

1 Introdução

A combustão está envolvida nos principais mecanismos de conversão de energia utilizados pela humanidade. Os processos de combustão são a principal fonte de energia, por exemplo, para o aquecimento doméstico, usualmente obtido mediante a queima de misturas gasosas em aquecedores ou caldeiras. A combustão também é um mecanismo essencial no fornecimento de energia para os meios de transporte, os quais usam motores de combustão interna ou turbinas a gás para queima de misturas gasosas (Peters, 2000). A geração de energia elétrica também está associada aos processos de combustão, quando realizada em usinas termoeletricas, mediante a queima de combustíveis fósseis. De acordo com o Balanço Energético Nacional de 2008, editado pelo Ministério de Minas e Energia (MME, 2008), 80,51% da matriz energética brasileira deste ano era composta por fontes associadas ao petróleo e seus derivados, ao gás natural, ao carvão mineral, a lenha e ao carvão vegetal, de modo que todas estas fontes envolvem a combustão como mecanismo de conversão de energia.

Além de estar diretamente associada a geração da energia utilizada em residências e pelos meios de transporte, a combustão é largamente empregada em processos industriais, tais como o da destilação e do fracionamento do petróleo, e na fabricação de produtos cruciais para o desenvolvimento tecnológico. A indústria metalúrgica, por exemplo, utiliza fornos e queimadores para fins de tratamento e processamento de metais como o ferro, alumínio e ligas de aço. Outro exemplo é a indústria de manufatura do cimento, a qual depende do uso da combustão para fabricação do cimento e seus derivados (Turns, 2000).

É fácil perceber que os benefícios da utilização da combustão para o desenvolvimento tecnológico e para o bem-estar das pessoas são imensos. No entanto, é

importante ressaltar que todo processo de combustão está associado a poluição ambiental. Os maiores poluentes resultantes da combustão são os hidrocarbonetos não queimados ou parcialmente queimados (UHC), os óxidos de enxofre (SO_x), os óxidos de nitrogênio (NO_x) e o monóxido de carbono (CO). A liberação dos três primeiros na atmosfera está relacionada a uma série de problemas ambientais, os quais se estendem desde a precipitação de ácido sulfúrico no solo, decorrente da combinação de SO_x com o vapor de água presente na atmosfera, até a formação de *smog* fotoquímico nos grandes centros urbanos, o qual é oriundo da combinação de NO_x com UHC e ozônio, e prejudicial ao sistema respiratório (Law, 2006). Em particular, um problema ambiental que tem se agravado com a massificação dos processos industriais e com o crescimento da frota de veículos automotivos, ocorridos no último século, é o aquecimento global antropogênico, causado pelo aumento da quantidade de CO_2 liberado na atmosfera, proveniente em grande parte da queima de carvão e de derivados de petróleo. Atualmente, investimentos em pesquisas são realizados na busca de mecanismos de conversão de energia alternativos, não poluentes, tais como aqueles associados a fontes eólica e solar. Porém, devido à alta demanda e a necessidade de produção de energia em larga escala, e considerando que os elevados níveis de disponibilidade de combustíveis fósseis persistirão por várias décadas, a tendência é que as mudanças na matriz energética mundial aconteçam lentamente e que a combustão continue sendo um dos principais mecanismos de conversão de energia por muitos anos (WEO, 2008).

Neste cenário, o desenvolvimento das metodologias de modelagem da combustão é de essencial importância, tendo em vista os benefícios que podem ser obtidos pela utilização de simulações no auxílio de projetos industriais, tais como os de fornalhas, queimadores, motores e turbinas. Estes benefícios incluem, principalmente, o aumento da eficiência dos processos de combustão e a conseqüente redução da emissão dos poluentes associados a estes processos.

O ponto de partida para a modelagem da combustão de misturas gasosas é a identificação do grau de mistura existente entre os reagentes, isto é, entre o combustível e o oxidante. De acordo com este parâmetro, a combustão é usualmente classificada em dois grupos principais: não pré-misturada e pré-misturada. Os fenômenos envolvidos e a dinâmica da combustão em cada uma destas configurações são diferentes, de maneira que cada uma delas requer abordagens de modelagem específicas.

Na combustão não pré-misturada os reagentes se encontram inicialmente separados, sendo que é necessário que o combustível e o oxidante se misturem em níveis moleculares, em uma determinada região, para que a reação química possa acontecer. As chamas não pré-misturadas, também conhecidas como chamas de difusão, pelo fato do transporte difusivo exercer um papel fundamental na mistura dos reagentes em níveis moleculares, são largamente encontradas em dispositivos industriais, tais como fornos e queimadores. Na combustão pré-misturada os reagentes se encontram misturados em níveis moleculares antes da ocorrência da reação química. Diferentemente das chamas de difusão, as chamas pré-misturadas se propagam na forma de uma frente de chama que possui velocidade e espessura características da mistura. De uma maneira geral, estas chamas são utilizadas em ambientes confinados, uma vez que, pelo fato dos reagentes se encontrarem pré-misturados em níveis moleculares, dependendo do combustível e da riqueza da mistura, um simples aumento localizado da energia do sistema pode desencadear o processo de combustão. Cabe mencionar que estas chamas são encontradas, por exemplo, em câmaras de combustão de motores de ignição por centelha e em pós-queimadores de turbinas a gás.

Independentemente do grau de mistura existente entre os reagentes, a combustão de misturas gasosas pode ocorrer em escoamentos laminares e turbulentos. Para o primeiro caso, tanto a base teórica, quanto as metodologias de modelagem, se encontram largamente desenvolvidas nos dias de hoje (Buckmaster et al. 2005). No caso da combustão turbulenta, os primeiros desenvolvimentos teóricos datam da década de 1940 e a modelagem tem sido objeto de intensas pesquisas, conquistando um grande avanço nos últimos 30 anos, em particular para as aplicações da combustão turbulenta não pré-misturada. De acordo com Bilger et al. (2005), este fato está associado a maior complexidade de modelagem da combustão turbulenta pré-misturada, ocasionada pelo forte acoplamento e interação existentes entre as reações químicas e a turbulência.

Usualmente, a modelagem da combustão turbulenta pré-misturada é realizada mediante o uso de equações diferenciais parciais que descrevem o transporte de massa, da quantidade de movimento, das frações mássicas das espécies químicas e da energia, acopladas com uma equação de estado. Os métodos mais utilizados na resolução destas equações são as simulações numéricas diretas (DNS), as simulações baseadas em médias de Reynolds (RANS) e as simulações de grandes escalas

(LES). Nas DNS, as equações de transporte são resolvidas sem a necessidade de qualquer tipo de modelagem, até as menores escalas de tempo e comprimento da combustão e da turbulência. Devido à existência deste elevado grau de refinamento na descrição aerotermoquímica, os maiores requerimentos deste método são o emprego de esquemas numéricos com alta ordem de precisão, e a disponibilidade de uma imensa capacidade de processamento e armazenamento computacionais, o que torna sua aplicação inviável para casos que apresentem geometrias complexas e/ou altos números de Reynolds e Damköhler.

Nos métodos RANS e LES uma parcela dos graus de liberdade associados aos movimentos turbulentos é filtrada, de forma que apenas alguns destes são resolvidos explicitamente nas simulações, sendo os demais representados por termos abertos nas equações de transporte, os quais são determinados mediante o uso de modelos, conhecidos como modelos de turbulência. No caso do método RANS, uma filtragem temporal é realizada, a qual suprime todos os modos turbulentos, restando apenas o escoamento médio para ser calculado. A parte suprimida é avaliada mediante modelos que tentam captar, na medida do possível, a influência das estruturas turbulentas no escoamento. No método LES, uma filtragem espacial é realizada, de modo a separar as grandes das pequenas estruturas associadas ao movimento turbulento. Desta forma, a evolução espacial e temporal das grandes estruturas é resolvida explicitamente, sendo as influências das pequenas estruturas determinadas pelos modelos de turbulência. Cabe ressaltar que as pequenas estruturas turbulentas são, em geral, mais homogêneas e menos críticas para evolução do escoamento. Sendo assim, a modelagem da turbulência em LES é realizada de maneira a representar a taxa na qual a energia cinética turbulenta, contida na sua maioria nas grandes escalas, é transferida para as pequenas escalas (Sagaut, 2005).

No caso de escoamentos reativos, os processos de filtragem temporal ou espacial das equações de transporte implicam na necessidade de modelagem também das contribuições das reações químicas na dinâmica do escoamento. Como consequência, a determinação da taxa de reação química média ou filtrada deve ser realizada mediante a utilização de modelos de combustão. O desenvolvimento de modelos desta natureza é um dos grandes desafios nas simulações de escoamentos reativos, uma vez que os principais mecanismos envolvidos nas reações químicas, tais como o de difusão molecular e de liberação de energia,

acontecem em escalas de tempo e comprimento muito pequenas, normalmente ordens de grandeza menores que os espaçamentos de malha e os passos de tempo utilizados em simulações de casos práticos. Este fato impossibilita que os modelos de combustão sejam elaborados a partir de propriedades do escoamento resolvidas explicitamente, como é usualmente realizado na modelagem da turbulência. Por outro lado, seria inviável a aplicação direta de um filtro temporal ou espacial sobre o termo de taxa de reação química, presente nas equações de transporte das frações mássicas das espécies químicas, uma vez que este termo apresenta um comportamento altamente não linear, ditado pela expressão que descreve a cinética química de Arrhenius.

Tendo em vista estas dificuldades e considerando a possibilidade da ocorrência de diferentes regimes de combustão turbulenta pré-misturada, os modelos de combustão são divididos em duas classes principais, as quais são baseadas nas relações existentes entre os tempos e comprimentos característicos dos movimentos turbulentos e das reações químicas. A primeira classe trata dos casos de cinética química rápida, ou seja, dos casos em que o tempo característico das reações químicas é muito menor do que o tempo característico dos movimentos turbulentos. Nesta situação, as reações químicas acontecem sobre uma região extremamente fina, que separa os gases frescos dos gases queimados, sendo que, localmente, é adotada a hipótese de que a frente de chama se comporta como uma chama laminar. Por este motivo, estes modelos são conhecidos como modelos de elementos de chama laminar. Outra hipótese adotada é que as menores escalas de comprimento da turbulência, que podem ser encontradas no escoamento, são maiores do que a espessura de chama laminar da mistura, de modo que as influências da turbulência sobre a combustão ocorrem em níveis cinemáticos, mediante processos de dobramentos e corrugações da frente de chama, não havendo interação direta com as regiões internas das chamas, onde a maioria das reações químicas acontece. Estes modelos são aplicáveis somente para os casos de número de Damköhler alto e número de Karlovitz menor que a unidade, sendo que um dos exemplos mais populares é o modelo EBU (*Eddy-Break-Up*) (Spalding, 1970), o qual adota a hipótese de que a taxa de reação química média é função, principalmente, da escala de tempo integral da turbulência. Outros modelos largamente conhecidos são o BML (Bray, Moss e Libby, 1985), os modelos baseados em densidade de superfície de chama e os modelos baseados em equa-

ções de transporte da superfície de chama, conhecidos como modelos da equação G (Williams, 1985).

A segunda classe de modelos de combustão turbulenta pré-misturada trata dos casos de taxa de reação química finita, ou seja, daqueles em que os tempos e comprimentos característicos dos movimentos turbulentos e das reações químicas apresentam a mesma ordem de grandeza. Uma consequência disto é que os movimentos turbulentos exercem forte influência sobre a dinâmica das reações químicas, resultando no aumento da espessura e da velocidade de propagação das chamas. Mutuamente, as reações químicas influenciam as propriedades turbulentas por meio da expansão térmica presente nas frentes de chama, caracterizando um forte acoplamento entre os efeitos da turbulência e da combustão. Assim, estes casos são caracterizados por altos números de Reynolds, baixos números de Damköhler e números de Karlovitz menores do que a unidade, de modo que os modelos mais utilizados são aqueles baseados em função densidade probabilidade (PDF) de propriedades do escoamento.

É importante ressaltar que, a princípio, os modelos baseados em função densidade probabilidade transportada são aplicáveis para ambos os casos descritos acima (Mura et al., 2003). Tais modelos são fundamentados em análises estatísticas do tipo uni-ponto do escoamento, as quais são realizadas mediante a utilização de equações de transporte das PDFs das propriedades de interesse, tais como as componentes do vetor velocidade e do campo escalar. Dentre as principais vantagens do emprego destas equações, está a sua capacidade de fornecer uma descrição estatística completa, do tipo uni-ponto, das propriedades do escoamento reativo, levando-se em consideração os efeitos dos principais processos físicos presentes nas frentes de chama, os quais envolvem o transporte convectivo, a difusão molecular, a micro-mistura turbulenta e a liberação de energia das reações químicas.

Uma vez que as equações de transporte das PDFs são baseadas em análises estatísticas do tipo uni-ponto, os gradientes das propriedades do escoamento não podem ser resolvidos de forma explícita. Desta maneira, os efeitos de processos como os de difusão molecular e da dissipação turbulenta, citados acima, precisam ser avaliados mediante o uso de sub-modelos. Atualmente, os principais desenvolvimentos nas equações de transporte da PDF estão relacionados a melhoria do realismo físico destes sub-modelos (Fox, 2003). Por outro lado, os efeitos oriundos das reações químicas podem ser avaliados explicitamente, sem a necessidade

de modelagem. Ou seja, os momentos estatísticos do termo de taxa de reação química podem ser diretamente determinados, contornando-se, assim, um dos principais complicadores na modelagem da combustão turbulenta pré-misturada.

Neste contexto, o objetivo deste trabalho é utilizar a metodologia LES, a qual fornece a possibilidade da resolução explícita da maior parte da energia cinética associada ao movimento turbulento, em conjunto com o modelo da PDF transportada do campo escalar, usado para determinação das contribuições das reações químicas na dinâmica do escoamento. Neste acoplamento, as propriedades do escoamento são resolvidas sobre uma malha computacional Cartesiana, mediante a resolução das equações de transporte de massa, da quantidade de movimento e do campo escalar, as quais são acopladas a uma equação de estado. As contribuições das reações químicas são determinadas mediante o uso de partículas lagrangeanas, cujas propriedades evoluem de acordo com equações diferenciais estocásticas estatisticamente equivalentes à equação de transporte euleriana da PDF do campo escalar. No âmbito desta abordagem híbrida, LES e PDF evoluem em conjunto, trocando informações a cada passo de tempo: enquanto LES fornece os campos de velocidade, os coeficientes de difusão e as escalas de tempo e comprimento da turbulência para o modelo PDF, este retorna o valor da taxa de reação química filtrada, o qual é utilizado por LES na evolução do campo escalar, sendo que esta dinâmica se repete ao longo de todo o tempo de simulação.

Cabe ressaltar que a maior motivação envolvendo a utilização desta abordagem está associada a criação de um programa computacional com potencial de aplicação em problemas práticos, o qual seja capaz de simular a interação entre a combustão pré-misturada e a turbulência em maiores detalhes do que aqueles fornecidos pelos modelos de primeira ordem, para casos de escoamentos a baixo número de Mach. Será visto que o presente trabalho faz uso de algumas hipóteses simplificadoras, sendo a principal delas relacionada a descrição da cinética química da combustão. No entanto, o programa é desenvolvido de modo a que mecanismos detalhados de cinética química, entre outras melhorias, possam ser implementados no futuro sem maiores dificuldades.

A configuração experimental utilizada para validar os resultados obtidos pelo método LES-PDF, objeto dos estudos de Moreau (1977), Moreau e Boutier (1977) e Magre et al. (1988), consiste de um canal de seção transversal quadrada constante, onde a combustão é iniciada e estabilizada mediante a utilização de

escamentos paralelos de uma mistura reativa de metano e ar e de gases queimados. Os experimentos realizados são caracterizados por apresentar alto número de Reynolds e baixo número de Damköhler, sendo que é possível constatar uma forte interação entre os movimentos turbulentos e as reações químicas. Neste trabalho, esta interação é analisada em termos da estrutura do escoamento reativo e das propriedades das chamas. Adicionalmente, análises quantitativas são realizadas mediante comparações dos resultados obtidos com os dados experimentais em termos do campo de velocidade e de turbulência, e do campo de temperatura.

É interessante ressaltar que são raros os estudos de modelagem, disponíveis na literatura, que fazem uso destes dados experimentais para uma validação detalhada dos resultados obtidos. Em particular, é possível mencionar os trabalhos de Zimont et al. (2001) e Ribert e Champion (2004). Entretanto, nota-se que estes se concentram em análises baseadas nas propriedades médias das chamas e do escoamento reativo, sem apresentar uma discussão aprofundada das influências recíprocas existentes entre os movimentos turbulentos e as reações químicas. Neste contexto, cabe reproduzir as palavras de Bilger et al. (2005): “*Modeling of the experimental data of Magre et al. (1988) has been addressed by few investigators and remains a challenge to theoreticians and modelers*”.

1.1. Organização do Trabalho

O presente trabalho é organizado da seguinte maneira: no Cap. 2 é apresentada uma revisão bibliográfica, a qual se concentra em experimentos envolvendo a combustão turbulenta pré-misturada e na modelagem da turbulência e da combustão. Na primeira parte são revisados alguns dos principais estudos experimentais que produziram resultados relevantes para o entendimento dos mecanismos físicos básicos da combustão turbulenta pré-misturada. Os principais aspectos revisados envolvem a caracterização da natureza e da estrutura das chamas, a classificação dos regimes de combustão turbulenta pré-misturada e os fenômenos decorrentes da interação entre a turbulência e as reações químicas. Na segunda parte do capítulo, os métodos de modelagem da turbulência e da combustão são apresentados brevemente. Os principais aspectos da aplicação do método LES em combustão

turbulenta são descritos em detalhe e uma revisão completa sobre os modelos de combustão é delineada, com ênfase no modelo da PDF transportada.

No Cap. 3 os conceitos teóricos e as formulações matemáticas correspondentes ao método LES e ao modelo da PDF transportada do campo escalar são apresentadas. As equações de transporte governantes do escoamento reativo e as respectivas hipóteses simplificadoras utilizadas são introduzidas. O processo de filtragem destas equações é ilustrado e a modelagem dos termos sub-filtro resultantes deste processo, isto é, dos tensores de Reynolds e dos fluxos escalares é descrita. Em seguida, as estratégias de modelagem do termo de taxa de reação química filtrada são apresentadas, mediante uma discussão detalhada do modelo da PDF transportada do campo escalar, na qual são apresentadas as equações diferenciais estocásticas que descrevem o comportamento da combustão.

O Cap. 4 apresenta os métodos numéricos empregados para resolução das equações apresentadas no Cap. 3. A primeira parte do capítulo se concentra em descrever o método dos volumes finitos, utilizado no referencial euleriano, e a segunda parte descreve detalhadamente os principais aspectos do método de Monte Carlo, empregado mediante o uso de partículas lagrangeanas. O acoplamento entre os dois métodos é descrito e a dinâmica do modelo híbrido é apresentada. No final do capítulo, as estratégias de paralelização do programa híbrido em relação aos referenciais euleriano e lagrangeano são discutidas separadamente,.

No Cap. 5 a configuração experimental utilizada para validação dos resultados obtidos nas simulações é apresentada em detalhe e uma análise do regime de combustão turbulenta pré-misturada encontrado no experimento é realizada. As simulações de casos quimicamente inertes são apresentadas, primeiramente mediante uma análise da equivalência estatística entre os métodos dos volumes finitos e de Monte Carlo, para o caso de transporte de um escalar passivo inerte. Em seguida, as análises da estrutura do escoamento inerte e as comparações com os dados experimentais são realizadas. Na segunda parte do capítulo, as simulações dos casos reativos são abordadas e os resultados obtidos são analisados em termos da estrutura do escoamento reativo e das propriedades das chamas. Por fim, uma análise quantitativa das propriedades do escoamento reativo é realizada mediante comparações dos resultados obtidos nas simulações com os dados experimentais de Moreau (1977), Moreau e Boutier (1977) e Magre et al. (1988).

No Cap. 6 são realizados os comentários finais, mediante um resumo dos principais resultados atingidos e das dificuldades encontradas, apresentando sugestões para melhorias a serem desenvolvidas em trabalhos futuros.

No Apêndice A são descritas as hipóteses simplificadoras para a descrição da cinética química da combustão e no Apêndice B é apresentada a derivação das equações de transporte da PDF.