

1 Introdução

1.1 Motivação

Os escoamentos turbulentos reativos são encontrados em diversos processos cujas consequências econômicas são importantes. No âmbito da engenharia mecânica, os principais focos de interesses são a predição da eficiência, da transferência de calor e da formação de poluentes em motores de combustão interna, fornos e caldeiras. Estes problemas são de difícil resolução pois as reações químicas envolvidas no processo de combustão são funções não lineares das propriedades termoquímicas da mistura. (Bilger *et al.*, 2005).

Dentre os desafios recentes no estudo de escoamentos turbulentos reativos, um dos principais é o desenvolvimento de modelos computacionais que descrevam adequadamente as interações existentes entre combustão, turbulência e a mistura dos reagentes. Um dos motivadores deste desafio é a crescente preocupação com o impacto dos processos de combustão no meio ambiente. Em particular, a combustão incompleta de hidrocarbonetos nos motores de combustão interna é a maior responsável pela poluição do ar (Chang, 1995).

Dada a complexidade deste objeto de estudo, nos últimos 50 anos modelos matemáticos e numéricos para escoamentos turbulentos reativos foram formulados (Bilger *et al.*, 2005). Um dos objetivos principais destes modelos são descrever o comportamento de sistemas práticos, permitindo assim estabelecer seus principais parâmetros de controle.

Uma das aplicações práticas que envolve a combustão em escoamento turbulento é a análise e o projeto de câmaras de combustão de turbinas a gás. Dentre os requerimentos imprescindíveis no projeto destas câmaras de combustão encontram-se o aumento da eficiência da combustão e a redução das emissões de monóxido de carbono e outras espécies químicas poluentes. Um dos problemas abertos, no que diz respeito a estes dispositivos, é a influência do grau de mistura entre reagentes e produtos de combustão sobre os processos de combustão e, em particular, sobre a formação destes poluentes.

Até recentemente, a influência deste processo de mistura sobre a com-

bustão era pouco estudada. Esta é a razão pela qual a abordagem do Reator Perfeitamente Agitado (*Perfectly Stirred Reactor, PSR*) era utilizada para descrever a evolução termoquímica de processos de combustão na fase de projeto de sistemas (Chen, 1997).

Este tipo de reator modelo consiste de uma câmara de combustão de funcionamento contínuo, na qual combustível e oxidante são introduzidos de tal forma que, por hipótese, mistura turbulenta de alta intensidade, ocorre entre reagentes e produtos de combustão. Isto acarreta uma mistura imediata entre os reagentes que entram no reator e os produtos de combustão lá existentes. Como conseqüência desta hipótese, a velocidade do processo de conversão entre reagentes e produtos é controlada somente pelo equilíbrio entre o tempo característico da cinética da reação química e o tempo de residência dos gases no reator. Este tempo de residência é definido como o valor médio do tempo de permanência dos reagentes no interior do PSR.

No entanto, a hipótese de mistura turbulenta rápida quando comparada à reação química não é necessariamente verificada em muitas aplicações práticas, tais como os motores de combustão interna e as turbinas a gás. Nestes casos, o grau de mistura pode exercer uma forte influência sobre as propriedades termoquímicas na saída do reator.

Para superar a limitação intrínseca do modelo PSR, que considera uma mistura perfeita e instantânea no interior do reator durante o processo de combustão, o modelo de Reator Parcialmente Agitado (*Partially Stirred Reactor, PaSR*) foi desenvolvido. Este modelo é capaz de levar em conta o tempo de micro-mistura entre reagentes e gases queimados, isto é, a presença de flutuações das propriedades termodinâmicas durante o processo de combustão, as quais podem acarretar uma maior taxa de formação de poluentes (Chen, 1997).

A competição existente entre os tempos característicos de residência, de mistura e do processo químico determina o estado termodinâmico dos gases no interior do PaSR. Como será visto a seguir, a influência do modelo de mistura para um Reator Parcialmente Agitado (PaSR) e de seu acoplamento com os modelos detalhados da cinética química da combustão sobre a formação de espécies poluentes é um problema aberto, uma vez que modelos capazes de descrever o processo de mistura ainda se encontram em fase de desenvolvimento.

Até recentemente, os modelos desenvolvidos para descrever o fenômeno de mistura ignoraram os efeitos difusivos devido, principalmente, à dificuldade na sua incorporação. A ausência de métodos de discretização numérica adequados e a indisponibilidade de computadores suficientemente rápidos foram

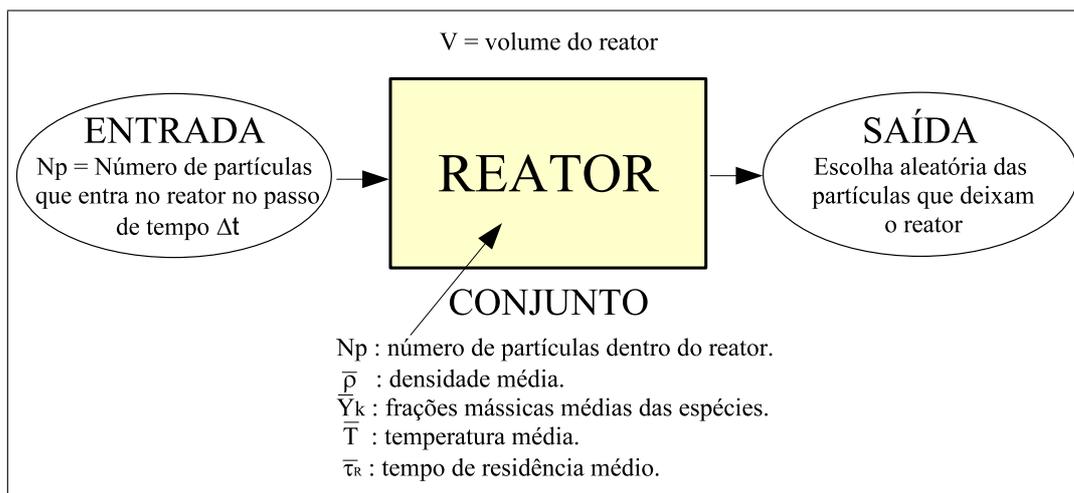


Figura 1.1: *Esquema de um Reator Parcialmente Misturado (PaSR).*

os impedimentos adicionais que dificultaram o estudo do fenômeno de micro mistura.

Dada a natureza turbulenta do escoamento no interior do PaSR, muitos dos modelos que foram desenvolvidos para descrever os processo de mistura são baseados em técnicas estocásticas. Estas procuram descrever a função densidade de probabilidade (PDF) do tipo conjunta das propriedades termodinâmicas no interior do PaSR (Pope, 1985). A equação de transporte desta PDF contém termos fechados que descrevem os processos de entrada e de saída de gases do reator e a reação química, o que constitui a principal vantagem desta formulação. Entretanto, nesta equação a mistura micro-molecular média, isto é, o resultado macroscópico do processo de difusão molecular requer o uso de um modelo apropriado.

A figura 1.1 ilustra um Reator Parcialmente Misturado (PaSR), neste modelo idealizado de reator, que simula um processo de combustão a pressão constante, a vazão mássica dos reagentes que atravessam o reator será aqui representada por um fluxo de partículas estocásticas. Durante seu trânsito através do reator, as partículas são submetidas aos processos simultâneos de reação e mistura.

1.2

O Problema

Uma forma de resolver a equação de transporte da PDF é mediante a abordagem estocástica utilizando-se a técnica de Monte Carlo. O desenvolvimento dos métodos estocásticos de Monte Carlo permitiu obter soluções para problemas práticos, como exemplo, a caracterização das chamas em um bico de Bunsen turbulento. (Bilger *et al.*, 2005).

O principal inconveniente desta abordagem é que os *Modelos de Mistura* existentes não representam adequadamente a realidade física do fenômeno de micro-mistura e sua influência sobre a evolução no tempo da PDF. Recentemente Subramaniam e Pope (1998) e Sabel`nikov e Gorokhovski (2001) formularam novos modelos de mistura visando representar o fenômeno da micro-mistura. Note-se que os modelos de mistura clássicos, tais como o modelo de interação de troca com a média (IEM) e os modelos de Curl (CM) e Curl Modificado (MCM), foram utilizados para estudo do processo de combustão no PaSR (Correa, 1995).

As principais características dos modelos de mistura *clássicos* na solução da equação de transporte da PDF que descreve o PaSR são as seguintes (Bilger *et al.*, 2005):

- Ausência da propriedade de *localidade* na representação do processo de mistura.
- A excessão do modelo IEM, os modelos baseados na interação de partículas (modelos de Curl e Curl modificado) não apresentam um acoplamento direto entre a reação e a mistura.
- Os modelos *clássicos* não representam as flutuações da taxa de dissipação escalar e de sua influência sobre a extinção do processo de combustão.

Além disso, as aplicações destes modelos de mistura, na simulação numérica de um PaSR para a predição das propriedades termoquímicas em casos práticos do processo de combustão, como no caso da combustão pré-misturada de H_2 e CO (Correa,1993), muitas vezes são discordantes. A discordância dos resultados é a mais pronunciada para baixas frequências de mistura (Correa, 1995).

Essas características dos modelos de mistura *clássicos* (IEM, CM e MCM) impedem a correta descrição dos fenômenos da combustão em escoamento turbulentos utilizando a abordagem da PDF transportada. No entanto, nos últimos anos, desenvolveram-se diversos modelos de misturas (tais como os modelos de Langevin, EIEM e ELM), os quais superam algumas das deficiências dos modelos de mistura clássicos. Porém, a utilização destes modelos em presença de combustão ainda não foi realizada.

1.3

Objetivo

O presente trabalho tem por objetivo principal implementar e avaliar diversos modelos de mistura desenvolvidos para o cálculo da combustão turbulenta pré-misturada, utilizando a abordagem Reator Parcialmente Agitado (PaSR). Em particular, será examinada a influência do grau de mistura sobre o processo de combustão.

Uma vez que o Reator Parcialmente Misturado (PaSR) oferece o meio mais adequado para o teste do desempenho dos modelos de mistura em situações reativas, os modelos de micro-mistura desenvolvidos recentemente por Sabel'nikov e Gorokhovski (2001) serão analisados considerando-se a abordagem matemática do PaSR. Estes modelos são o modelo IEM estendido (EIAM), o modelo de Langevin (LM) e o modelo de Langevin estendido (ELM).

A escolha dos modelos de mistura desenvolvidos por Sabel'nikov e Gorokhovski (2001) foi feita porque estes modelos são capazes de reproduzir com maior fidelidade o processo de micro-mistura de um escalar quimicamente inerte do que os modelos clássicos. Espera-se, assim, uma melhor predição do processo de combustão turbulenta no qual o fenômeno de mistura seja determinante. Esta é a razão pela qual um novo modelo matemático de um PaSR generalizado será formulado incluindo o modelo IEM clássico, além dos modelos de mistura desenvolvidos por Sabel'nikov e Gorokhovski (2001).

A simulação do novo modelo de PaSR realizada neste trabalho necessita de métodos numéricos que sejam capazes de resolver Equações Diferenciais Estocásticas (*Stochastic Differential Equations, SDE's*) não lineares. Este é o motivo pelo qual um objetivo adicional é a escolha e a implementação de um método numérico que resolva numericamente de maneira mais eficiente e com uma boa precisão o modelo do PaSR.

1.4

Organização do trabalho

O presente trabalho é dividido em seis capítulos. No segundo capítulo, apresentam-se os resultados de uma pesquisa bibliográfica abordando, o desenvolvimento dos modelos de mistura, desde o trabalho pionero de Curl (1963) até aqueles modelos desenvolvidos recentemente por Sabel'nikov e Gorokhovski (2001). Também é apresentada uma breve revisão bibliográfica correspondente aos métodos numéricos que resolvem as equações diferenciais estocásticas (SDEs).

O terceiro capítulo descreve a formulação geral das equações de transporte da mecânica dos fluidos, necessária à derivação da equação de trans-

porte da PDF em sua forma mais geral. Em seguida, mediante algumas transformações matemáticas e hipóteses restritivas, esta equação da PDF transportada é simplificada para o caso da operação de um PaSR. Este capítulo é complementado com as equações formuladas no apêndice A.

No quarto capítulo são apresentadas formulações matemáticas dos modelos de mistura mais comumente utilizados na modelagem da combustão em escoamentos turbulentos e dos modelos de mistura desenvolvidos recentemente por Sabel`nikov e Gorokhovski (2001). Além disso, propõe-se uma formulação que descreve a operação de um PaSR levando em conta os modelos de Sabel`nikov e Gorokhovski (2001). Neste capítulo também é apresentado o método de solução numérica que utiliza a técnica de Monte Carlo para a resolução das SDEs que desenvolvem a operação do PaSR

O quinto capítulo apresenta os resultados obtidos com os modelos de mistura formulados no quarto capítulo para o caso de uma mistura binária e inerte. Em seguida, são apresentados os resultados obtidos mediante a técnica de Monte Carlo, para o caso do funcionamento de um PaSR levando em conta os modelos de mistura propostos por Sabel`nikov e Gorokhovski (2001). Alguns resultados adicionais são reportados no apêndice B.

Finalmente, no sexto e último capítulo, são apresentadas as conclusões e recomendações para trabalhos futuros.