. G. Direct numerical simulation of three-dimensional swirling n-heptane spray flames. *Center for Turbulence Research Annual Research Briefs*, v. 28, p. 171–183, 2009.
- [47] BASTIAANS, R. J. M.; VREMAN, A. W.; PITSCHE, H. Dns of lean hydrogen combustion with flamelet-generated manifolds. *Center for Turbulence Research Annual Research Briefs*, v. 28, p. 195–206, 2007.
- [48] JOHANSEN, L. C. R.; YIN, C. Rans simulation of oxy-natural gas combustion. Technical report, Aalborg University, 2010.
- [49] PENG, D.; ROBINSON, D. A new two-constant equation of state. *Industrial and Engineering Chemistry Fundamentals*, v. 15, p. 59–64, 1976.
- [50] CUTRONE, L.; DE PALMA, P.; PASCAZIO, G.; NAPOLITANO, M. A rans flamelet–progress-variable method for computing reacting flows of real-gas mixtures. *Computers and Fluids*, v. 39, p. 485–498, 2010.
- [51] WILCOX, D. C. *Turbulence modeling for cfd*. 1. ed. California: D C W Industries, 1994.
- [52] MCDONOUGH, J. M. *Introductory lectures on turbulence - physics, mathematics and modeling*. 2. ed. University of Kentucky: Departments of Mechanical Engineering and Mathematics, 2007.
- [53] SMAGORINSKY, J. General circulation experiments with the primitive equations. *Monthly Weather Review*, v. 91(3), p. 99–164, 1963.

- [54] VILLIERS, E. *The potential of large eddy simulation for the modeling of wall bounded flows*. 2006. Tese (Doutorado) - Imperial College of Science, Technology and Medicine, Londres, 2006.
- [55] SALVADOR, N. M. C. *Simulação de grandes escalas para chamas reativas não premisturadas com química detalhada*. 2012. Tese (Doutorado) - Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais, São José dos Campos, 2012.
- [56] VREMAN, B.; GEURTS, B.; KUERTEN, H. A priori tests of large eddy simulation of the compressible plane mixing layer. *Journal of Engineering Mathematics*, v. 29, p. 299–327, 1995.
- [57] GARNIER, E.; ADAMS, N.; SAGAUT, P. *Large eddy simulation for compressible flows - scientific computation*. 1. ed. Berlin: Springer, 2009.
- [58] MARAGKOS, G.; RAUWOENS, P.; MERCI, B. Large eddy simulations of a large turbulent helium plume with firefoam. *Proceedings of the European Combustion Meeting*, 2011.
- [59] ERLEBACHER, G.; HUSSAINI, H. Y.; SPEZIALE, C. G.; ZANG, T. A. Toward the large-eddy simulation of compressible turbulent flows. Technical report, Institute for Computer Applications in Science and Engineering, 1991.
- [60] LILLY, D. K. On the application of the eddy viscosity concept in the inertial sub-range of turbulence. *NCAR Report*, v. 123, 1966.
- [61] ROGALLO, R. S.; MOIN, P. Numerical simulation of turbulent flows. *Annual Review of Fluid Mechanics*, v. 16, p. 99–137, 1984.
- [62] GERMANO, M.; PIOMELLI, U.; MOIN, P.; CABOT, W. A dynamic subgrid-scale eddy viscosity model. *Physics of Fluids*, v. 3 (7), p. 1760–1765, 1991.
- [63] LILLY, D. K. A proposed modification of the germano subgrid-scale closure model. *Physics of Fluids*, v. 4, p. 633–635, 1992.

- [64] TABIB, M.; SCHWARZ, P. *One-equation sub-grid scale (sgs) modelling for eulerian-eulerian large eddy simulation (eeles) of two phase solvent extraction pump mixer unit*. Australasian Fluid Mechanics Conference, 17., 2010, Auckland, New Zealand.
- [65] DI SARLI, V.; DI BENEDETTO, A.; RUSSO, G. The role of the combustion submodel for large eddy simulation of transient premixed flame-vortex interactions in gas explosions. *The Italian Association of Chemical Engineering*, v. 26, p. 345–350, 2012.
- [66] XIAO, H.; JENNY, P. A consistent dual-mesh framework for hybrid les/rans modeling. *Journal of Computational Physics*, v. 231, p. 1848–1865, 2011.
- [67] SPALDING, D. B. Mixing and chemical reaction in steady confined turbulent flames. *Thirteenth Symposium (International) on Combustion/The Combustion Institute*, p. 649–657, 1971.
- [68] MAGNUSSEN, B. F.; HJERTAGER, B. H. On mathematical modeling of turbulent combustion with special emphasis on soot formation and combustion. *Sixteenth Symposium (International) on Combustion/The Combustion Institute*, p. 719–729, 1976.
- [69] SIEGEL, R.; HOWELL, J. R. *Thermal radiation heat transfer*. 3. ed. Washington: Hemisphere Publishing Corporation, 1992.
- [70] EDGE, P.; GHAREBAGHI, M.; IRONS, R.; PORTER, R.; PORTER, R. T. J.; POURKASHANIAN, M.; SMITH, D.; STEPHENSON, P.; WILLIAMS, A. Combustion modelling opportunities and challenges for oxy-coal carbon capture technology. *Chemical Engineering Research and Design*, v. 89, p. 1470–1493, 2011.
- [71] KONZEN, P. H. A. *Simulação numérica de chama laminar axisimétrica de metano/ar usando redim*. 2010. Tese (Doutorado) - Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2010.
- [72] GROSSHANDLER, W. L. Radcal: A narrow-band model for radiation calculations in a combustion environment. *NIST Technical Note*, v. 1402, p. 1–52, 1993.

- [73] SMITH, N.; GORE, J.; KIM, J.; TANG, Q. Radiation models. <http://www.sandia.gov/TNF/radiation.html>. 15 Fev. 2013.
- [74] YANG, D. *C++ and object-oriented numeric computing for scientists and engineers*. 1. ed. Nova York: Springer, 2001.
- [75] SILVA, L. F. L. R. *Desenvolvimento de metodologias para simulação de escoamentos polidispersos usando código livre*. 2008. Tese (Doutorado) - Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2008.
- [76] TURNS, S. R. *An introduction to combustion - concepts and applications*. 2. ed. McGraw Hill, 2000.