

Fernando Oliveira de Andrade

Contribuição à Simulação das
Grandes Escalas de uma Chama
Turbulenta Pré-Misturada
Estabilizada em um Escoamento a
Alta Velocidade

TESE DE DOUTORADO

DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA
MECÂNICA

Programa de Pós-graduação em
Engenharia Mecânica

Rio de Janeiro
Junho de 2009

Fernando Oliveira de Andrade

**Contribuição à Simulação das Grandes Escalas de
uma Chama Turbulenta Pré-Misturada Estabilizada
em um Escoamento a Alta Velocidade**

Tese de Doutorado

Tese apresentada ao Programa de Pós-Graduação em
Engenharia Mecânica da PUC-Rio como requisito parcial
para obtenção do título de Doutor em Engenharia Mecânica.

Orientadores: Prof. Luis Fernando Figueira da Silva
Dr. Arnaud Mura

Rio de Janeiro
Junho de 2009



Fernando Oliveira de Andrade

**Contribuição à Simulação das Grandes Escalas de
uma Chama Turbulenta Pré-Misturada Estabilizada
em um Escoamento a Alta Velocidade**

Tese apresentada como requisito parcial para obtenção do grau de Doutor pelo Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica da PUC-Rio. Aprovada pela Comissão Examinadora abaixo assinada.

Prof. Luis Fernando Figueira da Silva

Orientador
Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro

Dr. Arnaud Mura

Orientador
Université de Poitiers

Prof. Aristeu da Silveira Neto

Universidade Federal de Uberlândia

Prof. François-Xavier Demoulin

Université de Rouen

Prof. Guenther Carlos Krieger

Universidade de São Paulo

Prof. Julien Reveillon

Université de Rouen

Prof. José Eugênio Leal

Coordenador (a) Setorial do Centro Técnico Científico - PUC-Rio

Rio de Janeiro, 19 de Junho de 2009

Todos os direitos reservados. É proibida a reprodução total ou parcial do trabalho sem autorização da universidade, do autor e do orientador.

Fernando Oliveira de Andrade

Graduou-se em Engenharia Civil pela Universidade Federal do Paraná (Curitiba, Brasil) em 1998. Concluiu o mestrado na The University of Iowa (Iowa City, Estados Unidos) em 2000 na área de Engenharia Ambiental e Recursos Hídricos com ênfase em modelagem hidrodinâmica computacional.

Ficha Catalográfica

Andrade, Fernando Oliveira de

Contribuição à simulação das grandes escalas de uma chama turbulenta pré-misturada estabilizada em um escoamento a alta velocidade / Fernando Oliveira de Andrade ; orientadores: Luis Fernando Figueira de Silva, Arnaud Mura. 2009.

v., 237 f.: il. : 30 cm

1. Tese (Doutorado em Engenharia Mecânica) – Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, 2009.

Inclui referências bibliográficas.

1. Engenharia Mecânica – Teses. – 2. Simulação de grandes escalas (LES). 3. Combustão turbulenta pré-misturada. I. Figueira da Silva, Luis Fernando. II. Mura, Arnaud. Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro. Departamento de Engenharia Mecânica. III. Título.

CDD: 621

Dedico esta tese a meus pais, Alberto e Aidê.

Agradecimentos

A meu orientador na PUC-Rio, Prof. Luis Fernando Figueira da Silva, pelo acompanhamento, pelas idéias e pela orientação ao longo dos quatro anos do doutorado, pelas inúmeras conversas e debates em torno do trabalho e pelas revisões no decorrer da redação do presente manuscrito.

A meu orientador na *l'Université de Poitiers*, Dr. Arnaud Mura, por me receber no *Laboratoire de Combustion et de Détonique* durante os anos de 2007 e 2008, pelas conversas esclarecedoras em torno de diversos assuntos da tese e por me transmitir de maneira didática parte de seu conhecimento na área de combustão.

Ao grupo de pesquisa em Dinâmica dos Fluidos Computacional da Universidade Federal de Uberlândia, em nome do Prof. Aristeu da Silveira Neto e de João Marcelo Vedovoto, por fornecer a versão original do código LES utilizado neste trabalho e pelas frutíferas trocas de experiências nas áreas de mecânica dos fluidos e de simulações de escoamentos turbulentos.

A Luiz Eduardo Sampaio, Sérgio Pilotto e André Rezende por realizar o importantíssimo trabalho de montagem, instalação, manutenção e gerenciamento do *cluster* do laboratório computacional de fenômenos de transporte do Departamento de Engenharia Mecânica da PUC-Rio, o qual foi largamente utilizado nas simulações realizadas neste trabalho.

A meus companheiros do grupo de combustão da PUC-Rio, Americo Barbosa da Cunha Jr., Elder Marino Mendoza Orbegoso, Luis Enrique Alva Huapaya e Nattan Roberto Caetano, pelo auxílio e troca de idéias relacionadas a vários pontos do trabalho e pelos momentos de descontração na sala 5 do anexo da mecânica e nos congressos pelo Brasil afora.

A meus companheiros do *Laboratoire de Combustion et de Détonique*, em nome de Ignace Befeno, Jean-François Izard e Vincent Robin pela atenção e ajuda

prestadas durante a minha estadia em Poitiers.

À Gláucia Ishida Paiva, pelo carinho e pelo companheirismo.

A meu velho amigo Marco Aurélio Ishida Loureiro, por ter sido um dos principais incentivadores do meu ingresso na vida acadêmica, quando do meu mestrado realizado na *The University of Iowa*.

À família Soares, pelo convívio e pelo carinho, em especial, à Bárbara Musumeci Soares, por me acolher em seu apartamento no bairro de Laranjeiras durante o primeiro ano do doutorado.

Aos amigos João Paulo Castagnoli, Marcelo Miqueleto e Thais Abreu pelos bons tempos do núcleo curitibano da casa da gávea.

Às amigas Cristina Veloso e Juliana Valério e ao amigo Leonardo Carvalho, pelos inúmeros momentos de diversão na cidade do Rio de Janeiro.

Aos amigos Daniel Caon Alves e Maurício Almerão, pelos momentos de parceria em território francês, os quais tornaram o período do doutorado sanduíche muito mais agradável.

Aos amigos e amigas: Anamaria Gouveia, André Isnard, Carolina Araujo, Flavio Slivinski, Frank Pruzaesky, Jonathan Lemay, Juliana Abrantes, Leonardo Rodrigues, Leonardo Clemente, Michéle Dal Toé Casagrande, Peter Wetzlar, Rômulo Aguiar, Roney Thompsom, Tiago Arruda Sanchez, Yipsy Roque Benito, e todos os outros que por ventura não estejam incluídos nesta lista, pelos momentos de alegria compartilhados na cidade do Rio de Janeiro.

Aos professores do Departamento de Engenharia Mecânica da PUC-Rio.

A toda equipe do Departamento de Engenharia Mecânica da PUC-Rio, em especial, à Rosely Ribeiro Marins, pela presteza e eficiência.

Ao CNPq e a CAPES pelo apoio financeiro.

A meus irmãos, Gustavo e Mirelle, sempre prontos a me receber com todo carinho a cada viagem que faço a Curitiba, e a meus pais, Alberto e Aidê, a quem dedico este trabalho, pelo carinho e amor incondicionais e pela ajuda em todos os aspectos da minha vida.

Resumo

Andrade, Fernando Oliveira de; Figueira da Silva, Luis Fernando; Mura, Arnaud. **Contribuição à Simulação das Grandes Escalas de uma Chama Turbulenta Pré-Misturada Estabilizada em um Escoamento a Alta Velocidade.** Rio de Janeiro, 2009. 237 p. Tese de Doutorado - Departamento de Engenharia Mecânica, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro.

Uma metodologia híbrida envolvendo simulação de grandes escalas e função densidade probabilidade transportada (LES-PDF) é desenvolvida para realizar simulações de escoamentos turbulentos reativos a baixo número de Mach. Equações de transporte de massa, da quantidade de movimento e de um escalar são resolvidas em conjunto com uma equação de estado no contexto do método LES. A modelagem da turbulência é realizada pelo modelo clássico de Smagorinsky e a taxa de produção química é representada pela lei de Arrhenius, para reação de combustão única, global e irreversível. As equações de transporte são discretizadas no espaço e no tempo mediante o uso de esquemas de segunda ordem, sobre malhas cartesianas uniformes, no âmbito do método dos volumes finitos. Os efeitos da turbulência sobre a combustão na escala sub-filtro são determinados por uma abordagem lagrangeana da PDF, a qual faz uso da técnica de Monte Carlo: equações diferenciais estocásticas (SDE), equivalentes a equação de Fokker-Plank, são utilizadas para a variável de progresso da reação química. LES e PDF evoluem simultaneamente, trocando informações a cada passo de integração no tempo, de modo que o campo de velocidade filtrado, a frequência turbulenta e o coeficiente de difusão são fornecidos por LES, enquanto o modelo PDF retorna a taxa de reação química filtrada. Devido ao elevado número de partículas empregado no modelo PDF, a paralelização do programa lagrangeano é realizada, com base na estratégia de decomposição de domínios, implementada no programa euleriano. O modelo final é usado para simular uma configuração experimental que consiste de uma chama de metano e ar, estabilizada entre escoamentos paralelos de gases queimados e gases frescos em um canal de seção transversal quadrada constante. Uma comparação detalhada entre os resultados obtidos e os dados experimentais é realizada.

Palavras-chave

Simulação de Grandes Escalas (LES), Combustão Turbulenta Pré-Misturada

Abstract

Andrade, Fernando Oliveira de; Figueira da Silva, Luis Fernando (advisor); Mura, Arnaud (advisor). **Contribution to the Large Eddy Simulation of a Turbulent Premixed Flame Stabilized in a high speed flow**. Rio de Janeiro, 2009. 237 p. DSc. Thesis - Departamento de Engenharia Mecânica, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro.

A hybrid Large Eddy Simulation / transported Probability Density Function (LES-PDF) computational model is developed to perform the numerical simulation of variable-density low Mach number turbulent reactive flows. Transport equations for mass, momentum, and scalars are solved together with an equation of state within the LES framework. Turbulence is modeled using the classical Smagorinsky closure whereas chemical reaction is first addressed thanks to a global single-step chemistry scheme. The governing equations are discretized using second order accuracy spatial and temporal approximations applied to uniform Cartesian meshes within a finite volume framework. The effects of subgrid scale (SGS) turbulence on the combustion processes are accounted for by means of a Lagrangian transported PDF model which is coupled with the LES solver. The PDF model relies on the use of a Monte Carlo technique: Stochastic Differential Equations (SDE), equivalent to the Fokker-Planck equations are considered for the progress variable. LES and PDF models are solved simultaneously, exchanging information at each integration time step, the velocity field, turbulence frequency and diffusion coefficient being provided by LES, whereas the PDF model returns the filtered chemical reaction rate. Parallelization of the Lagrangian solver has been performed based on the domain decomposition strategy, the same strategy being already implemented for the eulerian LES solver. The resulting computational model is used to perform the simulation of an experimental test case consisting of a CH₄-air flame established between two streams of fresh and burnt pilot gases in a constant area square cross section channel. The accuracy of the numerical solutions provided by the hybrid LES-PDF approach is assessed by detailed comparisons with experimental data.

Keywords

Large Eddy Simulation (LES), Turbulent Premixed Combustion

Sumário

1	Introdução	26
1.1.	Organização do Trabalho	33
2	Revisão da Literatura	36
2.1.	Experimentos em Combustão Turbulenta Pré-Misturada	37
2.1.1.	Chamas Turbulentas Propagativas	40
2.1.2.	Chamas Turbulentas Estabilizadas	44
2.2.	Modelagem da Turbulência e Combustão	51
2.3.	LES em Combustão Turbulenta	55
2.3.1.	Modelagem Sub-Filtro	57
2.3.2.	Modelos de Combustão	59
2.4.	Modelagem Híbrida	68
3	Modelagem da Combustão Turbulenta Pré-Misturada	73
3.1.	Equações Governantes	74
3.2.	Simulação de Grandes Escalas	78
3.2.1.	Filtragem das Equações de Transporte	79
3.2.2.	Tensor Sub-Malha	81
3.2.3.	Fluxo Escalar Sub-Malha	84
3.2.4.	Taxa de Reação Química	86
3.3.	Método da Função Densidade Probabilidade Transportada	89
3.3.1.	PDF Conjunta da Velocidade e Campo Escalar	90
3.3.2.	PDF do Campo Escalar	93
3.3.3.	Abordagem Lagrangeana da PDF do Campo Escalar	96
3.4.	Acoplamento LES-PDF do Campo Escalar	100
4	Métodos Numéricos	103
4.1.	Método dos Volumes Finitos	104
4.1.1.	Discretização das Equações de Transporte	105
4.1.2.	Acoplamento Pressão-Velocidade	109

4.2. Método de Monte Carlo	113
4.2.1. Propriedades das Partículas Estocásticas	114
4.2.2. Métodos de Resolução das SDEs	114
4.2.3. Condições Iniciais e de Contorno	117
4.2.4. Cálculo dos Momentos Estatísticos	118
4.3. Dinâmica do Modelo Híbrido	121
4.4. Paralelização do Programa Computacional	123
4.4.1. Referencial Euleriano	125
4.4.2. Referencial Lagrangeano	126
5 Resultados e Discussões	132
5.1. Banco de Dados Experimentais	133
5.2. Regimes de Combustão Turbulenta Pré-Misturada	136
5.3. Simulações de Casos Quimicamente Inertes	142
5.3.1. Equivalência das Abordagens Euleriana e Lagrangeana	144
5.3.2. Avaliação da Paralelização do Programa de Partículas	151
5.3.3. Análise da Estrutura do Escoamento Inerte	154
5.3.4. Comparações com Dados Experimentais	171
5.4. Simulações de Casos Reativos	185
5.4.1. Análise da Estrutura das Chamas e do Escoamento Reativo	186
5.4.2. Comparação com dados Experimentais	200
6 Comentários Finais	211
Referências Bibliográficas	217
A Hipóteses Simplificadoras da Descrição da Cinética Química da Combustão	228
B Derivação das Equações de Transporte da PDF	232

Lista de Figuras

- Figura 2.1 Chamas laminares (em cima) e turbulentas (em baixo) pré-misturadas em um queimador de Bunsen turbulento. Lado esquerdo: fotografias obtidas por longa exposição. Lado direito: fotografias instantâneas utilizando a técnica de Schilieren (Lewis e Von Elbe, 1961). 37
- Figura 2.2 Imagens de chamas confinadas em uma câmara de combustão semi-esférica. Lado esquerdo: elementos de chamas laminares contínuos ($KaLe = 0,003$). Lado direito: ausência dos elementos de chama contínuos e aparecimento de estruturas de chamas distribuídas ($KaLe = 0,238$) (Abdel-Gayed e Bradley, 1989). 40
- Figura 2.3 Tomografia a Laser de uma chama turbulenta de metano e ar se propagando da esquerda para direita em uma câmara de combustão de seção transversal quadrada (Trinité et al., 1989). 41
- Figura 2.4 Variação da velocidade de chama turbulenta em função da energia cinética do movimento turbulento (Poinsot e Veynante, 2005). 42
- Figura 2.5 Expansão típica de chamas turbulentas confinadas em uma câmara de combustão esférica. Lado Esquerdo: dobramento intenso das chamas para uma mistura de ar e hidrogênio (número de Lewis muito menor que a unidade). Lado direito: presença dos elementos de chama laminar para uma mistura de ar e metano (numero de Lewis próximo a unidade) (Renou e Boukhalfa, 2001). 43
- Figura 2.6 Fotografia de uma chama turbulenta resultante da mistura de metano e ar em um queimador de Bunsen. Imagem da difusão de um plano de Laser por gotículas de óleo (Dumont et al., 1993). 44
- Figura 2.7 Diagrama de regimes de combustão turbulenta pré-misturada baseado nas escalas características típicas de tempo e comprimento da turbulência e combustão (Borghini, 1985 e Peters, 1999). 45
- Figura 2.8 Imagens da interação entre vórtices e chama usando PIV cinema-stereo para uma chama de Bunsen turbulenta de metano e ar. O sentido do escoamento é de baixo para cima. A linha escura é a frente de chama turbulenta - os reagentes estão do lado esquerdo. A vorticidade positiva é caracterizada pela rotação dos vórtices no sentido anti-horário e aparece em vermelho (1600 s^{-1}) e a negativa está em azul (-1600 s^{-1}) (Steinberg et. al., 2006). 50
- Figura 2.9 Diagrama de regimes de combustão turbulenta pré-misturada para LES, baseado nas escalas características típicas de tempo e comprimento da combustão e nas escalas de filtragem de LES (Pitsch, 2006). 59
- Figura 2.10 Exemplos de funções peso de diferente ordens. Lado esquerdo: função top hat utilizada no método NGP. Lado direito: função linear utilizada no método CIC (Peirano et al., 2006). 71

- Figura 3.1 Representação esquemática das frentes de chama, características dos diferentes regimes de combustão turbulenta pré-misturada: (a) chamas dobradas e corrugadas, (b) chamas espessas e (c) chamas distribuídas. 87
- Figura 3.2 Representação esquemática da troca de propriedades transportadas no âmbito da formulação LES, resolvida no referencial euleriano, e pela formulação da PDF do campo escalar, resolvida no referencial lagrangeano. 100
- Figura 4.1 Ilustração esquemática dos arranjos das propriedades nas malhas, (a) arranjo desencontrado: as componentes do vetor velocidade são armazenadas nas faces dos volumes e a pressão é armazenada no centro, (b) arranjo co-localizado: todas as variáveis são armazenadas no centro do volume de controle. Os círculos são a pressão e as setas os componentes de velocidade (Campregher, 2005). 105
- Figura 4.2 Volume de controle elementar, com topologia hexaédrica, utilizado na discretização das equações de transporte (Campregher, 2005). 106
- Figura 4.3 Representação da configuração geométrica utilizada com as respectivas condições de contorno atribuídas para as partículas. 118
- Figura 4.4 Ilustração esquemática dos volumes de controle da malha Euleriana contendo as partículas utilizadas na estimativa da PDF do campo escalar, a qual é associada ao centro do volume de controle. 119
- Figura 4.5 Representação esquemática da dinâmica entre a formulação resolvida na malha euleriana, pelo método dos volumes finitos, e a formulação da PDF do campo escalar, resolvida sobre partículas estocásticas via método de Monte Carlo. 121
- Figura 4.6 Ilustração das interfaces de comunicação entre cinco processadores vizinhos usando uma topologia unidimensional de divisão (Campregher, 2005). 125
- Figura 4.7 Ilustração das sobreposições necessárias para aproximações espaciais de segunda ordem. As condições de contorno são obtidas mediante a troca de mensagens entre os subdomínios Ω_1 e Ω_2 (Campregher, 2005). 126
- Figura 4.8 Ilustração esquemática da arquitetura de troca de mensagens do programa lagrangeano entre três processadores associados a subdomínios de dimensões idênticas para instantes de tempo $t = 0, 1, 2$. 129
- Figura 5.1 Representação esquemática do experimento envolvendo escoamento paralelo de gases frescos e de gases queimados, apresentado por Moreau (1977), Moreau e Boutier (1977) e Magre et al. (1988). 134
- Figura 5.2 Velocidade de uma chama laminar pré-misturada de metano e ar em função da riqueza da mistura, para temperaturas de 300 K e 600 K. 137
- Figura 5.3 Evolução da temperatura em uma chama laminar pré-misturada de metano e ar, ilustrando o esquema utilizado para o cálculo da espessura de chama laminar, l_F . 138

- Figura 5.4 Diagrama de Borghi. O retângulo vermelho corresponde ao regime de combustão turbulenta pré-misturada, encontrado nos experimentos de Magre et al. (1988). 139
- Figura 5.5 Diagrama de combustão turbulenta pré-misturada para LES. O retângulo vermelho indica o regime de combustão turbulenta relativo ao emprego de espaçamento de malha variando de 1 a 5 mm. 140
- Figura 5.6 Seção longitudinal da configuração geométrica experimental, contendo o duto principal, o queimador auxiliar e a seção de testes, na qual a linha tracejada vermelha delimita a região simulada no presente trabalho. 142
- Figura 5.7 Seção longitudinal da malha computacional, com as indicações das condições de contorno, utilizada nas simulações de comparação dos métodos dos volumes finitos e de Monte Carlo. 146
- Figura 5.8 Componentes longitudinais da velocidade média e da variável de progresso, impostos como condição de contorno de entrada nas simulações de comparação entre os métodos dos volumes finitos e de Monte Carlo. 146
- Figura 5.9 Distribuição da variável de progresso, c , para uma seção longitudinal central ao domínio de cálculo, no instante de tempo $t = 100 \text{ ms}$. (a) Método dos volumes Finitos e (b) método de Monte Carlo. 148
- Figura 5.10 Comparação da média temporal da variável de progresso, c , calculada pelos métodos dos volumes finitos e de Monte Carlo, para as seções 1, 2, 3 e 4, localizadas em $x = 42, 122, 251$ e 351 mm , respectivamente. 149
- Figura 5.11 Comparação da variância da variável de progresso, c'^2 , calculada pelos métodos dos volumes finitos e de Monte Carlo, para as seções transversais 1 e 2, localizadas em $x = 42$ e 122 mm , respectivamente. 151
- Figura 5.12 Aceleração obtida em função do número de processadores para 200 e 300 partículas inicialmente distribuídas por volume de controle. 153
- Figura 5.13 Relação da componente R_{13} do tensor de Reynolds com a velocidade média Δu^2 em função da espessura da camada de mistura adimensionalizada, ξ . 157
- Figura 5.14 Evolução transversal das condições de contorno de entrada C1: (a) componente longitudinal da velocidade média, (b) variável de progresso (c) rms da componente longitudinal da velocidade flutuante, (d) rms das componentes transversais da velocidade flutuante. 158
- Figura 5.15 Espectros de energia da componente longitudinal da velocidade, obtido com as condições de contorno C1, para sondas situadas na linha central do canal, na altura de 25 mm e nas coordenadas: (a) $x = 122 \text{ mm}$, (b) $x = 251 \text{ mm}$, (c) $x = 351 \text{ mm}$ e (d) $x = 500 \text{ mm}$. 161

- Figura 5.16 Distribuição das componentes do tensor de Reynolds, em m^2s^2 , obtida com as condições de contorno $C1$ e a malha 800k, para uma seção longitudinal central ao canal. Em cima, componente $R11$, no meio, componente $R13$, embaixo, componente $R33$. 162
- Figura 5.17 Comparação dos resultados em termos da relação $R13\Delta u^2$ em função da espessura da camada de mistura adimensionalizada, ξ , obtidos com as três malhas computacionais e com as condições de contorno $C1$, para as seções transversais situadas em: (a) $x = 122\text{ mm}$, (b) $x = 251\text{ mm}$ e (c) $x = 351\text{ mm}$. 164
- Figura 5.18 Iso-superfícies do módulo da vorticidade, no valor $\omega = 8000\text{ s}^{-1}$, obtidas com as condições de contorno de entrada $C1$, para o instante de tempo $t = 500\text{ ms}$: (a) malha 500k, (b) malha 800k, (c) malha 1600k. 165
- Figura 5.19 Condições de contorno de entrada $C2$: (a) evolução transversal da componente longitudinal da velocidade média, (b) evolução transversal da variável de progresso. 167
- Figura 5.20 Espectros de energia da componente longitudinal da velocidade, obtidos com as condições de contorno $C2$, para sondas situadas na linha central do canal, na altura de 25 mm e nas coordenadas: (a) $x = 122\text{ mm}$, (b) $x = 251\text{ mm}$, (c) $x = 351\text{ mm}$ e (d) $x = 500\text{ mm}$. 168
- Figura 5.21 Distribuição das componentes do tensor de Reynolds, em m^2s^2 , para uma seção longitudinal central ao canal, obtida com as condições de contorno de entrada $C2$. Em cima, componente $R11$, no meio, componente $R13$, embaixo, componente $R33$. 169
- Figura 5.22 Evolução da relação $R13\Delta u^2$ em função da espessura da camada de mistura adimensionalizada, ξ , obtidas com as condições de contorno $C2$ e para as seções transversais localizadas nas coordenadas $x = 122, 251$ e 351 mm . 170
- Figura 5.23 Evolução da componente longitudinal da velocidade média na seção transversal localizada em $x = 39\text{ mm}$ para condições de contorno de entrada $C1$. 172
- Figura 5.24 Lado esquerdo: evolução transversal da intensidade turbulenta. Lado direito: evolução transversal do rms da componente longitudinal da velocidade flutuante. Seções transversais localizadas em $x = 39, 251$ e 438 mm . Resultados obtidos com as condições de contorno de entrada $C1$. 173
- Figura 5.25 Evolução transversal da (a) temperatura média e da (b) variância da temperatura, obtida com as condições de contorno $C2$, para uma seção localizada 42 mm a jusante da entrada do canal. 175
- Figura 5.26 Comparações das PDFs da temperatura calculadas em relação as medidas, obtidas mediante o emprego da malha 1600k e das condições de contorno $C1$, para o plano central ao canal, na coordenada $x = 42\text{ mm}$, e para alturas iguais a: (a) 10 mm, (b) 20 mm, (c) 25 mm, e (d) 45 mm. 176

- Figura 5.27 Comparações das PDFs da temperatura calculadas em relação as medidas, obtidas mediante o emprego da malha 1600k e das condições de contorno $C1$, para o plano central ao canal, na coordenada $x = 122 \text{ mm}$, e para alturas de: (a) 10 mm , (b) 20 mm , (c) 30 mm , e (d) 40 mm . 178
- Figura 5.28 Evolução da componente longitudinal da velocidade média na seção transversal localizada em $x = 39 \text{ mm}$ para condições de contorno de entrada $C2$. 179
- Figura 5.29 Lado esquerdo: evolução transversal da intensidade turbulenta. Lado direito: evolução transversal do rms da componente longitudinal da velocidade flutuante. Seções transversais localizadas em $x = 39, 251$ e 438 mm . Resultados obtidos com as condições de contorno de entrada $C2$. 181
- Figura 5.30 Condições de contorno $C2$: evolução transversal da (a) temperatura média, (b) variância da temperatura, para uma seção localizada 42 mm a jusante da entrada do canal. 182
- Figura 5.31 Comparações das PDFs da temperatura calculadas em relação as medidas, obtidas mediante o emprego da malha 1600k e das condições de contorno $C2$, para o plano central ao canal, na coordenada $x = 42 \text{ mm}$, e para alturas iguais a: (a) 10 mm , (b) 20 mm , (c) 25 mm , e (d) 45 mm . 183
- Figura 5.32 Comparações das PDFs da temperatura calculadas em relação as medidas, obtidas mediante o emprego da malha 1600k e das condições de contorno $C2$, para o plano central ao canal, na coordenada $x = 122 \text{ mm}$, e para alturas de: (a) 10 mm , (b) 20 mm , (c) 30 mm , e (d) 40 mm . 184
- Figura 5.33 Visualização instantânea da chama turbulenta pré-misturada, integrada na profundidade, obtida por filmagem com velocidade de 4000 imagens por segundo (Magre et al., 1988). 188
- Figura 5.34 Taxa de reação química instantânea em $kgm^{-3}s^{-1}$, para $t = 250 \text{ ms}$, e para um plano central ao canal, entre as coordenadas $x = 0$ e 400 mm . 189
- Figura 5.35 Taxa de reação química média em $kgm^{-3}s^{-1}$, correspondente a espessura da chama turbulenta, δT , para uma seção longitudinal situada no centro do canal, entre as coordenadas $x = 0$ e 400 mm . 190
- Figura 5.36 Evolução da taxa de reação química ao longo do tempo, para uma seção longitudinal central ao canal, em função do valor da riqueza da mistura. 192
- Figura 5.37 Distribuição de temperatura através de diferentes regiões da frente de chama, para um plano longitudinal no centro do canal, em $t = 250 \text{ ms}$. As linhas escuras representam os limites da frente de chama, os gases frescos se encontram a temperatura de 600 K , e os gases queimados a temperatura de 2000 K . 194

- Figura 5.38 Distribuição de densidade através de diferentes regiões da frente de chama, para um plano longitudinal no centro do canal, em $t = 250 \text{ ms}$. As linhas escuras representam os limites da frente de chama, os gases frescos possuem densidade em torno de $0,6 \text{ kg/m}^3$, e os gases queimados na ordem de $0,2 \text{ kg/m}^3$. 195
- Figura 5.39 Distribuição da componente longitudinal da velocidade média, na região da chama turbulenta média, para uma seção transversal central ao canal, entre as coordenadas $x = 0$ e 500 mm . 196
- Figura 5.40 Distribuição da componente R_{11} do tensor de Reynolds, na região da chama turbulenta média, para uma seção transversal localizada no centro do canal, entre as coordenadas $x = 0$ e 500 mm . 197
- Figura 5.41 Campo da componente z da vorticidade, obtido na região inferior (a) e superior (b) da frente de chama, para o instante de tempo $t = 250 \text{ ms}$. As linhas pretas espessas representam a chama, a vorticidade positiva é caracterizada pela rotação dos vórtices no sentido anti-horário, em vermelho (25000 s^{-1}), e a negativa pela rotação dos vórtices no sentido horário, em azul (-25000 s^{-1}). 198
- Figura 5.42 Evoluções transversais da componente longitudinal da velocidade média, obtidas na linha de centro do canal, para o caso reativo, e para as coordenadas x iguais a: (a) 39 mm , (b) 151 mm , (c) 251 mm , (d) 351 mm , (e) 438 mm e (f) 500 mm . 201
- Figura 5.43 Evoluções transversais da intensidade turbulenta e do rms da componente longitudinal da velocidade flutuante, obtidas na linha central do canal, para o caso reativo, e para as coordenadas $x = 39, 438$ e 650 mm . 203
- Figura 5.44 Evolução transversal da (a) temperatura média e (b) variância da temperatura, em uma seção transversal situada 42 mm a jusante da entrada do canal, para o caso reativo. 205
- Figura 5.45 Comparações das PDFs da temperatura calculadas em relação as medidas, para o caso reativo e para um plano longitudinal central ao canal, na coordenada $x = 42 \text{ mm}$, e para alturas iguais a: (a) 10 mm , (b) 20 mm , (c) 25 mm , e (d) 45 mm . 207
- Figura 5.46 Comparações das PDFs da temperatura calculadas em relação as medidas, para o caso reativo e para um plano longitudinal central ao canal, na coordenada $x = 122 \text{ mm}$, e para alturas iguais a: (a) 15 mm , (b) 20 mm , (c) 25 mm , (d) 30 mm , (e) 40 mm e (f) 50 mm . 209

Lista de Tabelas

Tabela 4.1 Construção da estrutura de dados <i>partícula</i> e declaração da variável <i>presença</i> em linguagem de programação FORTRAN 90.	128
Tabela 5.1 Grandezas necessárias para determinação do regime de combustão turbulenta pré-misturada, para intensidades de turbulência mínima e máxima.	139
Tabela 5.2 Diferenças percentuais da média temporal da variável de progresso, calculada pelos métodos dos volumes finitos e de Monte Carlo.	150
Tabela 5.3 Parâmetros de avaliação da paralelização do programa de partículas.	152
Tabela 5.4 Dimensões das malhas utilizadas nas simulações dos casos quimicamente inertes, realizadas para avaliar a qualidade dos resultados de LES.	155

Nomenclatura

Abreviações

BML	Modelo de Combustão de Bray, Moss e Libby
CDS	Esquema de discretização de diferenças centradas
CGD	Difusão do tipo contra-gradiente
CIC	Método de projeção <i>Cloud-in-Cell</i>
CPU	Unidade de processamento de dados
DNS	Simulação numérica direta
EBU	Modelo de combustão Eddy Break Up
FDF	Função densidade probabilidade filtrada
FGV	Vorticidade induzida por chamas
FVM	Método dos volumes finitos
GD	Difusão do tipo gradiente
IEM	Modelo de micro mistura <i>Interaction by Exchange with the Mean</i>
LES	Simulação de grandes escalas
MPI-2	Protocolo de paralelização <i>Message Passing Interface</i>
MPICH-2	Instruções de programação do MPI-2
NGP	Método de projeção <i>Nearest Grid Point</i>
PDF	Função densidade probabilidade
PIV	Imagem por velocimetria de partículas
RANS	Médias de Reynolds das equações de Navier Stokes
SDE	Equações diferenciais estocásticas
SGS	Escalas sub-malha
SIMPLEC	Método de solução do acoplamento pressão-velocidade

Lista de Símbolos

Caracteres Romanos

\bar{u}_c	Velocidade média de convecção
\bar{u}_i^b	Velocidades condicionais nos gases queimados
\bar{u}_i^u	Velocidades condicionais nos gases frescos
\bar{u}_p	Velocidade média oriunda do duto principal
\bar{u}_q	Velocidade média oriunda do queimador auxiliar
$\tilde{\mathbf{u}}$	Componentes filtrados do vetor velocidade
\mathbf{u}'	Componentes flutuantes do vetor velocidade
\mathbf{u}^*	Componentes do vetor velocidade estimado
\mathbf{u}^c	Correção das componentes do vetor velocidade estimado
A_τ	Coefficiente pré-exponencial da lei de Arrhenius
B_j	Coefficiente de difusão das equações estocásticas
C_S	Constante do modelo de Smagorinsky
D^Φ	Coefficiente de difusão associado a Φ
Da_Δ	Número de Damköhler baseado na largura de filtragem de LES
E_a	Energia de ativação da reação química
E_p	Eficiência de um programa paralelo
F_L	Função densidade probabilidade filtrada
F_i	Forças de corpo por unidade de volume
J_{hj}	Fluxo molecular difusivo da energia na direção j
J_{kj}	Fluxo molecular difusivo da espécie química k na direção j
$J_{\alpha j}$	Fluxo molecular difusivo do escalar α
K_Σ	Constante do modelo algébrico de densidade de superfície de chama
Ka_Δ	Número de Karlovitz baseado na largura de filtragem de LES
Ka_δ	Número de Karlovitz baseado na camada interna de chama laminar
K_S	Constante da relação que define convergência de ordem forte
K_w	Constante da relação que define convergência de ordem fraca

Le_k	Número de Lewis da espécie química k
M_f	Massa do fluido
N_B	Número de Bray
N_p	Número de partículas por volume de controle
$P_{\Phi}, P_{u,\phi}$	PDF conjunta da velocidade e campo escalar
P_{ϕ}	PDF do campo escalar
P_{ϕ}^*	PDF lagrangeana do campo escalar
$Q_{\alpha j}$	Fluxo turbulento sub-filtro do campo escalar
Re_{Δ}	Número de Reynolds baseado na largura de filtragem de LES
Re_{ch}	Número de Reynolds baseado na altura do canal
Re_{δ}	Número de Reynolds baseado na espessura da camada de mistura
Re_T	Número de Reynolds turbulento
$ S $	Módulo do tensor taxa de deformação
S_h	Termo fonte de entalpia por unidade de volume
S_L	Velocidade de propagação da chama laminar
S_T	Velocidade de propagação média da chama turbulenta
Sc_{SGS}	Número de Schmidt sub-filtro
Sc_k	Número de Schmidt da espécie química k
S_i	Área da seção transversal da malha normal a direção i
S_{ij}	Tensor taxa de deformação
S_k	Taxa de reação química da espécie química k por unidade de volume
S_{α}	Termo fonte do escalar α por unidade de volume
T_b	Temperatura dos gases queimados
T_u	Temperatura dos gases frescos
V_c	Volume de controle elementar
Y_k	Fração mássica das espécies química k
\tilde{c}	Variável de progresso da reação química filtrada
c_m	Espessura de quantidade de movimento da camada de mistura
c_p	Calor específico a pressão constante
$f_{c,i}$	Fluxo convectivo através da face i do volume de controle
$f_{d,i}$	Fluxo difusivo através da face i do volume de controle
f_i	Fluxo através da face i do volume de controle

l_F	Espessura total de uma chama laminar
l_m	Espessura de chama característica das chamas espessas
l_δ	Espessura da camada interna de uma chama laminar
m_p	Massa da partícula estocástica
p'	Flutuação de pressão
p^*	Pressão estimada
p_0	Pressão de referência
p^c	Correção da pressão
t_0	Tempo inicial da discretização temporal das SDEs
t_{fin}	Tempo final da discretização temporal das SDEs
t_l	Escala de tempo integral do movimento turbulento
t_{np}	Tempo de execução de um programa paralelo
t_s	Tempo de execução de um programa serial
u'	Intensidade das flutuações turbulentas
h	Entalpia específica
Q	Transporte turbulento da variável de progresso da reação química
V	Espaço amostral da velocidade
W, W_j	Processo de Wiener
Y	Fração mássica das espécies químicas
u	Componentes do vetor velocidade
x	Coordenadas espaciais
A	Matriz unitária
A	Coefficiente de deriva das equações estocásticas
B	Termo fonte da equação discretizada do método dos volumes finitos
D	Coefficiente de difusão
Da	Número de Damköhler
F	Função filtro
G	Iso-superfície de propagação nas escalas submalha
H	Espaço amostral da entalpia específica
H	Termo de interpolação espacial de alta ordem
Ka	Número de Karlovitz baseado na espessura de chama laminar
L	Termo de interpolação espacial de baixa ordem

M_T	Número de amostras do sinal da velocidade
N	Número total de partículas no domínio de cálculo
NI	Números de intervalos na discretização temporal das SDEs
P	Centróide do volume de controle elementar
Pr	Número de Prandtl
Q	Propriedade genérica do escoamento
R	Constante dos gases ideais
\mathbf{R}, R_{ij}	Componentes do tensor de Reynolds
Re	Número de Reynolds
S	Termo fonte de reação química em função de um escalar
$S(f)$	Transformada de Fourier
Sp	Aceleração de um programa paralelo (<i>Speedup</i>)
T	Temperatura
X	Variável das equações estocásticas
Ze	Número de Veldovich
b	Termo de geração de Φ
c	Variável de progresso da reação química
$d\mathbf{W}, dW_j$	Incremento do processo de Wiener
dt	Passo de tempo
k	Energia cinética da turbulência
l	Escala de comprimento integral do movimento turbulento
p	Pressão

Caracteres Gregos

δ_L	Espessura característica de chama laminar
δ_T	Espessura média de chama turbulenta
ρ^u	Densidade dos gases frescos
ρ	Densidade do fluido
$\bar{\Sigma}$	Densidade de superfície média de chama por unidade de volume
η	Escala de comprimento de Kolmogorov
τ_{lb}	Taxa de liberação de calor das reações químicas

ε	Dissipação da energia cinética turbulenta
$\dot{\Omega}$	Taxa de reação total
α_T	Coefficiente de difusividade térmica
\bar{w}	Velocidade de propagação local da chama
ν_{SGS}	Viscosidade dinâmica sub-filtro
Σ_{SGS}	Densidade de superfície de chama sub-filtro por unidade de volume
Δ	Largura de filtro usada nas simulações de grandes escalas
$\Delta \mathbf{x}$	Espaçamento de malha
Δx	Espaçamento de malha na direção x
Δy	Espaçamento de malha na direção y
Δz	Espaçamento de malha na direção z
Δt	Passo no tempo
Γ	Coefficiente de difusão molecular
Γ_k	Coefficiente de difusão molecular da espécie química k
Γ_α	Coefficiente de difusão molecular do escalar α
Γ_{SGS}	Coefficiente de difusão molecular sub-filtro
ψ	Espaço amostral do campo escalar
ψ_α	Espaço amostral do escalar α
ϕ	Escalar genérico
Ω_m	Frequência da mistura em escala sub-filtro
$\tilde{\omega}$	Função peso do método NGP
Φ	Espaço amostral das frações mássicas das espécies químicas
φ	Riqueza da mistura
τ_{ij}	Tensor das tensões viscosas
τ_{ij}^{SGS}	Tensor sub-filtro das tensões viscosas
μ	Viscosidade cinemática
μ_{SGS}	Viscosidade cinemática sub-filtro
δ_{ij}	Delta de Kronecker
λ	Condutividade térmica do fluido
Φ	Campo escalar
σ	Componentes do campo escalar
α	Índice que indica um componente do campo escalar

ϕ_α	Componente α do campo escalar
ξ	Função do número de Bray
γ	Calor de reação reduzido
β	Energia de ativação reduzida
Φ	Campo vetorial conjunto da velocidade e escalares
Ψ	Espaço amostral conjunto da velocidade e escalares
Θ_α	Termo de difusão/fonte do escalar α
Θ	Termo de difusão/fonte do campo escalar
μ_m	m -ésimo momento estatístico centrado
χ	Número de dimensões geométricas de um problema de combustão
ΔW_n	Incremento discretizado do processo de Wiener
$\varepsilon_{\phi N_p}$	Erro estatístico do método Monte Carlo
Φ	Variável dependente do método dos volumes finitos
ϱ	Coefficiente de interpolação de Rhie-Chow
γ_s	Convergência de ordem forte das equações estocásticas
γ_w	Convergência de ordem fraca das equações estocásticas
Υ	Coefficiente do esquema de correção atrasada
δ_i	Distância entre os centros dos volumes de controle
\mathcal{V}	Volume de fluido contido no problema
Λ	Matriz diagonal: componentes transformadas do tensor de Reynolds

Subscritos

T	Propriedade turbulenta
L	Propriedade laminar
Δ	Propriedade resultante da filtragem de LES
SGS	Propriedade característica da escala sub-malha
VC	Relativo ao volume de controle
Φ	Relativo a variável dependente do método dos volumes finitos
p	Relativo à partícula
b	Relativo aos gases queimados
u	Relativo aos gases frescos

Superescritos

$n+1$	Próximo instante de tempo para o qual se busca a solução
n	Instante de tempo mais atual
$n-1$	Instante de tempo passado