

2 Revisão da Literatura

Os estudos da combustão turbulenta podem ser divididos em abordagens teóricas, experimentais e numéricas. As duas primeiras estão intimamente relacionadas, uma vez que a maioria dos desenvolvimentos teóricos tem origem em observações empíricas dos fenômenos físicos e químicos da turbulência e combustão. De maneira semelhante, os desenvolvimentos numéricos apresentam uma grande dependência de resultados experimentais, os quais fornecem bases de dados fundamentais para validação de qualquer abordagem de modelagem.

Sendo assim, a primeira parte deste capítulo apresenta uma revisão de estudos experimentais que produziram resultados relevantes para o entendimento dos mecanismos físicos básicos do problema da combustão turbulenta pré-misturada. Os principais aspectos revisados envolvem a caracterização da natureza e da estrutura das chamas turbulentas e as implicações da interação entre turbulência e combustão. Em particular, são abordados os diagramas de combustão turbulenta pré-misturada, processos de dobramento e corrugação das frentes de chama pela turbulência, fenômenos de transporte difusivo contra-gradiente do campo escalar e fenômenos de turbulência amenizada ou amplificada pelas chamas.

A segunda parte do capítulo se concentra nas abordagens numéricas, apresentando uma breve revisão das metodologias mais utilizadas para modelagem da turbulência e combustão. Os principais aspectos do método de Simulação de Grandes Escalas em combustão turbulenta são descritos em detalhe. Uma revisão completa sobre a modelagem da taxa de reação química também é delineada, com ênfase na formulação do modelo baseado em Função Densidade Probabilidade transportada.

2.1. Experimentos em Combustão Turbulenta Pré-Misturada

As primeiras pesquisas em combustão turbulenta pré-misturada foram conduzidas nos anos 40, quando Damköhler introduziu o conceito de que o dobramento das frentes de chama devido à ação da turbulência seria o principal mecanismo de controle da combustão turbulenta. Duas décadas mais tarde, a primeira visualização experimental de uma chama turbulenta pré-misturada foi apresentada por Lewis e von Elbe (1961). O experimento consistia em uma chama de Bunsen turbulenta mantida por um escoamento de reagentes pré-misturados a alta velocidade. A espessura aparente da chama turbulenta é muito maior do que a espessura da chama laminar da mesma mistura, como pode ser visto na Figura 2.1. A partir dos ângulos dos cones das chamas, Lewis e von Elbe deduziram que a velocidade da chama turbulenta também é muito maior do que a velocidade da chama laminar.

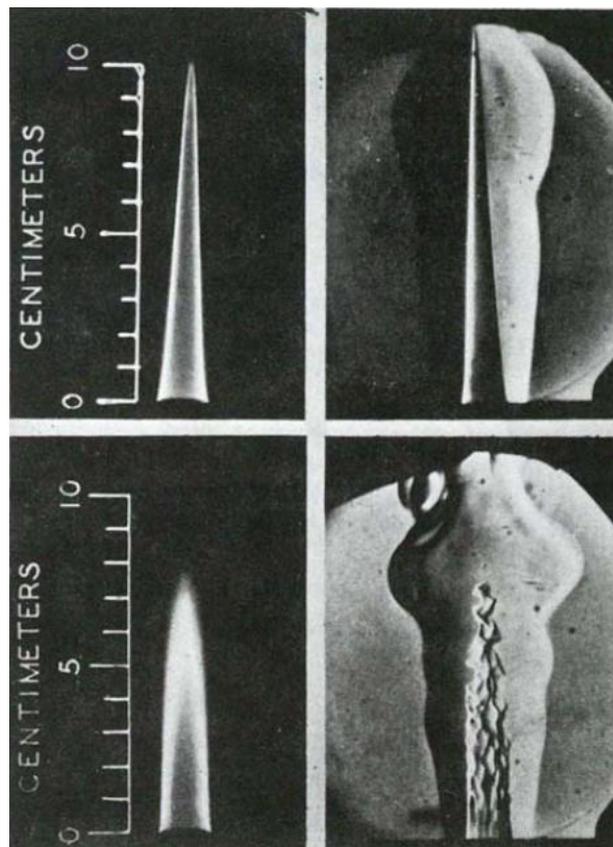


Figura 2.1 Chamas laminares (em cima) e turbulentas (em baixo) pré-misturadas em um queimador de Bunsen turbulento. Lado esquerdo: fotografias obtidas por longa exposição. Lado direito: fotografias instantâneas utilizando a técnica de Schlieren (Lewis e Von Elbe, 1961).

A partir destes resultados experimentais, questões relacionadas à natureza das chamas turbulentas pré-misturadas e ao conceito de velocidade de chama turbulenta começaram a ser levantadas. Inicialmente, tentou-se uma analogia, no sentido de que a chama turbulenta seria resultado das instabilidades intrínsecas das chamas laminares, da mesma forma que o escoamento turbulento é resultado das instabilidades do escoamento laminar. No entanto, verificou-se que as chamas turbulentas apresentam um comportamento que contradiz esta analogia, tais como uma invariância em relação às condições de contorno e à configuração geométrica do queimador. Deste modo, o termo chama turbulenta é usado para designar as chamas que estão inseridas em um meio gasoso onde a turbulência existe antes mesmo de encontrar a chama. Portanto, nos casos de chamas estabilizadas por obstáculos ou paredes, o escoamento a montante da chama é turbulento. De maneira semelhante, quando uma chama turbulenta se propaga em um meio gasoso pré-misturado, admite-se que as flutuações da velocidade de propagação das chamas ocorrem devido às interações com a turbulência.

De maneira oposta as chamas laminares, as quais possuem uma velocidade de propagação, S_L , e uma espessura característica, δ_L , típicas da mistura, a velocidade S_T e a espessura δ_T da chama turbulenta não são propriedades que podem ser bem definidas no escoamento e carecem ainda hoje de uma definição universal. Como consequência, tais propriedades são definidas estatisticamente, de maneira análoga às propriedades da turbulência. É comum considerar-se uma amostra de chamas individuais, cada uma delas exibindo flutuações no tempo e no espaço, onde as propriedades são avaliadas como médias estatísticas das realizações instantâneas. Se a chama turbulenta se encontrar em estado estatisticamente estacionário, médias temporais podem ser empregadas. Nos casos em que a homogeneidade estatística é verificada para uma ou mais direções, médias espaciais podem ser utilizadas. Desta forma, torna-se conveniente definir S_T como uma velocidade de chama turbulenta média e δ_T como uma espessura de chama turbulenta média. Nota-se que, em geral, o termo médio é omitido, sendo que δ_T é frequentemente denominada espessura coletiva de chama.

Neste contexto, relações empíricas sugerem que a velocidade e a espessura de chama turbulenta sejam funções algébricas das escalas de comprimento e de energia cinética da turbulência, assim como de propriedades moleculares e químicas da mistura. Geralmente, a relação entre estas grandezas é expressa em

termos de números adimensionais, tais como o número de Damköhler, Da (razão entre o tempo característico das reações químicas e o tempo característico das escalas integrais da turbulência), o número de Reynolds, Re (razão entre forças inerciais da turbulência e forças moleculares de viscosidade), e o número de Karlovitz, Ka (razão entre as escalas de comprimento características das reações químicas e aquelas das menores escalas turbulentas). As expressões mais simples para velocidade de chama turbulenta têm a forma $S_T / S_L = f(u' / S_L)$, onde u' é a intensidade das flutuações turbulentas

No entanto, é importante ressaltar que a velocidade e espessura médias da chama turbulenta não são estatisticamente estacionárias nas regiões de interesse da maioria dos casos práticos. Em geral, elas precisam ser avaliadas em casos de comportamento não assintótico, o que implica na existência de dependências do tempo e do espaço. A princípio, um regime transiente e anisotrópico não pode ser reproduzido por fórmulas algébricas, uma vez que as variações temporais e espaciais das propriedades da chama em relação ao seu ponto de ignição devem ser levadas em consideração. Nestes casos, a evolução das propriedades médias das chamas turbulentas deve ser determinada mediante o uso de equações diferenciais parciais, nas quais uma representação matemática da combustão e da turbulência permite o cálculo de S_T e δ_T . Tal representação matemática deve conter modelos capazes de descrever os efeitos do transporte turbulento, isto é, dos tensores de Reynolds e fluxos escalares, e da taxa de reação química média. Para que seja possível o desenvolvimento e validação de modelos desta natureza, experimentos que coloquem em evidência as interações e fenômenos presentes nos problemas de combustão turbulenta são imprescindíveis.

Nas duas seções a seguir, apresenta-se uma revisão de alguns estudos experimentais conduzidos nas últimas décadas, divididos por configurações características de chamas turbulentas propagativas e de chamas turbulentas estabilizadas. Todos os experimentos revisados produziram resultados relevantes para o entendimento dos mecanismos físicos básicos do problema da combustão turbulenta pré-misturada. Adicionalmente, alguns deles contribuíram de forma decisiva no desenvolvimento e na compreensão de métodos de modelagem numérica. Cabe mencionar que esta revisão foi inspirada no trabalho de Borghi et al. (2007), o qual apresenta em detalhe a maioria dos experimentos revisados nas duas seções subseqüentes.

2.1.1. Chamas Turbulentas Propagativas

As propriedades estruturais das chamas turbulentas propagativas foram estudadas experimentalmente por Abdel-Gayed e Bradley (1989), mediante o uso de uma chama iniciada no centro de uma câmara de combustão semi-esférica preenchida por uma mistura de metano e ar. Flutuações turbulentas foram produzidas por ventiladores posicionados nas extremidades da câmara de combustão e a taxa de dissipação turbulenta foi relacionada à potência elétrica dissipada pelos ventiladores. Visualizações foram realizadas através de uma janela localizada na região próxima do ponto de ignição. Os resultados típicos obtidos são mostrados na Figura 2.2.

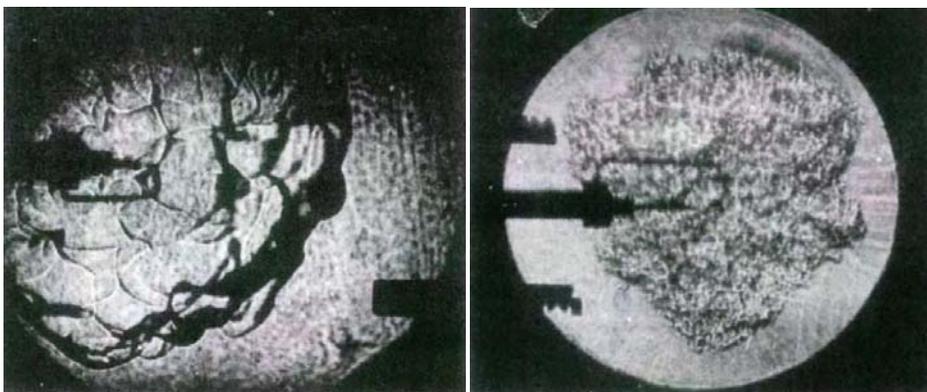


Figura 2.2 Imagens de chamas confinadas em uma câmara de combustão semi-esférica. Lado esquerdo: elementos de chamas laminares contínuos ($KaLe = 0,003$). Lado direito: ausência dos elementos de chama contínuos e aparecimento de estruturas de chamas distribuídas ($KaLe = 0,238$) (Abdel-Gayed e Bradley, 1989).

Investigou-se a influência sobre a estrutura da chama do número de Karlovitz, isto é, da razão entre as escalas características de comprimento dos processos químicos e da dissipação turbulenta. Para baixos números de Karlovitz, observa-se a existência de estruturas de chama bem definidas, formadas por elementos de chamas dobrados pelos efeitos da turbulência. As interações entre o movimento turbulento e as reações químicas acontecem em níveis cinemáticos e não influenciam significativamente as estruturas internas das chamas. Para altos números de Karlovitz, as estruturas contínuas de elementos de chamas são quebradas em estruturas distribuídas, sugerindo que as escalas características da

turbulência são pequenas o suficiente para interagir com a região interna das chamas e alterar a dinâmica das reações químicas.

Estes resultados experimentais fornecem uma base para compreensão de duas abordagens distintas de modelagem. A primeira delas, conhecida como abordagem de elementos de chama laminares, é baseada na hipótese de que as escalas de tempo e comprimento das reações químicas são muito pequenas quando comparadas àquelas do movimento turbulento. Neste caso, a frente de chama é vista como uma coleção de chamas laminares contínuas, de espessura fina e aproximadamente constante, as quais são dobradas pelos efeitos da turbulência ao longo de sua trajetória. A segunda abordagem baseia-se na hipótese de que as escalas de tempo e comprimento das reações químicas são equivalentes àquelas do movimento turbulento. As interações provenientes desta equivalência resultam em chamas mais espessas ou em chamas distribuídas.

Trinité et al. (1989) contribuíram com visualizações de chamas turbulentas propagativas em uma câmara de combustão de seção transversal quadrada. A chama foi iniciada por um conjunto de faíscas alinhadas na entrada da câmara e as imagens foram obtidas por feixes de laser projetados através de uma janela de visualização. As espessuras instantâneas das chamas dobradas e a espessura média da chama turbulenta, δ_T , puderam ser diretamente estimadas, como sugere a Figura 2.3.

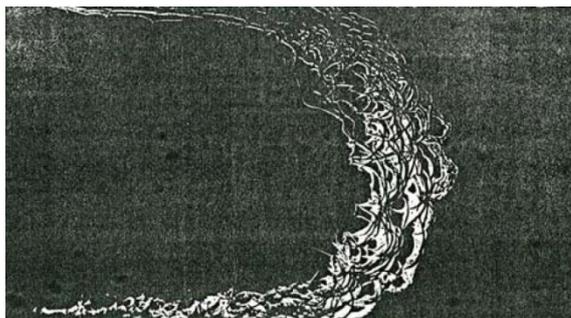


Figura 2.3 Tomografia a Laser de uma chama turbulenta de metano e ar se propagando da esquerda para direita em uma câmara de combustão de seção transversal quadrada (Trinité et al., 1989).

Nesta figura, a chama turbulenta se propaga no escoamento da esquerda para direita. É possível observar que a turbulência exerce influências, dobrando os elementos de chamas, os quais para uma mistura de metano e ar possuem uma espessura característica da ordem de milímetros. A espessura de chama turbulenta

média, δ_T , é caracterizada pela coleção das chamas dobradas, sendo que neste estudo sua ordem de grandeza gira em torno da dezena de milímetros.

Abdel-Gayed et al. (1984) estudaram a correlação entre a velocidade de chama turbulenta e a intensidade da turbulência, mediante o uso de uma câmara de combustão semi-esférica, preenchida por uma mistura de metano e ar. Estes autores obtiveram uma relação empírica,

$$\frac{S_T}{S_L} \approx \left(1 + \frac{u'}{S_L}\right)^n, \quad (2-1)$$

onde S_T é a velocidade da chama turbulenta, S_L é a velocidade de chama laminar, u' é a intensidade das flutuações turbulentas e n é um coeficiente empírico.

Esta relação é ilustrada na Figura 2.4, na qual S_T é traçada como função da energia cinética do movimento turbulento, k ($u' \sim \sqrt{k}$). É possível perceber que a velocidade de propagação da combustão é amplificada pela turbulência. Em um primeiro momento, S_T aumenta linearmente com k . Na primeira parte do gráfico, o aumento de S_T está diretamente relacionado ao aumento da área superficial da chama que é dobrada pelos efeitos da turbulência. Para maiores valores de intensidade turbulenta, a velocidade média da chama turbulenta, S_T , se torna aproximadamente independente da velocidade de chama laminar, S_L . A região intermediária do gráfico sugere que a combustão não é caracterizada por elementos de chamas contínuos, o que implica que o aumento da velocidade de chama turbulenta, S_T , não se relaciona linearmente com o aumento da área superficial das chamas. A última parte do gráfico mostra que a extinção da chama pode ocorrer devido à turbulência muito intensa.

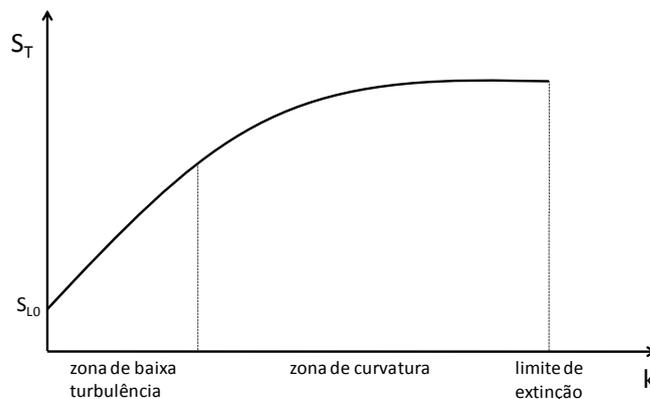


Figura 2.4 Variação da velocidade de chama turbulenta em função da energia cinética do movimento turbulento (Poinsot e Veynante, 2005).

Uma alternativa viável para realização de experimentos de chamas propagativas confinadas consiste na utilização de grades geradoras de turbulência (Borghì et al., 2007). Nesta configuração, uma chama pode ser iniciada e propagada em um escoamento aproximadamente homogêneo a jusante das grades geradoras da turbulência. Imagens instantâneas das frentes de chama podem ser adquiridas ao longo da trajetória destas, assim como medidas de velocidade podem ser obtidas por velocimetria de imagem de partículas (PIV).

Utilizando este tipo de configuração experimental, Boukhalfa et al. (2000, 2002) e Renou e Boukhalfa (2001) demonstraram as influências sobre as estruturas das chamas das propriedades de difusão molecular de três tipos de misturas diferentes, no caso da propagação esférica de chamas turbulentas. Foram estudadas misturas de ar com hidrogênio, metano e propano, respectivamente. A Figura 2.5 ilustra os resultados típicos obtidos para as duas primeiras misturas. Foi observado que, para número de Lewis menor que a unidade, correspondendo à mistura de ar e hidrogênio, a frente de chama apresentou dobramentos intensos, perdendo em alguns pontos a continuidade dos elementos de chama e apresentando em casos extremos a formação de bolsas de produtos da combustão nos gases frescos. Concluiu-se que, para um mesmo valor de intensidade turbulenta, a variação das propriedades moleculares da mistura pode influenciar significativamente a taxa de dobramento das chamas, alterando a densidade de superfície de chama e, por conseqüência, a taxa de reação química.

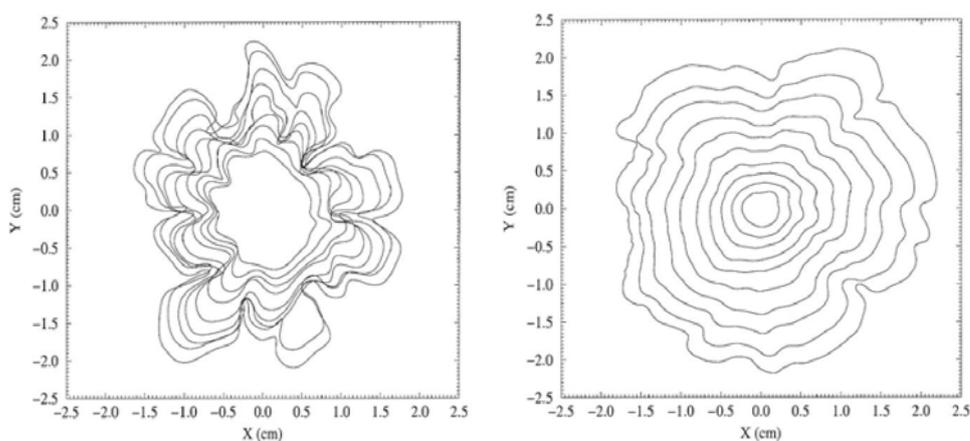


Figura 2.5 Expansão típica de chamas turbulentas confinadas em uma câmara de combustão esférica. Lado Esquerdo: dobramento intenso das chamas para uma mistura de ar e hidrogênio (número de Lewis muito menor que a unidade). Lado direito: presença dos elementos de chama laminar para uma mistura de ar e metano (numero de Lewis próximo a unidade) (Renou e Boukhalfa, 2001).

2.1.2. Chamas Turbulentas Estabilizadas

A grande maioria dos experimentos em combustão turbulenta pré-misturada utiliza chamas turbulentas estabilizadas por paredes, obstáculos ou escoamentos de gases paralelos. Dentre os aparatos experimentais mais interessantes, pode-se destacar o queimador de Bunsen turbulento, o qual foi utilizado por Dumont et al. (1993) para uma mistura de metano e ar. Neste experimento foi estabilizada uma chama dobrada pela turbulência ao longo de todo o escoamento, como pode ser visto na Figura 2.6. Os principais objetivos foram: (a) verificar os efeitos da expansão térmica das reações químicas sobre o campo de flutuações turbulentas e (b) medir a densidade de superfície de chama média e avaliar a taxa de reação química.

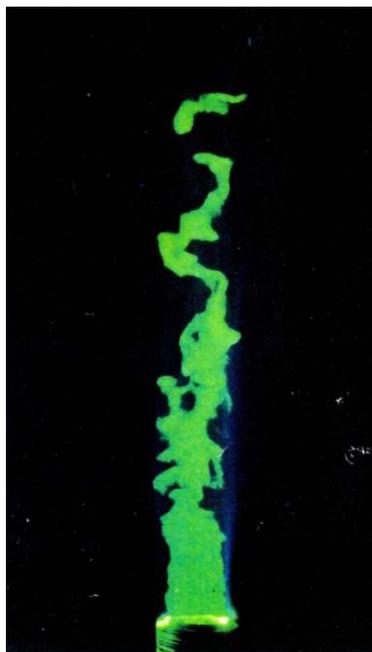


Figura 2.6 Fotografia de uma chama turbulenta resultante da mistura de metano e ar em um queimador de Bunsen. Imagem da difusão de um plano de Laser por gotículas de óleo (Dumont et al., 1993).

Em relação ao primeiro objetivo, verificou-se que, neste caso particular de escoamento não confinado, a energia cinética turbulenta foi pouco afetada pelos efeitos da liberação de calor, sugerindo a existência de um balanço entre os efeitos da difusão molecular e das reações químicas. Em relação ao segundo objetivo, observou-se pouca influência dos dobramentos e curvaturas dos elementos de

chamas, o que permitiu o cálculo da taxa de reação química como sendo proporcional a $\rho^u S_L \bar{\Sigma}$, onde S_L é a velocidade de uma chama laminar plana, e ρ^u e $\bar{\Sigma}$ são, respectivamente, a densidade dos gases frescos e da superfície média de chama por unidade de volume. Nota-se que este resultado fornece a base teórica dos modelos numéricos que calculam a taxa de reação química baseados no conceito de densidade de superfície de chama.

Borghì (1985) e Peters (1999) utilizaram o mesmo tipo de aparato experimental com o objetivo de definir os modos possíveis de interação entre as estruturas turbulentas e estruturas das chamas. As possibilidades de interação foram baseadas em relações entre escalas características típicas de tempo e comprimento da turbulência e combustão, podendo ser representadas por um diagrama de prováveis regimes de combustão turbulenta pré-misturada, conhecido como diagrama de Borghi, o qual é ilustrado na Figura 2.7.

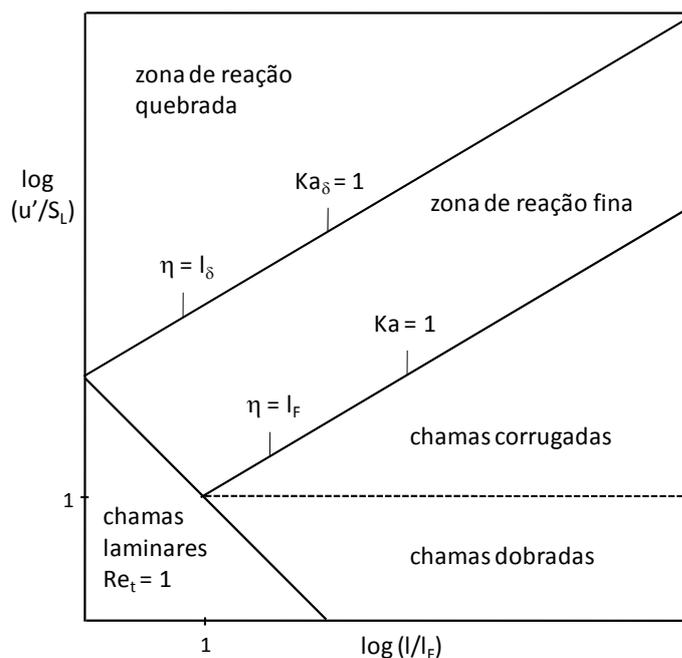


Figura 2.7 Diagrama de regimes de combustão turbulenta pré-misturada baseado nas escalas características típicas de tempo e comprimento da turbulência e combustão (Borghì, 1985 e Peters, 1999).

Neste diagrama, a abscissa expressa a razão l/l_F , a qual pode ser interpretada como uma medida da escala de comprimento integral do movimento turbulento l , que interage com as chamas de espessura l_F . Na presente notação, l_F é a espessura total de uma chama laminar, proporcional a espessura da camada de

pré-aquecimento. A espessura da camada interna da chama laminar, onde a grande maioria das reações químicas acontece, é denominada l_δ , sendo que sua ordem de grandeza é de aproximadamente $0,1l_F$. A ordenada mostra a razão u'/S_L , a qual é uma medida da intensidade turbulenta, u' , pela velocidade de chama laminar, S_L . As duas coordenadas são representadas em escalas logarítmicas e a linha $Re_T = 1$, onde $Re_T = u'l/S_L l_F$, separa o regime de chamas laminares ($Re_T < 1$) do regime de chamas turbulentas ($Re_T > 1$).

Neste contexto, quatro tipos diferentes de regimes de combustão turbulenta pré-misturada podem ser identificados:

- (a) Regime de chamas dobradas: é delimitado pela condição $u'/S_L < 1$. A velocidade de chama laminar é maior que as flutuações de velocidade e domina o processo da interação entre turbulência e combustão. Praticamente não há dobramento das chamas induzido pelo movimento turbulento. As aplicações práticas dentro deste regime são poucas, uma vez que na maioria dos projetos industriais a turbulência é necessária para aumentar a velocidade característica do processo de combustão,
- (b) Regime de chamas corrugadas: é delimitado pelas condições $u'/S_L > 1$ e $Ka < 1$, onde $Ka = l_F^2/\eta^2$, sendo η a escala de comprimento de Kolmogorov. A intensidade característica da turbulência é maior do que a velocidade de chama laminar, o que ocasiona a corrugação da frente de chama. No entanto, as menores estruturas turbulentas na escala de comprimento de Kolmogorov, η , são maiores do que a espessura de chama laminar, l_F , e não interagem com a estrutura interna da chama. A interação entre a turbulência e a frente de chama acontece apenas em níveis cinemáticos, não alterando os processos químicos da combustão,
- (c) Regime de zona de reação fina: é delimitado pelas condições $Ka > 1$ e $Ka_\delta < 1$, onde $Ka_\delta = l_\delta^2/\eta^2$. A primeira condição indica que a escala de comprimento de Kolmogorov, η , é menor do que a espessura de chama laminar, l_F . A segunda condição indica que η é maior do que a espessura da camada interna da chama laminar, l_δ . Neste caso, a turbulência pode alterar a estrutura da camada de pré-aquecimento da chama e modificar significativamente o transporte das espécies químicas

e da energia. No entanto, não ocorre interação com a camada interna da chama, onde a grande maioria das reações químicas acontece,

- (d) Regime de zona de reação quebrada: é delimitado pela condição $Ka_\delta > 1$. A escala de comprimento característica da turbulência é suficientemente pequena para penetrar na espessura da camada interna da chama laminar, l_δ . Isto pode ocasionar quebras locais das reações químicas devido à perda de calor e radicais para camada de pré-aquecimento, podendo levar a extinções locais da combustão em alguns casos.

Uma questão que se encontra aberta é relativa ao limite de aplicação da abordagem de elementos de chama laminares, onde uma frente de chama dobrada e corrugada pelos efeitos da turbulência mantém uma espessura fina e contínua, aproximadamente constante, com características locais de uma chama laminar. Chen e Bilger (2001, 2002) e Dinkelacker (2003) argumentam que os diagramas clássicos, tais como o apresentado na Figura 2.7, supõem que o processo de dobramento intenso dos elementos de chama, que culmina no aumento da espessura e na descaracterização dos elementos de chama laminar, acontece a qualquer número de Reynolds. No entanto, seus experimentos mostram que tal processo é mais provável para números de Reynolds suficientemente altos, o que implicaria em uma maior faixa de validade do comportamento de elementos de chama laminar. A necessidade de estudos experimentais adicionais é enfatizada, os quais tenham o objetivo de resolver questões como a influência da taxa média de deformação das estruturas de chama e da dependência do número de Reynolds na delimitação dos diferentes regimes de combustão turbulenta pré-misturada.

Outra questão que tem sido largamente abordada, com mais ênfase nos trabalhos teóricos e numéricos, está relacionada ao fenômeno de difusão contra-gradiente no transporte turbulento do campo escalar reativo. Segundo Poinot e Veynante (2005), a ocorrência deste fenômeno é maior em chamas turbulentas estiradas, nas quais os efeitos da expansão térmica oriunda das reações químicas podem causar diferenças de pressão entre os gases frescos (mais densos) e os gases queimados (menos densos). Estes efeitos podem ser determinantes no transporte do campo escalar reativo.

Assumindo reações químicas infinitamente rápidas e a configuração de elementos de chama laminares, Libby e Bray (1981) mostraram que o transporte

turbulento de um escalar reativo, representado por uma temperatura adimensional, c , conhecida como variável de progresso, pode ser determinado por,

$$\overline{\rho u'' c''} = \bar{\rho}(\overline{u_i^b} - \overline{u_i^u})\tilde{c}(1 - \tilde{c}), \quad (2-2)$$

onde $\overline{u_i^u}$ e $\overline{u_i^b}$ são, respectivamente, as velocidades condicionais nos gases frescos e queimados e \tilde{c} é a média ponderada pela densidade da variável de progresso. Esta equação indica que o transporte do escalar por difusão gradiente (GD – *Gradient Diffusion*) ou contra-gradiente (CGD – *Counter Gradient Diffusion*) está diretamente relacionado ao sinal resultante da diferença entre as velocidades médias nos gases frescos e gases queimados.

Do ponto de vista experimental, o fenômeno da difusão contra-gradiente foi originalmente evidenciado por Moss (1980). Mais recentemente, Frank et al. (1999) utilizaram técnicas de diagnóstico a Laser para caracterizar o escoamento turbulento de um escalar reativo (variável de progresso c) mediante medições de velocidades condicionais em um queimador de Bunsen. Constatou-se que a ocorrência do fenômeno de difusão contra-gradiente depende principalmente da taxa de liberação de calor das reações químicas, τ_{lb} , e da razão entre a intensidade turbulenta e a velocidade de chama laminar, u'/S_L . A transição entre difusão gradiente e contra-gradiente pode ser caracterizada pelo valor do número de Bray, Nb , definido pela razão $\tau_{lb}S_L/u'$. No entanto, convém mencionar que vários aspectos deste fenômeno ainda requerem investigações mais detalhadas, sendo que a questão da estabilização de chamas turbulentas pré-misturadas na presença de difusão contra-gradiente exige uma atenção especial.

Recentemente, técnicas avançadas de diagnóstico de imagens a Laser têm sido empregadas para caracterização da interação entre turbulência e combustão. Em particular, tais técnicas permitem uma verificação detalhada das influências das chamas sobre o campo de vorticidade de escoamentos turbulentos reativos. Peters (2000) argumenta que uma frente de chama pode exercer influências sobre um escoamento turbulento de duas formas distintas: gerando/amplificando ou amenizando o campo de vorticidade. No primeiro caso, vorticidade pode ser gerada pela aceleração da frente de chama induzida pela liberação de calor das reações químicas. O termo FGV (*Flame Generated Vorticity*) é utilizado na literatura para designar este fenômeno. No segundo caso, o campo de vorticidade

pode ser amenizado devido às alterações da viscosidade cinemática do fluido associada à mudança de temperatura, resultando em uma diminuição do número de Reynolds local e na relaminarização em pontos específicos do escoamento em casos extremos.

Steinberg et al. (2006) utilizaram técnicas de PIV (*Particle Imaging Velocimeter*), com câmeras de alta resolução e velocidade, para visualizar a interação entre vórtices e chamas em um bico de Bunsen turbulento. Um histórico de imagens foi registrado em seqüência, possibilitando a identificação da chegada dos vórtices na região da frente de chama, a passagem destes através da frente de chama e os fenômenos resultantes da interação. Imagens do campo de vorticidade foram obtidas em intervalos de tempo de 1,5 ms. A razão entre a intensidade de flutuação turbulenta e a velocidade de chama laminar, u'/S_L , foi igual a 2,9 e os reagentes usados são metano e ar. A frente de chama turbulenta foi caracterizada pelo máximo gradiente de densidade de partículas dispersas no escoamento, utilizadas na técnica de PIV, e está representada pelas linhas pretas espessas na Figura 2.8.

Nesta figura, a seqüência de imagens dos quadros superiores ilustra o processo clássico de dobramento de uma frente de chama pela turbulência. Nota-se que um vórtice atravessa a frente de chama e provoca um dobramento com dimensões características semelhantes à deste vórtice. Nos quadros intermediários o fenômeno de FGV é observado. Um único vórtice atravessa e provoca o dobramento da frente de chama. No entanto, a aceleração brusca resultante da expansão térmica das reações químicas gera um par de vórtices contra-rotativos nos gases queimados. A rotação destes vórtices age de maneira a atenuar o dobramento da frente de chama. Neste caso, FGV é um fator estabilizante que tende a diminuir a magnitude da taxa de dobramento das chamas. Na seqüência de imagens dos quadros inferiores, observa-se a existência de diversos vórtices com grande velocidade de rotação. No entanto, a influência destes sobre a frente de chama é anulada por estarem muito próximos uns aos outros e possuírem sentidos de rotação opostos. Isto indica que vários vórtices pequenos podem exercer menos influência do que um único vórtice mais forte e de dimensões maiores. Admite-se ser mais provável que os grandes vórtices com grande tempo de residência atuem de maneira mais eficiente no processo de formação de chamas espessas ou de chamas distribuídas.

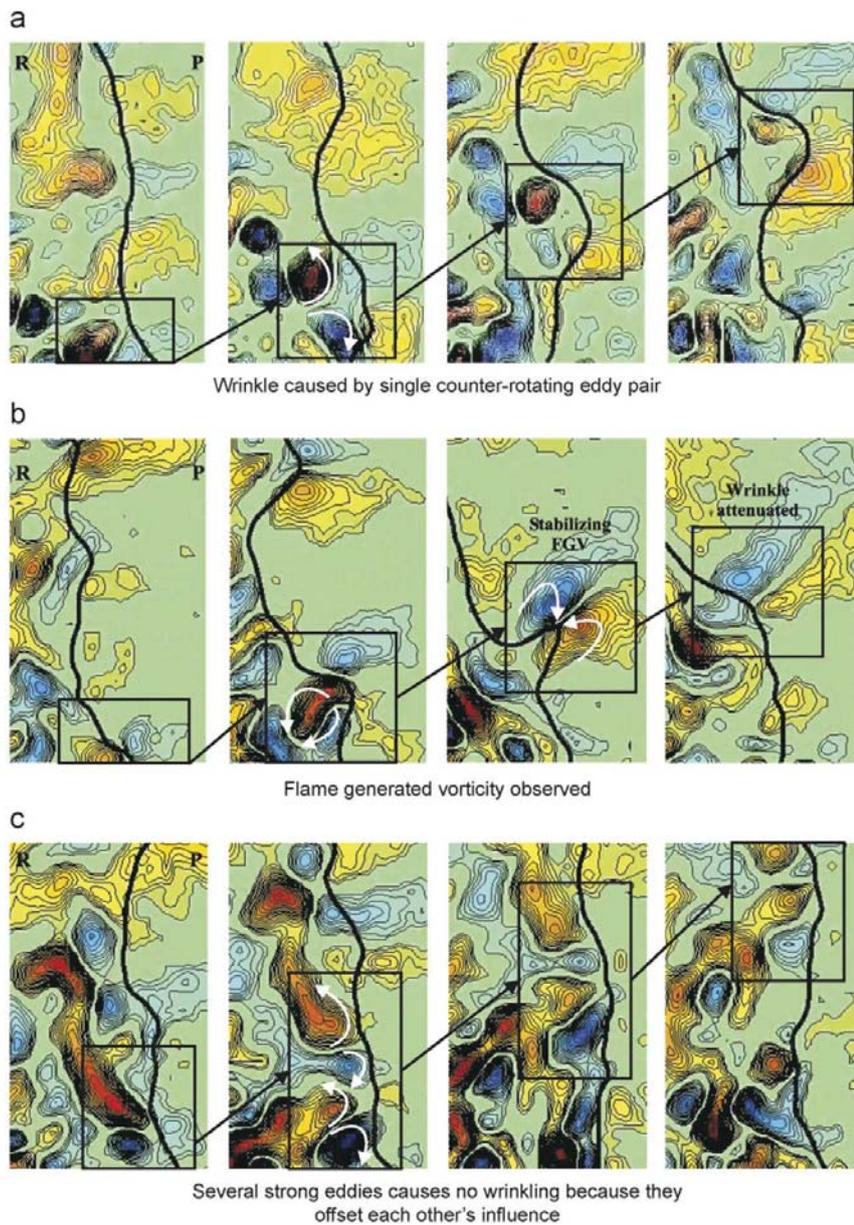


Figura 2.8 Imagens da interação entre vórtices e chama usando PIV cinema-stereo para uma chama de Bunsen turbulenta de metano e ar. O sentido do escoamento é de baixo para cima. A linha escura é a frente de chama turbulenta - os reagentes estão do lado esquerdo. A vorticidade positiva é caracterizada 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).

É importante lembrar que o avanço das técnicas experimentais óticas, não intrusivas, ocorrido em particular durante as últimas décadas, proporcionou uma maior capacidade de investigação dos detalhes das estruturas das chamas e dos fenômenos físicos característicos da interação entre turbulência e combustão. Como consequência, encontram-se disponíveis na literatura diversos estudos que

contribuem de diferentes maneiras para a melhor compreensão do fenômeno da combustão turbulenta. No presente trabalho, optou-se pela revisão daqueles experimentos que colocaram em evidência os principais fenômenos físicos envolvidos na interação entre a turbulência e a combustão e, adicionalmente, produziram resultados relevantes para o desenvolvimento de abordagens de modelagem da combustão turbulenta pré-misturada.

2.2. Modelagem da Turbulência e Combustão

Como mencionado na seção 2.1, as propriedades das chamas turbulentas não são estatisticamente estacionárias ou homogêneas nas regiões de interesse da maioria dos casos práticos. Portanto, qualquer tentativa de modelagem deve apresentar estratégias que considerem estas variações temporais e espaciais. Em geral, tais estratégias são concebidas através da utilização de um conjunto de equações diferenciais parciais representativas da evolução temporal e espacial das propriedades da turbulência e combustão. Devido à grande complexidade matemática destas equações, em quase todos os casos constata-se a necessidade do emprego de métodos numéricos. Inerente a estes métodos, existem vários tipos de simplificações, as quais variam desde limitações de graus de liberdade nas resoluções espaciais e temporais, até o emprego de modelos aproximados que substituem termos abertos nas equações.

Neste contexto, dentre os métodos mais utilizados na modelagem de escoamentos turbulentos reativos destacam-se: (a) Simulações Numéricas Diretas (DNS – *Direct Numerical Simulation*); (b) Métodos baseados nas médias de Reynolds (RANS – *Reynolds Average Navier Stokes*); (c) Simulação de Grandes Escalas (LES – *Large Eddy Simulation*); (d) Métodos baseados em Função Densidade de Probabilidade (PDF – *Probability Density Function*).

A DNS é um método em que todas as escalas turbulentas são resolvidas numericamente sem a necessidade de qualquer tipo de modelagem das equações de transporte que descrevem o escoamento e a combustão. Quando utilizada na área de combustão turbulenta para casos de cinética química simplificada, tanto as variáveis relacionadas à mecânica dos fluidos quanto o termo de reação química podem ser descritos com precisão pelas equações de conservação de massa,

quantidade de movimento linear, energia e espécies químicas, as quais devem ser acopladas com equações de estado. Estas equações de transporte são resolvidas até as menores escalas de comprimento, tanto das chamas quanto da turbulência (Poinsot et al., 1996). O custo computacional de uma DNS é, na maioria dos casos, proibitivo para aplicações práticas de engenharia, até mesmo para escoamentos quimicamente inertes, devido à necessidade de simulação de todo o espectro de escalas características de tempo e comprimento do escoamento. Mesmo com a evolução da informática dos dias de hoje, é pouco provável que a DNS seja viabilizada para aplicações práticas em um futuro próximo. No entanto, ela é desenvolvida em nível acadêmico e utilizada com frequência para validação de modelos aplicados a geometrias simplificadas (Geurts, 2003).

Os métodos RANS ainda são os mais largamente utilizados. Estes métodos consistem em aplicar uma média temporal nas equações de transporte, processo este que resulta em equações médias com termos abertos que necessitam de modelagem. Estes termos abertos são os tensores de Reynolds, os termos de transporte turbulento dos campos escalares e o termo de taxa de reação química média. Dentre as possíveis modelagens dos tensores de Reynolds, uma das mais utilizadas é o modelo $k - \varepsilon$, o qual introduz uma viscosidade turbulenta por meio da resolução de equações de transporte para energia cinética turbulenta, k , e da dissipação de energia cinética turbulenta, ε (Pope, 2000). Independentemente da escolha do modelo de turbulência, os métodos RANS modelam todo o espectro de flutuações turbulentas. Ou seja, os efeitos das flutuações de velocidade no escoamento são totalmente modelados. Isso significa que algumas estruturas turbulentas que provocam instabilidades na combustão, presentes quando da existência de camadas limites, jatos ou camadas de mistura (Libby e Williams, 1980), podem ser avaliadas inadequadamente, o que coloca em questão a validade da aplicação do método RANS nas situações em que os detalhes da interação entre combustão e turbulência são importantes.

Os métodos RANS também requerem modelos para descrever o transporte turbulento do campo escalar, por exemplo, da temperatura e da fração de massa de espécies químicas, e para taxa de reação química. A modelagem do transporte turbulento do campo escalar na presença de reação química é mais controversa do que em escoamentos quimicamente inertes devido à possibilidade de haver transporte por difusão contra-gradiente (Libby e Bray, 1981). Veynante et al.

(1997) demonstraram que o transporte contra-gradiente do escalar pode ocorrer quando o campo de escoamento próximo a chama é dominado pela aceleração induzida pela expansão térmica das reações químicas, enquanto que o transporte gradiente ocorre quando a turbulência domina o escoamento próximo a chama. Resultados mais recentes relacionados às questões de modelagem dos efeitos de difusão contra-gradiente podem ser encontrados em Bray et al. (2000) e Nishiki et al. (2002, 2006). Na prática, pela maior simplicidade de implementação, observa-se que os modelos mais empregados para o transporte turbulento do campo escalar continuam sendo aqueles baseados na hipótese de transporte do tipo gradiente.

A modelagem da taxa de reação química baseada na aplicação direta das médias de Reynolds está fora de cogitação, devido à extrema não linearidade das expressões que descrevem a cinética química de Arrhenius. Como resultado, modelos fenomenológicos são largamente utilizados. Dentre eles, o Eddy Break Up (EBU) (Spalding, 1970) é um dos mais conhecidos. Este modelo, baseado na hipótese de alto número de Reynolds e Damköhler, permite que o cálculo da taxa de reação química média seja função, principalmente, da escala de tempo da mistura turbulenta. Trata-se de um modelo válido para o caso de reação química muito rápida quando comparada ao tempo característico da turbulência, o qual não é capaz de representar satisfatoriamente as propriedades das chamas distribuídas ou o processo de extinção das chamas (Cant e Bray, 1988).

Outra abordagem para modelagem da taxa de reação química largamente empregada é a dos modelos de elementos de chama laminares, nos quais a chama turbulenta é vista como uma coleção de chamas laminares dobradas pela ação do escoamento. Estas chamas, extremamente finas, constituem uma interface entre os gases frescos e os gases queimados. Esta estrutura de chama é válida para reações químicas muito rápidas, ou seja, quando a escala de tempo da reação química é muito menor do que a da turbulência. Os modelos mais simplificados desta classe possuem a vantagem de desacoplar a turbulência da cinética química, uma vez que são baseados na hipótese de que a espessura da chama laminar é fina quando comparada à escala de Kolmogorov. Desta maneira, os efeitos da cinética química são isolados e modelados separadamente da turbulência. Esta abordagem se mostrou válida em algumas situações práticas (Poinsot et. al. 1990, 1991, Bray e Peters 1994), sendo que o modelo mais popular que utiliza este conceito é o BML (Bray, Moss e Libby, 1985).

Os métodos baseados em PDF, em particular os da PDF transportada, consistem em resolver uma equação de transporte para uma função densidade de probabilidade conjunta de um ou mais escalares. Dentre as principais vantagens deste método, está a sua capacidade de fornecer uma descrição estatística completa, do tipo uni-ponto, das propriedades do escoamento reativo. Tal descrição é obtida levando-se em consideração os principais processos físicos presentes em uma frente de chama, compostos pela difusão molecular, pela micro-mistura turbulenta e pela expansão térmica das reações químicas.

Na formulação dos métodos da PDF transportada, as médias e momentos de alta ordem do termo de reação química podem ser calculados sem a necessidade de modelagem. Os termos convectivos e de força de corpo também aparecem fechados e não necessitam de modelagem (Pope, 1985). Por outro lado, tendo em vista que o método fornece estatísticas do tipo uni-ponto, os gradientes das propriedades do escoamento não podem ser resolvidos de forma explícita. Na equação da PDF conjunta da velocidade e campos escalares, os efeitos do gradiente das flutuações de pressão e da mistura por difusão molecular também aparecem de forma aberta e precisam de modelos (Fox, 2003). Atualmente, os principais desenvolvimentos nos métodos PDF estão relacionados à melhoria do realismo físico dos modelos de mistura. Algumas contribuições recentes nesta área podem ser encontradas em Sabel'nikov e Gorokhovski (2001) e Sabel'nikov et al. (2005).

Usualmente, as equações de transporte da PDF são resolvidas via métodos de simulação Monte Carlo, onde partículas estocásticas são distribuídas no escoamento, as quais podem ser representadas em referenciais euleriano ou lagrangeano. No primeiro caso, as partículas são distribuídas em posições fixas no domínio de cálculo e suas propriedades evoluem de acordo com as equações de transporte da PDF euleriana. No segundo caso, as propriedades das partículas evoluem no escoamento de acordo com equações diferenciais parciais estocásticas equivalentes às equações de transporte da PDF euleriana (Colucci et al., 1998). Dentre estas abordagens, a segunda mostra-se mais estável e eficiente no processo de implementação numérica (Bisetti e Chen, 2005).

A maioria dos estudos disponíveis na literatura faz uso das equações de transporte das PDFs que descrevem as estatísticas de dois conjuntos principais de variáveis: (a) velocidade, entalpia e fração de massa de espécies químicas, ou (b)

entalpia e fração de massa de espécies químicas. Enquanto o primeiro fornece uma descrição estatística dos campos de velocidade, entalpia e espécies químicas, no segundo, os campos de velocidade e turbulência necessitam ser calculados utilizando-se outro método. O mais amplamente aplicado para este fim é o método RANS. Recentemente, o método LES também tem sido utilizado, o qual será objeto de uma seção a parte neste capítulo. Segundo Westbrook et al. (2005), o emprego de LES em combustão turbulenta pré-misturada é relativamente recente e oferece oportunidades para novos desenvolvimentos.

O acoplamento entre os métodos RANS ou LES, os quais fornecem os campos de velocidade e as escalas de tempo e comprimento da turbulência por meio de técnicas tradicionais de discretização tais como volumes finitos, com o método da PDF transportada, que faz uso de técnicas estocásticas para fornecer os valores das propriedades da combustão, caracteriza uma classe de modelos conhecida como modelos híbridos. A seção 2.4 aborda tais modelos adiante, mas antes uma revisão dos aspectos mais importantes do método LES em escoamentos turbulentos reativos é apresentada.

2.3. LES em Combustão Turbulenta

O método LES consiste na aplicação de filtros espaciais nas equações de transporte, de forma a separar as pequenas das grandes escalas do escoamento. Tal operação de filtragem resulta em equações que descrevem a evolução temporal e espacial das grandes escalas. Estas equações contêm termos abertos que representam a interação entre as grandes e pequenas escalas e precisam ser modelados (Libby e Williams, 1994). As escalas correspondentes a estes termos abertos são denominadas escalas sub-filtro (SGS – *Sub Grid Scale*) e seus modelos são chamados de modelos sub-filtro. A principal hipótese envolvida é que as estruturas sub-filtro são mais homogêneas, menos dependentes da geometria e menos críticas para a evolução do escoamento. Portanto, é possível modelá-las sem alterar as características das grandes escalas que contêm a maior quantidade de energia do escoamento.

Devido à resolução explícita de grande parte do espectro de energia turbulenta, o método LES é intrinsecamente transiente e tri-dimensional. Se, por

um lado, representa-se um avanço na simulação de maiores detalhes da interação entre a turbulência e a combustão quando comparado com os métodos RANS, por outro, sua aplicação requer um esforço computacional significativamente superior. O método requer a utilização de malhas computacionais muito mais finas que aquelas utilizadas em RANS, uma vez que usualmente os efeitos da filtragem e da discretização são combinados em um único processo, dispensando a filtragem explícita das equações de transporte (Sagaut, 2005). Neste caso, a largura de filtro é proporcional ao espaçamento local da malha.

Piomelli (1999) sugere que as etapas de filtragem, discretização e modelagem sub-filtro são críticas para o sucesso de uma Simulação de Grandes Escalas. Tendo em vista que os processos de filtragem e de geração de malha estão normalmente relacionados, é indispensável que o método LES permita o uso de malhas adaptáveis, principalmente nos casos de geometrias complexas. A coexistência de diversos tipos de escoamento, tais como camadas limites e recirculações, requer um espaçamento de malha variável espacialmente.

Cabe mencionar que as regiões próximas às paredes podem requerer cuidados específicos na modelagem LES. A anisotropia acentuada nestas regiões e a alta taxa de produção de energia cinética turbulenta devido às fortes tensões cisalhantes podem ocasionar uma inversão no sentido usual da cascata de energia turbulenta. Nesta situação, a transferência de energia pode acontecer no sentido das pequenas para grandes escalas. A maioria dos modelos sub-filtro desconsidera este efeito, além de normalmente superestimar os valores da difusão turbulenta nas regiões de parede. Funções de amortecimento podem ser aplicadas para atenuar este problema (Lesieur et al., 2005). Outro aspecto crítico é a interação entre a região próxima da parede e a região distante da parede. Alguns modelos foram propostos visando aumentar o acoplamento destas regiões, os quais foram testados somente no caso de problemas simples e unidimensionais, tais como escoamentos em canais sem separação e recolamento de camada limite (Piomelli e Balaras, 2002, Schimidt et al. 2003).

Atualmente, os tópicos mais importantes relacionados ao método LES, quando da sua aplicação a escoamentos turbulentos reativos, são a modelagem sub-filtro do transporte de quantidade de movimento e dos campos escalares, e a modelagem da taxa de reação química. Os modelos sub-filtro desempenham um papel fundamental, uma vez que são responsáveis pela dissipação da energia

contida nas pequenas escalas. Uma evolução destes modelos é fundamental para uma representação adequada das influências das pequenas escalas no escoamento. Além disto, o aperfeiçoamento destes modelos pode implicar em exigências menos restritivas de espaçamento de malha, trazendo benefícios como o aumento da rapidez computacional.

Paralelamente, o desenvolvimento dos modelos da taxa de reação química, ou modelos de combustão, também é imperativo. Na maioria das aplicações de interesse industrial a largura de filtro viável de ser utilizada é maior do que a espessura de uma chama laminar, a qual varia de 0,1 a 1,0 mm, aproximadamente (Veynante e Poinso, 1997). Portanto, na maioria dos casos, a frente de chama não pode ser resolvida explicitamente e seu cálculo deve ser integralmente dependente dos modelos de combustão. Este fato constitui a maior dificuldade de LES em combustão turbulenta.

2.3.1. Modelagem Sub-Filtro

A maioria dos modelos sub-filtro do transporte de quantidade de movimento e dos campos escalares baseia-se na hipótese de que a interação entre escalas resolvidas e não resolvidas do escoamento pode ser descrita por um balanço da transferência de energia entre elas. Esta transferência pode ocorrer tanto no sentido das grandes para pequenas escalas, como no sentido das pequenas para grandes escalas, processo este chamado de cascata retrógrada de energia. Em geral, os modelos existentes desprezam os efeitos da transferência de energia em cascata retrógrada pelo fato destes serem menos intensos e acontecerem com menos frequência do que os da cascata direta (Lesieur et. al., 2005).

Assumindo a predominância da cascata de energia no sentido das grandes para pequenas escalas, os efeitos da dissipação de energia são representados por novos termos adicionados às equações de transporte, de acordo com as seguintes hipóteses simplificadoras: (a) o mecanismo de transferência de energia é análogo aos mecanismos de difusão molecular, e pode ser representado pela hipótese de Boussinesq, com ajuda de uma viscosidade sub-filtro; (b) um único comprimento característico e uma única escala de tempo podem ser usados para descrever as escalas sub-filtro; (c) o espectro das grandes escalas é totalmente separado do das

pequenas (Sampaio, 2006). No âmbito destas hipóteses, os modelos mais utilizados são aqueles baseados nas escalas resolvidas. Ou seja, a viscosidade sub-filtro é calculada em função das propriedades filtradas.

O modelo mais conhecido que se fundamenta nas hipóteses mencionadas acima é o de Smagorinsky (1963). Este modelo fornece bons resultados quando aplicado na modelagem sub-filtro do transporte de quantidade de movimento e do campo escalar, na predominância de regimes homogêneos e tendências isotrópicas nas pequenas escalas. No caso da presença da combustão, que pode ocasionar regimes altamente anisotrópicos e apresentar um desequilíbrio energético, os resultados podem não ser tão satisfatórios (Poinsot e Veynante, 2005).

Nas regiões próximas às frentes de chama existe a possibilidade de haver transporte por difusão contra-gradiente dos escalares, devido a efeitos da variação da densidade que causam gradientes de pressão entre os gases frescos e gases queimados. Isto pode ser um fator complicador na modelagem do transporte turbulento dos campos escalares. No entanto, sua relevância em níveis de escala sub-filtro ainda precisa ser avaliada mais profundamente (Poinsot e Veynante, 2005).

Segundo Boger et al. (1998) é esperado que os efeitos do transporte contra-gradiente do escalar sejam menos importantes no método LES do que no RANS, uma vez que parte do campo escalar é resolvido explicitamente. Assim, alguns dos fenômenos do transporte contra-gradiente são inclusos nas escalas resolvidas. Boger e Veynante (2000) realizaram simulações de grandes escalas de um escoamento turbulento pré-misturado de propano e ar, onde uma chama foi estabilizada a jusante de um obstáculo triangular. Medições do termo modelado de transporte turbulento dos campos escalares foram feitas em diferentes distâncias a jusante do obstáculo. Foi verificado que, mesmo com o uso de um modelo sub-filtro do tipo transporte gradiente, o transporte contra-gradiente foi inteiramente reproduzido nas escalas resolvidas, utilizando-se um refino de malha adequado. Resultados como este fornecem suporte para o uso de um modelo de difusão do tipo gradiente para aplicações práticas, tendo em vista, também, que este tipo de modelo oferece uma maior simplicidade de implementação numérica.

2.3.2. Modelos de Combustão

Visando identificar e classificar as dificuldades do uso de LES na simulação da combustão turbulenta pré-misturada, Pitsch (2005, 2006) idealizou um diagrama de regimes de combustão turbulenta pré-misturada para LES, o qual relaciona a largura de filtragem com as escalas de comprimento de diferentes configurações de chamas turbulentas pré-misturadas. Este diagrama, mostrado na Figura 2.9, possibilita uma análise das implicações das mudanças da largura de filtragem usada em LES, em função dos números de Karlovitz típicos dos diferentes regimes de combustão turbulenta pré-misturada, ilustrados na Figura 2.7.

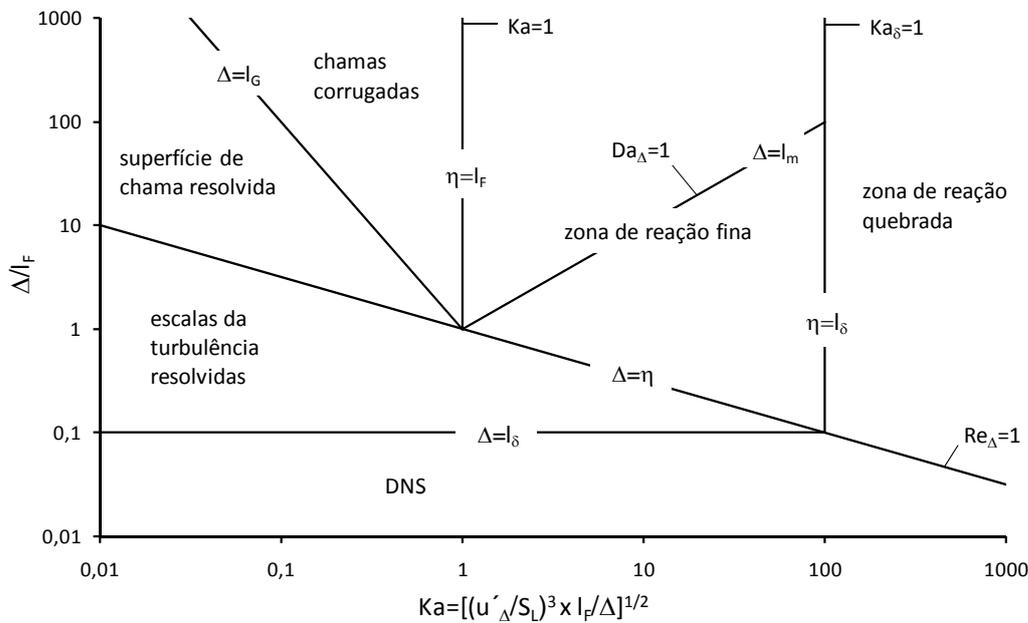


Figura 2.9 Diagrama de regimes de combustão turbulenta pré-misturada para LES, baseado nas escalas características típicas de tempo e comprimento da combustão e nas escalas de filtragem de LES (Pitsch, 2006).

Os números adimensionais, relevantes neste diagrama, são o número de Reynolds sub-filtro, Re_{Δ} , o número de Damköhler sub-filtro, Da_{Δ} , e o número de Karlovitz, Ka , os quais podem ser escritos, respectivamente,

$$Re_{\Delta} = \frac{u'_{\Delta} \Delta}{S_L l_F}, \tag{2-3}$$

$$Da_{\Delta} = \frac{S_L \Delta}{u'_{\Delta} l_F}, \quad (2-4)$$

$$Ka = \frac{l_F^2}{\eta^2} = \left(\frac{u'_{\Delta} l_F}{S_L^3 \Delta} \right), \quad (2-5)$$

onde u'_{Δ} é a flutuação de velocidade sub-filtro, Δ é a largura de filtragem, S_L é a velocidade de chama laminar, l_F é a espessura de chama laminar e η é a escala de comprimento de Kolmogorov. A abscissa expressa o número de Karlovitz, Ka , e a ordenada expressa a razão entre a largura característica de filtragem e a espessura da chama laminar, Δ/l_F .

Nota-se que, para qualquer número de Karlovitz, Ka , e para relação Δ/l_F igual ou menor do que 0,1, a largura de filtragem é proporcional à espessura da camada interna da chama laminar, l_{δ} , de modo que, tanto as escalas características de turbulência, quanto às características da combustão, podem ser resolvidas explicitamente, caracterizando assim uma DNS.

A linha $Re_{\Delta} = 1$ expressa que a largura de filtragem, Δ , é equivalente à escala de comprimento de Kolmogorov, η . Abaixo desta linha, no intervalo do número de Karlovitz, $0,01 < Ka < 100$, a largura de filtragem é suficientemente fina para resolver as menores escalas da turbulência.

O regime de chamas corrugadas é caracterizado por chamas extremamente finas, as quais são dobradas e corrugadas pela ação da turbulência, e pelo número de Karlovitz menor ou igual a unidade. Neste regime, quando a largura de filtro é menor do que a escala de Gibson, l_G , a qual é definida como a menor escala do dobramento da frente de chama, e maior do que a escala de Kolmogorov, η , o dobramento da superfície de chama pode ser resolvido. Porém, percebe-se que, apesar do dobramento da chama poder ser representado nas escalas resolvidas, a espessura de chama é menor do que a largura de filtragem.

O regime de zona de reação fina é caracterizado por chamas espessas e pelos números de Karlovitz, $Ka > 1$ e $Ka_{\delta} < 1$. Neste regime, a espessura de chama característica das chamas espessas, l_m , é estimada com base na hipótese de que a escala de tempo do transporte turbulento na camada de pré-aquecimento das chamas é igual à escala de tempo das reações químicas (Peters, 1999). Com esta hipótese, a razão entre a espessura l_m e a espessura de filtragem Δ é estimada por,

$$\frac{l_m}{\Delta} = \left(\frac{u'_\Delta l_F}{S_L \Delta} \right)^{3/2} = Ka \frac{l_F}{\Delta} = Da_\Delta^{-3/2} . \quad (2-6)$$

Desta forma, é possível notar que as chamas se encontram inteiramente nas escalas sub-filtro para $Da_\Delta > 1$, e estão parcialmente nas escalas sub-filtro para $Da_\Delta < 1$.

O regime de zona de reação quebrada é identificado por chamas distribuídas e pelo número de Karlovitz, $Ka_\delta > 1$. Neste regime, as chamas podem ser resolvidas explicitamente mediante a aplicação de uma largura de filtragem adequada, viável de ser utilizada na prática. No entanto, as aplicações industriais de chamas distribuídas são escassas, visto que a mistura turbulenta é mais rápida do que as reações químicas, o que pode levar a extinção local da combustão.

A maioria das aplicações industriais da combustão turbulenta pré-misturada se encontra nos regimes de chamas corrugadas e de chamas espessas, nos quais a influência da turbulência promove uma maior velocidade de propagação das chamas e uma maior taxa de liberação de calor. Como mostrado no diagrama da Figura 2.9, nestes regimes a largura de filtro viável de ser utilizada é, na maioria dos casos práticos, maior do que a escala de Kolmogorov, η , e maior do que a espessura da camada interna das chamas, l_δ . Isto implica que, na maioria dos casos, as chamas se encontram inteiramente nas escalas sub-filtro (Pope,1990). Convém mencionar que filtros explícitos podem ser utilizados para resolver esta questão, no entanto, eles devem ser mais refinados do que os filtros implícitos tipicamente utilizados, em uma ordem de grandeza, o que inviabiliza qualquer aplicação destes tipos de filtros em casos de interesse industrial (Pitsch, 2006).

O fato das chamas se encontrarem integralmente em escalas sub-filtro é o grande complicador da utilização de LES em combustão turbulenta, quando da determinação das contribuições das reações químicas na dinâmica do escoamento turbulento. Além disto, a complexidade se estende ao ponto de vista numérico, uma vez que os fortes gradientes do campo escalar, por exemplo, da temperatura ou da fração mássica de espécies químicas, existentes entre os gases frescos e os gases queimados, podem ocorrer em um único volume de controle computacional, o que tende a produzir fortes instabilidades numéricas. Objetivando resolver estas questões, parte dos estudos realizados de modelagem da combustão turbulenta tem abordado o desenvolvimento dos modelos de combustão.

Neste sentido, diferentes abordagens foram propostas nos últimos 20 anos, sendo que as mais relevantes entre elas são: (a) Modelos das chamas artificialmente espessas (*Artificially Thickened Flames models*), (b) Modelos baseados na Equação G (*G-Equation models*), (c) Modelos de densidade de superfície de chama (*Flame Surface Density models*) e (d) Modelos baseados em função densidade de probabilidade (*Probability Density Function models*).

Dentre estas abordagens, as três primeiras se incluem na classe de modelos que adota a hipótese de cinética química rápida (*Infinitely Fast Chemistry*). Tais modelos são aplicáveis para o regime de chamas corrugadas, para números de Karlovitz, Ka , menores do que a unidade, e nos casos em que a escala de tempo característica das reações químicas é muito menor do que a escala de tempo do movimento turbulento, ou seja, quando o número de Damköhler, Da , é muito alto. Nesta situação, a frente de chama é vista como uma superfície extremamente fina, a qual é constantemente dobrada e corrugada pelos efeitos da turbulência. Esta superfície separa os reagentes (gases frescos) dos produtos da combustão (gases queimados).

Segundo Mura et al. (2003), a quarta abordagem, em particular aquela baseada em PDF transportada, permite a modelagem tanto dos casos de química rápida, quanto dos casos de taxa de reação química finita (*Finite Rate Chemistry*). Nestes últimos, a ordem de grandeza das escalas de tempo das reações químicas é equivalente às das escalas de tempo do movimento turbulento, ou seja, o número de Damköhler, Da , apresenta valores próximos da unidade. Nesta situação, a frente de chama pode ser caracterizada por chamas espessas. Por estes motivos, esta pode ser considerada uma abordagem mais abrangente.

O modelo das chamas artificialmente espessas foi originalmente aplicado a LES por Veynante e Poinot (1997) e Thibaut e Candel (1998). Este modelo considera que uma frente de chama é composta por uma coleção de chamas laminares dobradas. A frente de chama deve possuir uma espessura no mínimo igual a largura de filtragem de LES. De acordo com a teoria de chamas laminares pré-misturadas (Kuo, 2005), a velocidade de chama laminar, S_L , e a espessura de chama laminar, δ_L , podem ser escritas como,

$$S_L \propto \sqrt{\alpha_T \dot{\Omega}} \quad \text{e} \quad \delta_L \propto \alpha_T / S_L, \quad (2-7)$$

onde $\dot{\Omega}$ é a taxa de reação total e α_T o coeficiente de difusividade térmica.

As difusividades térmicas e mássicas das espécies químicas são modificadas para simular um aumento de espessura da chama, de forma que esta possa ser resolvida explicitamente. Isto é feito multiplicando-se a difusividade por um fator Y e dividindo-se a taxa de reação química pelo mesmo fator. O resultado é uma chama com espessura $Y\delta_L$ que se propaga localmente a velocidade S_L .

Esta abordagem é eficiente para escoamentos em que a interação entre chama e turbulência é governada por grandes estruturas turbulentas. No entanto, há diversas restrições da sua extensão aos casos em que a influência das pequenas estruturas turbulentas é importante, a começar pela hipótese de que a frente de chama constitui uma entidade laminar na escala sub-filtro. Sabe-se que pequenos vórtices podem causar dobramento da chama em níveis sub-filtro, ocasionando um aumento da velocidade de propagação da chama que não é levado em consideração pelo modelo. O aumento da espessura da chama também diminui a sensibilidade do modelo em termos de velocidade resolvida. Veynante e Poinso (1997) observaram que as pequenas estruturas turbulentas não contribuíram expressivamente no processo de dobramento das chamas nas escalas resolvidas.

O método da Equação G é baseado na formulação introduzida por Williams (1985). Ao contrário da abordagem de frente de chamas espessas artificialmente, esta formulação assume que a espessura da chama laminar que divide os gases frescos dos gases queimados é igual a zero. Desta maneira, a frente de chama é descrita como uma superfície de propagação definida pela variável G , a qual representa uma iso-superfície que evolui na escala sub-filtro de acordo com uma velocidade de propagação local. A equação de G pode ser escrita como,

$$\frac{\partial G}{\partial t} + \mathbf{u}\nabla G = \varpi|\nabla G|, \quad (2-8)$$

onde o nível de superfície $G \equiv G_0$ representa a superfície da frente de chama e ϖ é a velocidade de propagação local da chama.

Kim et al. (1999) utilizaram a equação G na sua forma de lei de conservação para simulação de escoamentos turbulentos reativos em uma turbina a gás. Após a filtragem de LES, eles obtiveram a equação,

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{G}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}} \tilde{G}) + \nabla \cdot [\bar{\rho} (\tilde{\mathbf{u}} \tilde{G} - \tilde{\mathbf{u}} \tilde{G})] = \overline{\rho \omega |\nabla G|}, \quad (2-9)$$

onde o terceiro termo do lado esquerdo representa a contribuição da escala sub-filtro no transporte da variável G , o qual precisa ser modelado. Um modelo do tipo transporte por difusão gradiente foi adotado,

$$\bar{\rho} (\tilde{\mathbf{u}} \tilde{G} - \tilde{\mathbf{u}} \tilde{G}) = - \frac{\nu_{SGS}}{Sc_{SGS}} \nabla \tilde{G}, \quad (2-10)$$

onde ν_{SGS} é a viscosidade cinemática sub-filtro e Sc_{SGS} é o número de Schmidt sub-filtro. O lado direito da equação foi modelado por,

$$\overline{\rho \omega |\nabla G|} = \rho S_T \nabla \tilde{G}, \quad (2-11)$$

onde S_T pode ser calculada através de,

$$\frac{S_T}{S_L} = \left(1 + A_G \frac{u'^2}{S_L^2} \right)^{1/2}. \quad (2-12)$$

A vantagem desta abordagem está na sua capacidade de representar a distribuição espacial da liberação de calor, tendo em vista que a velocidade da chama turbulenta é explicitamente incluída na formulação. Por outro lado, a estimativa desta velocidade de chama turbulenta deve ser feita corretamente para que o modelo produza bons resultados (Hawkes, 2000). Como foi visto anteriormente, a velocidade de chama turbulenta não é uma propriedade bem definida do escoamento e não há uma formulação universal disponível.

A abordagem da equação G utilizada por Kim et al. (1999) tem muito em comum com os modelos de superfície de chama, nos quais uma equação para variável de progresso c , que representa o progresso de uma reação química irreversível de passo único, é utilizada na mesma forma da Eq. (2-9). Além disto, ambos os métodos sugerem fechamento análogo para o lado direito desta equação. Enquanto a abordagem da equação G faz uso de uma velocidade de chama turbulenta, por meio de um fator de dobramento, A_G , que multiplica a velocidade de chama laminar, a abordagem de densidade de superfície de chama multiplica a velocidade de chama laminar por um fator relacionado à área da superfície de chama por unidade de volume na escala sub-filtro (Cant e Hawkes, 2001).

O método de densidade de superfície de chama faz uso da equação de transporte filtrada de uma variável de progresso c ,

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{c}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}} \tilde{c}) = \overline{\nabla \cdot (\rho D \nabla c)} + \bar{S} - \nabla \cdot \mathbf{Q}, \quad (2-13)$$

onde \bar{S} é o termo de taxa de reação química média e \mathbf{Q} descreve o transporte turbulento da variável de progresso,

$$\mathbf{Q} = \bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}} \tilde{c} - \bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}} \tilde{c}. \quad (2-14)$$

O transporte turbulento da variável de progresso é modelado pela hipótese de transporte por difusão gradiente, analogamente ao método da equação G . O termo de taxa de reação química média e difusão molecular são modelados em conjunto de acordo com,

$$\bar{S} + \overline{\nabla \cdot (\rho D \nabla c)} = \bar{\rho} \bar{\omega} |\nabla c| \approx (\bar{\rho} \bar{\omega}) \Sigma_{SGS}, \quad (2-15)$$

onde $\bar{\omega}$ é a velocidade de propagação local e Σ_{SGS} é a área de superfície de chama por unidade de volume na escala sub-filtro. Em aplicações práticas, o termo $(\bar{\rho} \bar{\omega})$ pode ser aproximado para $\rho^u S_L$, onde ρ^u é a densidade nos gases frescos e S_L é a velocidade de chama laminar. O termo de densidade de superfície de chama, Σ_{SGS} , pode ser determinado mediante diferentes modelos propostos na literatura. O mais simples deles é o modelo algébrico proposto por Boger et al. (1998),

$$\Sigma_{SGS} \approx K_{\Sigma} \frac{\tilde{c}(1 - \tilde{c})}{\Delta}, \quad (2-16)$$

onde K_{Σ} é uma constante, cujo valor é $4\sqrt{6/\pi}$, e Δ é a largura de filtro.

Os modelos baseados em função densidade de probabilidade (PDF) se diferenciam conceitualmente das abordagens fenomenológicas para cálculo da taxa de reação química revisadas até aqui. Enquanto estas últimas se baseiam nos conceitos da dinâmica e das propriedades físicas das chamas, se restringindo a aplicações no contexto do regime de elementos de chama laminares, os modelos PDF são fundamentados em análises estatísticas do tipo uni-ponto do escoamento. Nos modelos da PDF transportada, os principais processos físicos envolvidos em uma frente de chama, tais como a difusão molecular, a micro-mistura turbulenta e a expansão térmica das reações químicas, os quais geralmente ocorrem em escalas

de comprimento sub-filtro, são abordados de maneira estatística. Este tipo de abordagem proporciona uma maior generalidade de aplicação. A princípio, estes modelos são aplicáveis para regimes de escoamento a qualquer número de Damköhler (Mura et al., 2003).

Cabe mencionar, também, que um dos maiores atrativos na formulação dos modelos da PDF transportada consiste no fato de que as médias e momentos de alta ordem do termo de reação química podem ser calculados sem a necessidade de modelagem (Colucci et al., 1998). Desta maneira, os efeitos da taxa de reação química podem ser representados explicitamente, contornando uma das maiores dificuldades da aplicação de LES em escoamentos reativos.

No contexto LES, estes modelos também são conhecidos como modelos de Função Densidade Probabilidade Filtrada (FDF - *Filtered Density Function*), pelo fato de fornecerem as estatísticas dos campos filtrados do escoamento. Colucci et al. (1998) derivaram a equação de transporte da FDF do campo escalar, para uma situação idealizada de densidade constante,

$$\frac{\partial F_L}{\partial t} + \nabla \cdot (\tilde{\mathbf{u}} F_L) + \nabla \cdot (\widetilde{\mathbf{u}'|\psi} F_L) = - \frac{\partial}{\partial \psi} \left[\left(\frac{1}{\bar{\rho}} \nabla \cdot \rho D \nabla \phi | \psi + S(\psi) \right) F_L \right], \quad (2-17)$$

onde F_L é a FDF, $\tilde{\mathbf{u}}$ é o campo de velocidade filtrado, $\widetilde{\mathbf{u}'|\psi}$ é o campo de flutuações de velocidade sub-filtro condicionado ao campo escalar, $\overline{\nabla \cdot \rho D \nabla \phi | \psi}$ é o termo de micro-mistura condicionado ao campo escalar e $S(\psi)$ é o termo fonte de reação química.

O termo de reação química aparece de forma fechada e não requer modelagem. Entretanto, o termo de flutuações de velocidade sub-filtro condicionado ao campo escalar necessita ser modelado, o que é usualmente feito usando-se a hipótese de transporte por difusão gradiente,

$$\nabla \cdot (\widetilde{\mathbf{u}'|\psi} F_L) = \nabla \cdot (\Gamma_{SGS} \nabla F_L). \quad (2-18)$$

onde Γ_{SGS} é o coeficiente de difusão molecular sub-malha.

O termo de micro-mistura condicionado ao campo escalar aparece de forma aberta e também precisa ser modelado. Ele pode ser decomposto em um termo de difusão molecular e um termo de taxa de dissipação do escalar nas escalas sub-filtro (Fox, 2003). O primeiro é modelado via transporte por difusão gradiente e o

segundo pode ser fechado por um modelo de micro-mistura, sendo o IEM (*Interaction by Exchange with the Mean*) um dos mais utilizados (Villermaux e Falk, 1994). Desta forma, pode-se escrever,

$$\overline{\nabla \cdot \rho D \nabla \phi | \psi} F_L = \nabla \cdot (\bar{\rho} \Gamma \nabla F_L / \bar{\rho}) - \Omega_m (\psi - \tilde{\phi}) F_L, \quad (2-19)$$

onde Γ é um coeficiente de difusão molecular, Ω_m é a frequência da mistura em escala sub-filtro e $\tilde{\phi}$ é o valor médio do escalar no espaço amostral ψ .

Um dos principais aspectos desta formulação é sua alta dimensionalidade, visto o grande número de variáveis independentes envolvidas na modelagem da combustão. Em função disto, o uso de métodos numéricos baseados em diferenças finitas ou volumes finitos se torna impraticável (Raman e Pitsch, 2005), sendo que métodos estocásticos baseados em simulação de Monte Carlo são normalmente usados. Tais métodos fazem uso de uma grande amostra de partículas estocásticas distribuídas no domínio de cálculo, cujas propriedades evoluem de acordo com equações diferenciais estocásticas equivalentes à equação de transporte da FDF conjunta dos campos escalares. Segundo Colucci et al. (1998), o sistema de equações estocásticas equivalentes pode ser escrito como,

$$d\mathbf{x} = \left[\tilde{\mathbf{u}} \frac{1}{\bar{\rho}} \nabla \bar{\rho} (\Gamma + \Gamma_{SGS}) \right] dt + \sqrt{2(\Gamma + \Gamma_{SGS})} d\mathbf{W}, \quad (2-20)$$

$$d\psi = -\Omega_m (\psi - \tilde{\phi}) dt + S(\psi) dt. \quad (2-21)$$

A Eq. (2-20) descreve o transporte da FDF no espaço físico por convecção e difusão, onde \mathbf{x} é a posição da partícula, Γ é um coeficiente de difusão, ρ é a densidade, $\tilde{\mathbf{u}}$ é o campo de velocidade resolvida e $d\mathbf{W}$ é o incremento do processo de Wiener, caracterizado por um processo Gaussiano com média zero e variância igual ao passo de tempo dt (Gardiner, 1990). A Eq. (2-21) descreve o transporte da FDF no espaço amostral do campo escalar devido à mistura turbulenta e reação química, onde $\tilde{\phi}$ é o valor do escalar médio, Ω_m é uma constante que representa a frequência da mistura em escala sub-filtro e $S(\psi)$ é o termo fonte de reação química. A resolução adequada deste sistema de equações fornece resultados estatísticos equivalentes aos da equação de transporte da FDF euleriana (Eq. 2-17).

Observa-se que as Eqs. (2-20) e (2-21) requerem informações de velocidade e escalas de tempo da turbulência. Estas informações são obtidas projetando-se os campos do escoamento, resolvidos por LES em uma malha euleriana, para a localização das partículas estocásticas. Desta maneira, as partículas estocásticas podem evoluir no espaço físico e de campo escalar. Por meio de técnicas de simulação de Monte Carlo, as propriedades estatísticas atualizadas dos campos escalares e as estatísticas do termo de taxa de reação química são fornecidas para malha euleriana, as quais são usadas por LES para a determinação do campo de escoamento.

Este acoplamento entre os métodos baseados em malhas eulerianas (RANS ou LES) com métodos baseados em partículas estocásticas (PDF ou FDF) caracteriza uma classe de modelagem conhecida como híbrida.

2.4. Modelagem Híbrida

A modelagem híbrida é caracterizada pelo acoplamento de métodos que resolvem o campo de escoamento em malhas eulerianas com métodos que resolvem as propriedades da combustão via partículas estocásticas. Em geral, o campo de escoamento é resolvido numericamente por técnicas como diferenças finitas ou volumes finitos, enquanto as propriedades relacionadas à combustão são avaliadas via métodos de simulação de Monte Carlo.

Dois aspectos essenciais neste tipo de modelagem podem ser citados. O primeiro é relacionado aos erros numéricos relativos às técnicas euleriana e estocástica. Peirano et al. (2006) sugerem que tais erros estejam relacionados a três fatores principais: (a) discretização espacial, representada por um típico espaçamento de malha, Δx , (b) discretização temporal, determinada pelo passo de tempo, Δt , e (c) número finito de partículas presentes no domínio computacional. Os itens (a) e (b) são considerados erros determinísticos. Estudos detalhados destes tipos de erros podem ser encontrados em Meyers et al. (2007) e Mahesh e Park (2007). O item (c) é o erro estatístico relacionado ao método de Monte Carlo.

Uma vez que, nos modelos híbridos, os efeitos da combustão são exclusivamente avaliados pelas propriedades das partículas estocásticas mediante o uso do método de Monte Carlo, torna-se fundamental que as origens dos erros

estatísticos sejam conhecidas. Para ilustrar a natureza de tais erros, Xu e Pope (1999) consideraram uma média amostral simples,

$$\{Q\}_N = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N Q(U^{(n)}, \xi^{(n)}, \theta^{(n)}), \quad (2-22)$$

onde $U^{(n)}$, $\xi^{(n)}$, e $\theta^{(n)}$ são as propriedades das n -ésimas partículas e N é o número total de partículas. Para uma distribuição de partículas independentes, $\{Q\}_N$ é uma estimativa do valor esperado $\langle Q \rangle$. No entanto, para um número finito de partículas, $\{Q\}_N$ é uma variável aleatória e contém flutuações estatísticas conhecidas como erros estatísticos. Tais erros são medidos pelo rms (*root mean square*) de $\{Q\}_N$ e tendem a zero com $N^{-1/2}$. Uma estimativa do erro estatístico pode ser fornecida por,

$$\Sigma_Q = \{Q\}_{N_p, N, \Delta t} - \langle \{Q\}_{N_p, N, \Delta t} \rangle, \quad (2-23)$$

onde N_p é o número total de partículas em cada volume computacional, N é o número total de partículas no domínio de cálculo e Δt é o passo de tempo da simulação. No caso dos modelos híbridos, é esperado que o erro estatístico seja proporcional a $N_p^{-1/2}$. Na prática, a amostra de partículas empregada deve ser suficientemente grande para que as equações diferenciais estocásticas convirjam assintoticamente em termos de distribuição estatística para as equações de transporte equivalentes da PDF euleriana (Pope, 1994a).

O segundo aspecto essencial na modelagem híbrida envolve a troca de informações entre a malha euleriana e as partículas estocásticas ao longo de suas interações no processo da resolução numérica. De forma esquemática, a interação entre malha e partícula pode ser representada por quatro operações sequenciais, $F \rightarrow P \rightarrow T \rightarrow A$ (Peirano et al., 2006), onde:

- (a) Operação F : corresponde à resolução do campo de escoamento pelos métodos eulerianos, tais como diferenças finitas ou volumes finitos,
- (b) Operação P : corresponde à projeção dos momentos estatísticos das propriedades do campo do escoamento para as partículas estocásticas,
- (c) Operação T : corresponde à evolução das propriedades das partículas por meio da resolução do sistema de equações diferenciais estocásticas,

(d) Operação A : corresponde à projeção dos momentos estatísticos das propriedades das partículas de volta para a malha euleriana.

Neste contexto, a operação P é executada de modo que as partículas estocásticas presentes em um mesmo volume computacional recebam valores idênticos às das propriedades do escoamento armazenadas no centro deste volume. Na operação A , os momentos estatísticos de primeira e segunda ordem podem ser calculados, respectivamente, por,

$$\langle Q^{[i]} \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} Q(\mathbf{x}) \tilde{\omega}(\mathbf{x} - \mathbf{x}^{[i]}) d\mathbf{x}, \quad (2-24)$$

$$(\sigma_Q^2)^{[i]} = \int_{-\infty}^{+\infty} (Q^{(n)} - \langle Q \rangle)^2 \tilde{\omega}(\mathbf{x} - \mathbf{x}^{[i]}) d\mathbf{x}, \quad (2-25)$$

onde Q é a propriedade a ser calculada, $[i]$ indica o centro do volume computacional, \mathbf{x} é a coordenada espacial e $\tilde{\omega}$ é uma função peso.

Os dois métodos mais utilizados nesta operação se diferenciam no tipo de funções peso empregadas. O método NGP (*Nearest-Grid-Point*) associa as propriedades das partículas ao centro do volume computacional por uma função peso constante do tipo *top hat*. Por exemplo, $\tilde{\omega}(\mathbf{x} - \mathbf{x}^{[i]})$ é igual a $1/N_p$ para a partícula n dentro do volume i e igual a zero para partículas fora do volume i , onde N_p é o número de partículas dentro do volume computacional i . O método CIC (*cloud-in-cell*) adota pesos diferentes para partículas em função de sua distância em relação ao centro do volume computacional i . Neste método, partículas localizadas em volumes computacionais vizinhos também podem ser consideradas no cálculo dos momentos estatísticos associados ao centro do volume computacional i . A Figura 2.10 ilustra os dois tipos de função peso, usualmente empregadas nos métodos NGP e CIC.

Peirano et al. (2006) fizeram um estudo comparativo entre os métodos NGP e CIC empregados em malhas estruturadas para diferentes números de partículas distribuídas por volume computacional. Os resultados obtidos mostram que o método CIC não apresenta vantagens, em termos de precisão estatística, sobre o método NGP para os processos estocásticos testados. Ao contrário, no caso em que os efeitos de convecção não foram levados em consideração, o método NGP se demonstra mais preciso.

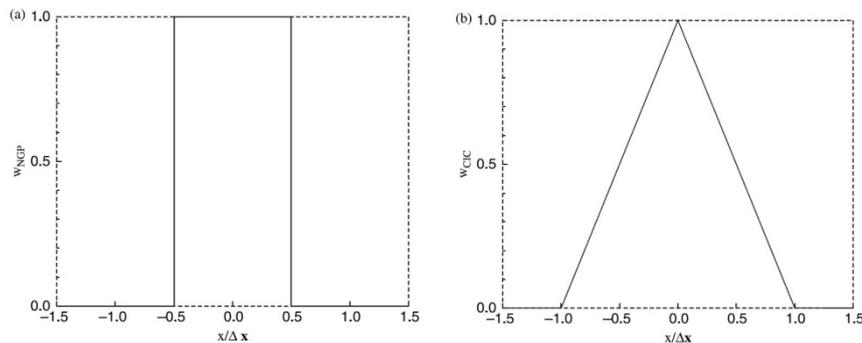


Figura 2.10 Exemplos de funções peso de diferente ordens. Lado esquerdo: função top hat utilizada no método NGP. Lado direito: função linear utilizada no método CIC (Peirano et al., 2006).

A literatura mostra que os primeiros modelos híbridos foram propostos no contexto RANS/PDF. Correa e Pope (1992) utilizaram a formulação da PDF dos campos escalares e desenvolveram um código computacional para simulação de chamas turbulentas não pré-misturadas. Nooren et al. (1996) utilizaram o mesmo código para avaliar diferentes modelos de mistura e comparar as estatísticas dos campos de velocidade, fração de mistura e temperatura com resultados experimentais de chamas de gás natural de um queimador do tipo Delft. Muradoglu et al (1999) propuseram um modelo híbrido para a PDF das flutuações de velocidade, frequência turbulenta e campos escalares para solução de escoamentos turbulentos reativos estacionários. Pope et al. (2003) estenderam este modelo a aplicações de chamas não pré-misturadas estabilizadas por um corpo rombudo. O foco do trabalho foi determinar os campos médios resultantes da interação entre turbulência e reação química. Raman et al. (2004) desenvolveram um modelo híbrido para simular escoamentos turbulentos reativos parcialmente pré-misturados com cinética química detalhada. Os resultados numéricos dos momentos estatísticos das propriedades da combustão apresentaram grande concordância com dados experimentais de uma chama do tipo Sandia D.

No contexto de LES, os modelos híbridos são recentes e representam o estado da arte na modelagem da combustão turbulenta. Tong e Wang (2005) utilizaram a formulação da FDF conjunta de velocidade e campos escalares para avaliar a precisão da modelagem da mistura turbulenta e do campo escalar sub-filtro por meio de comparações com dados experimentais obtidos na região de escoamento completamente desenvolvido de um jato axi-simétrico. O estudo

demonstrou que a mistura turbulenta foi modelada com boa precisão. Raman et al. (2005) apresentaram a formulação de um modelo híbrido LES-FDF para escoamentos com variação de densidade a baixo número de Mach. O caso de chamas não pré-misturadas estabilizadas por um corpo rombudo foi simulado. Esta configuração forneceu um campo turbulento no escoamento que interagiu corretamente com os mecanismos da combustão. O modelo foi capaz de simular os campos médios e flutuantes de velocidade e fração de mistura com grande precisão. Bisetti e Chen (2005) fizeram uso de resultados experimentais obtidos de uma chama Sandia D para avaliar a consistência entre as abordagens lagrangeana e euleriana do método PDF acoplado a LES. Estes autores apresentaram uma revisão das vantagens e desvantagens das duas abordagens e demonstraram que, na prática, a abordagem lagrangeana se mostra mais simples, tendo em vista que as dificuldades para implementação numérica da abordagem euleriana ainda persistem. James et al. (2007) desenvolveram um modelo híbrido LES-FDF conjunta dos campos escalares para simular chamas do tipo Sandia/Sydney e Sandia/Darmstadt. Estes autores concluíram que o campo de densidade resultante da formulação FDF pode ser uma fonte de instabilidade numérica e sugeriram duas técnicas para contornar este problema, as quais são baseadas em equações de transporte da entalpia sensível no referencial euleriano. As discrepâncias nas comparações dos resultados numéricos com experimentais, constatadas para o caso da chama Sandia/Sydney, foram atribuídas ao modelo de cinética química simplificada e aos modelos de mistura empregados. Raman e Pitsch (2007) avaliaram um novo algoritmo LES-FDF capaz de simular a combustão turbulenta parcialmente pré-misturada com inclusão de cinética química detalhada. Resultados experimentais de chamas Sandia D e E foram empregados nas comparações com os resultados numéricos, em termos de propriedades médias e flutuantes. Uma boa concordância com a evolução radial do campo de velocidade e campo escalar foi constatada, incluindo-se, também, a boa previsão de extinção local e re-ignição das chamas.

Cabe observar que não foram encontrados na literatura estudos envolvendo a modelagem híbrida no contexto LES/PDF aplicados a combustão turbulenta pré-misturada.