

3

Modelagem da Combustão Turbulenta Pré-Misturada

Neste trabalho, a modelagem da combustão turbulenta pré-misturada é abordada mediante a utilização de equações diferenciais parciais e de equações diferenciais estocásticas que descrevem a evolução temporal e espacial das propriedades do escoamento turbulento e da combustão. Uma metodologia de modelagem híbrida é desenvolvida, a qual envolve o acoplamento dos métodos de Simulação de Grandes Escalas (LES) e da Função Densidade de Probabilidade transportada (PDF). O método LES é empregado na resolução das propriedades filtradas do campo do escoamento no referencial euleriano. O método da PDF transportada determina a estatística dos campos escalares e das reações químicas, utilizando-se de partículas lagrangeanas que evoluem no escoamento de acordo com equações diferenciais estocásticas.

No presente capítulo, os conceitos teóricos e as formulações matemáticas correspondentes a ambos os métodos são apresentados. Inicialmente, as equações de transporte governantes do problema da combustão turbulenta pré-misturada são descritas. O processo de filtragem destas equações de transporte é ilustrado, assim como a modelagem dos termos sub-filtro resultantes deste processo, isto é, dos tensores de Reynolds e fluxos escalares. Em seguida, as estratégias utilizadas na modelagem do termo de taxa de reação química são mostradas em detalhes.

A segunda parte do capítulo descreve os principais aspectos do método da PDF empregado. A equação de transporte da PDF do campo escalar no referencial euleriano é apresentada em detalhe e uma abordagem equivalente é descrita em termos de equações diferenciais estocásticas. Na última seção, o acoplamento da modelagem híbrida LES-PDF é apresentado de maneira esquemática.

3.1. Equações Governantes

O ponto de partida para qualquer simulação computacional da combustão turbulenta é a definição das variáveis envolvidas no problema e a descrição das leis matemáticas que governam o movimento e a termodinâmica dos fluidos. O estado de uma mistura gasosa composta por K espécies pode ser completamente descrito pelas frações mássicas $Y_k(\mathbf{x}, t)$ das K espécies químicas ($k = 1, \dots, K$), pela entalpia específica $h(\mathbf{x}, t)$, pressão $p(\mathbf{x}, t)$ e os componentes da velocidade $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$. A densidade pode ser escrita como função das frações mássicas Y_k , da entalpia h e da pressão p , mediante a utilização de uma equação de estado,

$$\rho = \rho(Y_k, h, p) . \quad (3-1)$$

Neste trabalho, a evolução do escoamento reativo é descrita pelas equações de transporte de massa, de quantidade de movimento linear, das espécies químicas e de energia, a qual é escrita sob a forma da entalpia específica. Em notação indicial de Einstein, com i e $j = 1, 2, 3$ e $k = 1, \dots, K$, escrevem-se,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i}{\partial x_i} = 0 , \quad (3-2)$$

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j u_i}{\partial x_j} = - \frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} + F_i , \quad (3-3)$$

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j Y_k}{\partial x_j} = - \frac{\partial J_{kj}}{\partial x_j} + S_k , \quad (3-4)$$

$$\frac{\partial \rho h}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j h}{\partial x_j} = - \frac{\partial J_{hj}}{\partial x_j} + S_h , \quad (3-5)$$

onde, τ_{ij} é o tensor das tensões viscosas, F_i é a força de corpo por unidade de volume, J_{kj} é o fluxo molecular difusivo da espécie química k na direção j , S_k é a taxa de reação química da k -ésima espécie por unidade de volume, J_{hj} é o fluxo molecular difusivo de energia na direção j e S_h é o termo fonte de entalpia por unidade de volume. O termo fonte de taxa de reação química S_k é função das frações mássicas Y_k , da entalpia específica h e da pressão p e o termo fonte de entalpia S_h representa os efeitos de compressibilidade e dissipação viscosa.

Assumindo a hipótese de fluido Newtoniano, o tensor das tensões viscosas é dado por,

$$\tau_{ij} = \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \mu \delta_{ij} \left(\frac{\partial u_k}{\partial x_k} \right), \quad (3-6)$$

onde μ é a viscosidade, que depende das propriedades dos fluidos, e δ_{ij} é o delta de Kronecker.

Neste trabalho, o fluxo de difusão molecular das espécies é baseado na hipótese de transporte difusivo do tipo gradiente e pode ser descrito mediante a utilização da lei de Fick,

$$J_{kj} = - \frac{\mu}{Sc_k} \frac{\partial Y_k}{\partial x_j}, \quad (3-7)$$

onde os índices repetidos não indicam somatória. Nota-se que foram desprezados os efeitos de barodifusão, de termodifusão (efeito Soret) e de difusão por efeito diferenciado de força de corpo. Nesta equação, Sc_k é o número de Schmidt da espécie k , o qual descreve a razão da difusividade da quantidade de movimento pela difusividade de massa da espécie química k , e pode ser escrito como,

$$Sc_k = \frac{\mu}{\rho \Gamma_k}, \quad (3-8)$$

onde Γ_k representa a difusividade molecular da espécie química k .

Substituindo-se a Eq. (3.8) na Eq. (3.7), o fluxo molecular difusivo da espécie química k na direção j é dado por,

$$J_{kj} = -\rho \Gamma_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_j}. \quad (3-9)$$

O fluxo molecular difusivo da entalpia pode ser descrito pela lei de Fourier estendida,

$$J_{hj} = - \frac{\mu}{Pr} \left[\frac{\partial h}{\partial x_j} + \sum_{k=1}^K \left(\frac{Pr}{Sc_k} - 1 \right) h_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_j} \right] \quad (3-10)$$

onde o primeiro termo do lado direito é o fluxo de entalpia por difusão molecular e o segundo termo representa o fluxo de entalpia devido a diferentes velocidades de difusão de cada espécie química. O termo h_k representa a entalpia específica

associada à espécie química k . Nota-se que, nesta equação, o fluxo de calor por radiação e o efeito Dufour, isto é, a difusão da entalpia devido ao gradiente das frações mássicas das espécies químicas, foram desprezados.

O número de Prandtl é a razão da difusividade da quantidade de movimento pela difusividade térmica,

$$Pr = \frac{\mu c_p}{\lambda}, \quad (3-11)$$

onde c_p e λ representam, respectivamente, o calor específico médio a pressão constante e a condutividade térmica do fluido.

O número de Lewis da espécie química k , Le_k , descreve a razão entre a difusividade térmica e a difusividade mássica da espécie k ,

$$Le_k = \frac{Sc_k}{Pr} = \frac{\lambda}{\rho c_p \Gamma_k}. \quad (3-12)$$

Utilizando a hipótese de difusividades térmicas e mássicas equivalentes, ou seja, de número de Lewis unitário, e assumindo a igualdade dos coeficientes de difusão molecular $\Gamma_k = \Gamma$, o fluxo molecular difusivo da entalpia é dado por,

$$J_{hj} = -\rho \Gamma \frac{\partial h}{\partial x_j}, \quad (3-13)$$

como consequência, os números de Schmidt e Lewis são iguais para todas as espécies químicas.

O termo fonte de entalpia, S_h , pode ser escrito como,

$$S_h = \frac{Dp}{Dt} + u_i \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j}, \quad (3-14)$$

onde o termo Dp/Dt representa os efeitos de compressibilidade e $u_i \partial \tau_{ij} / \partial x_j$ descreve a produção de energia devido a ação das forças viscosas por unidade de volume. Assumindo a hipótese de regime de escoamento a baixo número de Mach, o segundo termo do lado direito desta equação pode ser negligenciado. Além disto, a influência da pressão no cálculo da densidade e do termo fonte de entalpia passa a ser exercida por uma pressão p_0 de referência. Nota-se que, em algumas aplicações de combustão, notadamente em motores de combustão interna, esta pressão de referência pode sofrer variações temporais consideráveis. Em outras aplicações, tais como de combustores de turbinas a gás em regime

estacionário, a pressão p_0 é aproximadamente constante (Waldherr et al., 1991). Neste trabalho, em consonância a hipótese de baixo número de Mach, a pressão de referência é considerada constante, de maneira que o termo Dp/Dt é aproximado para dp_0/dt e também pode ser negligenciado.

Nota-se que, mediante ao conjunto de hipóteses simplificadoras adotadas, as equações de transporte das frações mássicas das espécies químicas e da entalpia possuem formas equivalentes. Desta maneira, estas equações podem ser escritas em termos de uma equação geral de transporte de um campo escalar, Φ , o qual é composto por um conjunto de $\sigma = K + 1$ escalares, onde $\phi_k = Y_k$, para $k = 1, \dots, K$, e $\phi_\sigma = h$.

Com estas definições, o sistema de equações a ser resolvido é composto pela equação de transporte de massa, de quantidade de movimento, do campo escalar, e por uma equação de estado. Em notação indicial, com i e $j = 1, 2, 3$ e $\alpha = 1, \dots, \sigma$, escrevem-se,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i}{\partial x_i} = 0, \quad (3-15)$$

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j u_i}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j}, \quad (3-16)$$

$$\frac{\partial \rho \phi_\alpha}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j \phi_\alpha}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho \Gamma_\alpha \frac{\partial \phi_\alpha}{\partial x_j} \right) + S_\alpha, \quad (3-17)$$

$$\rho = \rho(\phi_\alpha). \quad (3-18)$$

Cabe observar que a determinação do campo escalar, Φ , fornece uma descrição completa das propriedades termoquímicas da mistura gasosa. Na seção 3.2.4, será visto que, mediante as hipóteses simplificadoras da cinética química adotadas neste trabalho, o campo escalar poderá ser representado por um único escalar, conhecido como variável de progresso da reação química, c . A evolução da variável de progresso, c , determina a influência da combustão no escoamento, a qual é exercida mediante a variação da densidade do fluido. A densidade, ρ , e o termo fonte escalar, S_α , são funções exclusivas de c , ou seja, $\rho = \rho(c)$ e $S_\alpha = S(c)$. Com estas hipóteses, o sistema de equações a ser resolvido é formado por 6 equações e 6 incógnitas.

3.2. Simulação de Grandes Escalas

A solução completa do sistema de Eqs. (3.1) a (3.5), para altos números de Reynolds e Damköhler, requer um esforço computacional considerável, tendo em vista a ordem de grandeza das escalas espaciais e temporais necessárias para que sejam representadas todas as estruturas presentes no escoamento. Em particular, a presença de reações químicas exotérmicas interagindo com a turbulência faz com que um grande número de graus de liberdade tenha que ser resolvido.

Para que simulações de casos de interesse prático sejam viáveis, é necessário que uma parte deste conjunto de graus de liberdade seja filtrada. Este processo pode ser feito de várias maneiras e, com exceção da DNS, todos os métodos de simulação de escoamentos turbulentos reativos adotam este tipo de estratégia (Geurts, 2003).

O método da Simulação de Grandes Escalas consiste na aplicação de um filtro espacial nas equações de transporte, Eqs. (3-15) a (3-18), o qual seleciona somente as maiores estruturas turbulentas para serem simuladas explicitamente. As menores estruturas, chamadas de estruturas sub-filtro, são modeladas em função do comportamento destas estruturas maiores.

Inerente ao método está a hipótese de que os erros numéricos associados a integração temporal das equações de transporte podem ser desprezados, uma vez que nos métodos numéricos tradicionais a resolução temporal é muito mais fina quando comparada com a espacial. Isto implica que o passo de tempo utilizado no avanço temporal das equações de transporte deve ser extremamente pequeno para que a dinâmica temporal do escoamento possa ser reproduzida adequadamente e para que o erro numérico associado à discretização temporal seja desprezível.

Considerando-se uma propriedade do escoamento, g , um processo de filtragem espacial ponderado pela densidade ρ pode ser definido por ,

$$\bar{\rho} \tilde{g}(\mathbf{x}, t) = \iiint_{V_c} F(\mathbf{x} - \mathbf{x}'; \Delta(\mathbf{x})) \rho g(\mathbf{x}', t) d^3 \mathbf{x}', \quad g' = g - \tilde{g} \quad (3-19)$$

onde $\bar{\rho}$ é a densidade média, $\tilde{g}$ é o valor filtrado, g' é o valor residual, F é a função filtro, V_c é o volume sobre o qual a operação de filtragem é aplicada, $d^3 \mathbf{x}'$ corresponde a $dx_1' dx_2' dx_3'$ e $\Delta(\mathbf{x}) = \Delta_1(\mathbf{x}) \Delta_2(\mathbf{x}) \Delta_3(\mathbf{x})$ é a largura da banda de filtragem que, em geral, varia espacialmente.

Tal processo pode ser empregado de duas maneiras distintas: explicitamente ou implicitamente. No primeiro caso, ele deve ser independente do processo de discretização numérica, sendo que, em geral, a frequência de corte é bem menor do que a frequência associada à malha local, a qual é proporcional ao inverso do espaçamento de malha. Vários tipos de filtros explícitos são sugeridos pela literatura, sendo que os mais utilizados são os Gaussianos, os *Top Hat* e os filtros em espaço espectral (Pope, 2000).

No segundo caso, o processo de filtragem é realizado implicitamente, baseado no fato de que o próprio processo de discretização de um método numérico é, intrinsecamente, um processo de filtragem espacial e temporal. Desta maneira, a largura de filtro espacial é relacionada diretamente ao espaçamento de malha e a largura de banda do filtro temporal é associada ao passo de tempo das simulações. Se a influência da filtragem temporal for desconsiderada, qualquer processo de discretização espacial pode ser escrito na forma da Eq. (3-19).

O presente trabalho faz uso do processo implícito de filtragem mediante a utilização de um método numérico de volumes finitos. Neste método, o domínio computacional é dividido em M volumes de controle V_{ci} , com $i = 1, \dots, M$. As equações de transporte são integradas em cada um destes volumes de controle, o que corresponde a aplicação de um filtro na forma da Eq. (3-19) com uma função F dada por,

$$F = \begin{cases} 1, & \text{se } \mathbf{x}' \in V_c \\ 0, & \text{caso contrário} \end{cases} \quad (3-20)$$

As equações de transporte são resolvidas para cada um destes M volumes computacionais discretos, aos quais são associados os valores dos três componentes de velocidade, pressão, campo escalar e densidade. As formas das equações de transporte filtradas são apresentadas a seguir.

3.2.1. Filtragem das Equações de Transporte

Como mencionado anteriormente, o processo de filtragem implícita em LES considera que a resolução temporal dos métodos numéricos tradicionais é grande o suficiente quando comparada com a espacial. Como consequência, os efeitos da

filtragem temporal podem ser desprezados. Isto implica que os operadores de filtragem e as derivadas temporais das equações de transporte comutam.

A operação de filtragem dos termos que envolvem as derivadas espaciais, principalmente dos termos convectivos, não lineares, pode introduzir erros de comutação. Tais erros são mais evidentes nos casos em que a largura de banda de filtro, ou espaçamento da malha, passa por variações consideráveis em função da sua posição no espaço. Geralmente, o tamanho das estruturas turbulentas que contém a maior parte da energia varia de acordo com o regime do escoamento e a região no espaço. Em muitos casos, as regiões de interesse são concentradas em locais específicos, tais como em camadas limites ou zonas de recirculação, por exemplo. Portanto, para que não haja desperdício de recursos computacionais e para que as estruturas de interesse sejam simuladas adequadamente, é conveniente que a largura do filtro espacial se adapte aos diferentes requerimentos, o que torna essencial que o tamanho da malha varie espacialmente (Sampaio, 2006).

No presente trabalho, entretanto, faz-se a opção do emprego de malhas uniformes. Se por um lado é sabido que a demanda de potência computacional aumenta consideravelmente com esta opção, por outro, resultados mais precisos são esperados, uma vez que os erros de comutação na operação de filtragem das derivadas espaciais podem ser considerados nulos.

Desta maneira, as equações de transporte filtradas podem ser escritas como,

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i}{\partial x_i} = 0, \quad (3-21)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{u}_i}{\partial x_j} = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial \bar{\tau}_{ij}}{\partial x_j} - \frac{\partial \tau_{ij}^{SGS}}{\partial x_j}, \quad (3-22)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{\phi}_\alpha}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{\phi}_\alpha}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\bar{\rho} \bar{\Gamma}_\alpha \frac{\partial \tilde{\phi}_\alpha}{\partial x_j} \right) - \frac{\partial Q_{\alpha j}}{\partial x_j} + \bar{S}_\alpha, \quad (3-23)$$

onde,

$$\tau_{ij}^{SGS} = (\bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{u}_i - \bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{u}_i), \quad (3-24)$$

$$Q_{\alpha j} = (\bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{\phi}_\alpha - \bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{\phi}_\alpha). \quad (3-25)$$

Nota-se que o processo de filtragem das equações de transporte introduz novas variáveis no problema, representadas pelo tensor sub-filtro, τ_{ij}^{SGS} , e pelo fluxo turbulento sub-filtro do campo escalar, $Q_{\alpha j}$. Estes termos representam, respectivamente, as contribuições do transporte turbulento da quantidade de movimento e do campo escalar nas escalas resolvidas de LES. Adicionalmente, o termo de taxa de reação química filtrada, $\bar{S}_{\alpha}$, oferece complicações para ser resolvido, as quais estão associadas a sua dependência exponencial do campo escalar. Sua decomposição no processo de filtragem produziria termos abertos extras não desejados. Cabe mencionar que a principal dificuldade na utilização de LES em escoamentos turbulentos reativos está relacionada à resolução do termo de taxa de reação química filtrada, uma vez que, na maioria dos casos práticos, a maior parte dos efeitos das reações químicas, da difusão molecular e da dissipação do campo escalar ocorre integralmente em escalas sub-filtro.

Neste contexto, o foco do problema passa a ser o fechamento do sistema de equações mediante a modelagem do tensor sub-filtro, τ_{ij}^{SGS} , do fluxo sub-filtro do campo escalar, $Q_{\alpha j}$, e da taxa de reação química filtrada, $\bar{S}_{\alpha}$. Daqui por diante, as propriedades sub-filtro são denominadas sub-malha, visto que, como mencionado previamente, o processo de filtragem aplicado no presente trabalho é implícito à discretização numérica.

3.2.2. Tensor Sub-Malha

A maioria dos modelos sub-malha faz uso da hipótese de que as pequenas estruturas turbulentas possuem características aproximadamente homogêneas e isotrópicas, o que as tornam mais passíveis e previsíveis de serem modeladas. Estas estruturas se encontram em estado de equilíbrio energético e são dependentes das estruturas turbulentas das grandes escalas. A troca de energia cinética da turbulência está associada diretamente as diferenças entre as escalas características de comprimento, sendo que as maiores escalas contêm a maior parte do espectro de energia, a qual é transferida para as pequenas escalas na forma de uma cascata de energia unidirecional (Pope, 2000).

Neste sentido, o papel dos termos sub-malha na cascata de energia é usualmente modelado mediante a introdução de novos termos de transporte

difusivo do tipo gradiente, similares àqueles encontrados nas equações de transporte originais. Uma propriedade escalar é associada a estes termos com o objetivo de equilibrar a taxa de transferência inercial de energia e promover sua dissipação nas menores escalas. Desta maneira, para escoamentos com densidade variável, o tensor sub-malha pode ser escrito como (Germano et al., 1991),

$$\tau_{ij}^{SGS} - \frac{1}{3} \delta_{ij} \tau_{kk}^{SGS} = \mu_{SGS} \left(\tilde{S}_{ij} - \frac{1}{3} \delta_{ij} \tilde{S}_{kk} \right), \quad (3-26)$$

onde μ_{SGS} é uma propriedade escalar conhecida como viscosidade sub-malha e $\tilde{S}_{ij}$ é o tensor de taxa de deformação das escalas resolvidas,

$$\tilde{S}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right). \quad (3-27)$$

Fazendo-se uma análise dimensional é possível mostrar que a viscosidade sub-malha pode ser definida em função de uma combinação de escalas de tempo e comprimento. Observa-se que a escala de comprimento é bem definida em LES, uma vez que na filtragem implícita ela pode ser representada pela dimensão característica de malha. A escala de tempo pode ser definida, por exemplo, pelo inverso da magnitude da taxa de deformação das escalas resolvidas, $\tilde{S}_{ij}$. Seguindo este raciocínio, diferentes modelos de viscosidade sub-malha foram concebidos, sendo que o mais conhecido dentre eles é o de Smagorinsky (1963).

3.2.2.1.

Modelo de Smagorinsky

O modelo de viscosidade sub-malha de Smagorinsky, utilizado no presente trabalho, assume um equilíbrio entre produção, transferência e dissipação de energia nas pequenas escalas, utilizando a taxa de deformação resolvida para definir uma escala de tempo e o espaçamento de malha para definir uma escala de comprimento. Deste modo, a viscosidade sub-malha é calculada a partir das grandezas resolvidas de acordo com (Germano et al., 1991),

$$\mu_{SGS} = 2\bar{\rho}(C_S\Delta)^2|\tilde{S}|, \quad (3-28)$$

onde $|\tilde{S}|$ é o módulo do tensor taxa de deformação do campo de velocidades resolvido,

$$|\tilde{S}| = \sqrt{2\tilde{S}_{ij}\tilde{S}_{ij}}, \quad (3-29)$$

Δ é uma escala de comprimento associada a largura de filtro espacial e C_S é a constante de Smagorinsky.

A escala de comprimento Δ corresponde às menores escalas resolvidas e pode ser determinada em função do espaçamento de malha local. Para casos de malhas que apresentam volumes de controle na forma de paralelepípedos,

$$\Delta = \sqrt[3]{V_c}, \quad (3-30)$$

onde V_c é o volume de um elemento de malha.

Nota-se que o comprimento de filtro Δ é um escalar, enquanto que as estruturas turbulentas a serem resolvidas são tridimensionais, possuindo escalas de comprimentos diferentes nas diversas direções. Portanto, se a proporção entre os espaçamentos de malha das três direções cartesianas for muito elevada, é possível que a viscosidade μ_{SGS} seja superestimada na direção cujo comprimento de malha é menor. Por exemplo, caso o espaçamento de malha na direção x (Δx) seja muito maior do que Δy e Δz , a viscosidade sub-malha pode ser superestimada para as estruturas turbulentas cujas dimensões características são da ordem de grandeza do espaçamento de malha nas direções y e z (Sampaio, 2006). A solução imediata para este problema é adotar uma distribuição de malha a mais homogênea o possível nas três direções.

Os valores da constante de Smagorinsky são escolhidos de tal forma que o equilíbrio local de energia seja mantido, sendo que normalmente variam de 0,1 a 0,25, dependendo das características do escoamento em questão (Pope, 2000).

Resumidamente, as principais limitações do modelo de Smagorisky são: (a) o modelo não prevê uma viscosidade sub-malha nula caso o escoamento se torne laminar. Este fato pode ser relevante em escoamentos reativos, uma vez que a liberação de calor pelas reações químicas pode ocasionar a re-laminarização local do escoamento, (b) por assumir a hipótese de equilíbrio de energia, o modelo pode falhar em regiões onde este equilíbrio é destruído. O modelo não prevê a transferência de energia das pequenas para grandes escalas de comprimento, isto

é, a cascata retrógrada de energia, (c) para simulações que empregam elementos de malha altamente anisotrópicos, o modelo tende a ser demasiadamente difusivo e pode não representar adequadamente as menores estruturas tridimensionais.

Mesmo considerando-se estas limitações, este modelo pode ser empregado com sucesso dependendo da aplicação em questão. Por este motivo e pela simplicidade na implementação numérica, o modelo de Smagorinsky é largamente utilizado na modelagem do tensor sub-malha (Lesieur et al., 2005).

3.2.3. Fluxo Escalar Sub-Malha

Em escoamentos turbulentos reativos, o transporte difusivo do tipo contra-gradiente do campo escalar pode acontecer quando a dinâmica do escoamento na região próxima a frente de chama é determinada principalmente pela expansão térmica associada as reações químicas. Nesta situação, os efeitos da diferença de pressão entre os gases frescos (mais densos) e os gases queimados (menos densos) podem ser determinantes no processo de transporte turbulento do escalar. De maneira oposta, o transporte difusivo do tipo gradiente tende a acontecer quando as flutuações turbulentas de velocidade dominam a dinâmica do escoamento próximo da região onde ocorrem reações químicas. Tais flutuações têm por efeito principal o dobramento dos elementos de chama e a redução dos efeitos de variação de densidade associados à liberação de calor.

Esta competição entre efeitos de expansão térmica das reações químicas e efeitos de mistura turbulenta pode ser descrita em termos do número de Bray (Veynante et al., 1997),

$$N_B = \frac{\tau_{lb} S_L}{2\xi u'}, \quad (3-31)$$

onde τ_{lb} é um fator relacionado a liberação de calor, S_L é a velocidade de chama laminar, u' é a intensidade de turbulência e ξ é uma função da ordem da unidade, que leva em consideração a capacidade dos pequenos vórtices dobrarem a frente de chama. O transporte contra-gradiente ocorre para baixos valores de u'/S_L e altos valores de τ_{lb} , correspondendo a $N_B > 1$, enquanto que o transporte gradiente acontece para $N_B < 1$.

Neste contexto, uma das questões atuais no desenvolvimento de LES de escoamentos turbulentos reativos é a representatividade do transporte difusivo do tipo contra-gradiente do campo escalar nas escalas sub-malha, nos casos em que N_B é muito maior do que a unidade. Tomando-se como base os resultados apresentados no trabalho de Boger e Veynante (2000), a intensidade do fluxo escalar sub-malha aumenta quase que linearmente com a largura característica do filtro espacial. Entretanto, o processo de transporte (gradiente ou contra-gradiente) é independente desta largura de filtro. Portanto, com o uso de uma malha computacional adequada é esperado que a parte mais relevante do fenômeno do transporte difusivo contra-gradiente seja reproduzida pelas escalas resolvidas de LES, mesmo com a utilização de um modelo sub-malha baseado em hipóteses de transporte difusivo gradiente. Cabe observar que existe uma grande carência de trabalhos que tratam da importância do transporte contra-gradiente do campo escalar em LES, sendo assim a argumentação acima não pode ser considerada conclusiva. No entanto, esta é a estratégia empregada pela grande maioria dos trabalhos atuais na área de modelagem da combustão turbulenta, a qual também é utilizada no presente trabalho.

Deste modo, o fluxo sub-malha do campo escalar é escrito de maneira similar ao tensor sub-malha (Fox, 2003),

$$Q_{\alpha j} = -\rho \Gamma_{SGS} \frac{\partial \tilde{\phi}_\alpha}{\partial x_j}, \quad (3-32)$$

onde $\tilde{\phi}_\alpha$ é o campo escalar resolvido e Γ_{SGS} é o coeficiente de difusão sub-malha, o qual é calculado por analogia ao modelo de Smagorinsky,

$$\Gamma_{SGS} = \frac{2\bar{\rho}(C_S\Delta)^2}{Sc_{SGS}} |\tilde{S}| = \frac{\mu_{SGS}}{Sc_{SGS}}, \quad (3-33)$$

onde Sc_{SGS} é o número de Schmidt sub-malha.

Convém notar que, na situação em que a difusividade da quantidade de movimento é mais intensa do que a difusividade mássica das espécies químicas, é esperado que o coeficiente de difusão sub-malha seja consideravelmente maior do que o coeficiente de difusão molecular, o qual é normalmente negligenciado na maioria dos estudos disponíveis na literatura. Neste trabalho, porém, os dois coeficientes são levados em consideração.

3.2.4.

Taxa de Reação Química

A determinação da taxa de reação química filtrada, $\bar{S}_\alpha$, constitui o maior desafio da Simulação de Grandes Escalas de escoamentos turbulentos reativos. Como mostrado na seção 2.3.2, as principais dificuldades estão diretamente relacionadas às pequenas escalas características de tempo e comprimento dos fenômenos químicos. Em geral, o espaçamento de malha utilizado nas simulações de casos de interesse prático é maior do que a espessura da camada interna das chamas, cuja ordem de grandeza varia em torno da fração de milímetro. Deste modo, as principais contribuições das reações químicas ocorrem em escalas sub-malha, o que implica que o termo $\bar{S}_\alpha$ não pode ser determinado unicamente a partir das escalas resolvidas de LES. Como resultado, a formulação de um modelo para determinar a taxa de reação química filtrada é indispensável.

Tal modelo deve conter hipóteses bem fundamentadas em relação à sua aplicação aos regimes de combustão turbulenta pré-misturada e aos mecanismos básicos da cinética química. Neste sentido, o presente trabalho utiliza uma abordagem de modelagem de natureza estatística, baseada na formulação da função densidade probabilidade transportada. A princípio, esta abordagem permite a modelagem das chamas presentes em todos os regimes de combustão turbulenta pré-misturada, isto é, das chamas dobradas e corrugadas, das chamas espessas e das chamas distribuídas (Mura et al., 2003). Cabe mencionar que os regimes de combustão turbulenta pré-misturada são ilustrados na Figura 2.7.

As configurações das chamas dobradas e corrugadas, das chamas espessas e das chamas distribuídas são ilustradas de maneira esquemática na Figura 3.1. As chamas dobradas e corrugadas são caracterizadas pelo número de Damköhler, Da , alto e pelo número de Karlovitz, Ka , menor do que a unidade. Nestas chamas, as reações químicas são muito mais rápidas do que as flutuações características do campo turbulento. As menores estruturas turbulentas são maiores do que a espessura da camada interna da chama, o que implica que a estrutura local de uma chama laminar é mantida. A frente de chama turbulenta é representada pela coleção destas chamas laminares finas, as quais são dobradas e corrugadas pelos efeitos da turbulência e formam uma fina interface entre os gases frescos e os gases queimados.

As chamas espessas são caracterizadas pelo baixo número de Damköhler, Da . A escala de comprimento característica da turbulência é pequena o suficiente para interagir com a camada de pré-aquecimento destas chamas. Esta interação ocasiona um aumento da difusividade do calor, resultando numa maior velocidade de chama turbulenta, S_T , e no aumento da espessura da chama, δ_T .

As chamas distribuídas são caracterizadas pelo número de Damköhler, Da , menor do que a unidade. A escala de comprimento característica da turbulência é suficientemente pequena para penetrar na espessura da camada interna destas chamas, levando a quebras locais das reações químicas devido à perda de calor e radicais para camada de pré-aquecimento. Além disto, porções de gases frescos são espalhadas no espaço, pelo efeito da interação entre as flutuações turbulentas e as reações químicas, de maneira que estas chamas podem ser caracterizadas por apresentarem reações químicas distribuídas.

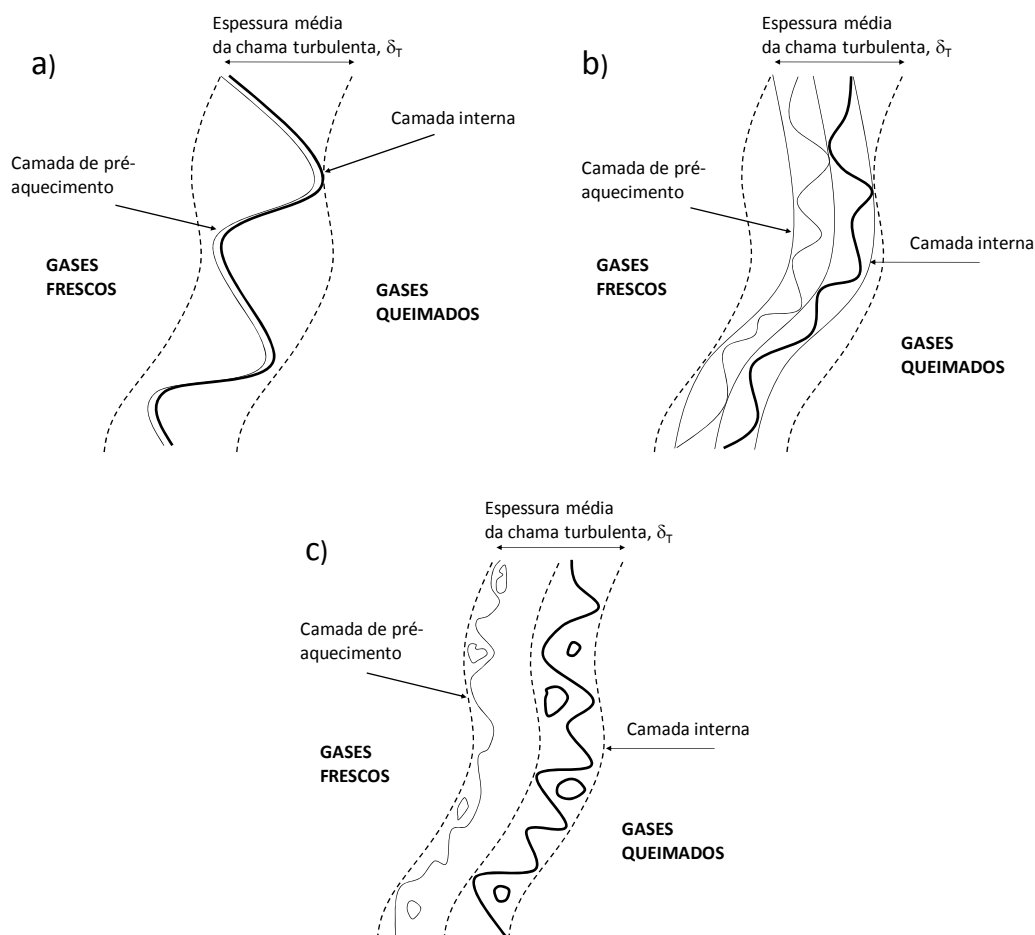


Figura 3.1 Representação esquemática das frentes de chama, características dos diferentes regimes de combustão turbulenta pré-misturada: (a) chamas dobradas e corrugadas, (b) chamas espessas e (c) chamas distribuídas.

Uma vez definida a aplicação do modelo em termos de configuração das chamas, é necessário estabelecer uma expressão para determinar a taxa das reações químicas. Neste contexto, o presente trabalho utiliza a lei empírica de Arrhenius, deduzida mediante uma série de hipóteses simplificadoras da cinética química apresentadas no Apêndice A,

$$S(c) = A_\tau \rho (1 - c) \exp\left(\beta \frac{c}{c + 1/\gamma}\right), \quad (3-34)$$

onde A_τ é uma constante, inversamente proporcional ao tempo característico das reações químicas, ρ é a densidade, c é uma temperatura normalizada, conhecida como variável de progresso da reação química, γ é o calor de reação reduzido e β é a energia de ativação reduzida.

O número de Zeldovich, Ze , é introduzido para quantificar a sensibilidade da taxa de reação química à temperatura,

$$Ze = \frac{E(T_b - T_u)}{RT_b^2}, \quad (3-35)$$

onde E é a energia de ativação da reação química, T_b é a temperatura dos gases queimados, T_u é a temperatura dos gases frescos e R é a constante dos gases ideais. Para queima de hidrocarbonetos com ar, Ze é da ordem de 10.

É importante notar que, mediante as hipóteses simplificadoras da cinética química adotadas, as quais são apresentadas no Apêndice A, os gases frescos são caracterizados pelos valores da variável de progresso da reação química $c = 0$, enquanto os gases queimados são representados pelos valores de $c = 1$.

Percebe-se, também, que a taxa de reação química pode ser determinada exclusivamente em função da variável de progresso da reação química, c . Isto implica que a equação de transporte do campo escalar, Eq. (3-23), também deve ser colocada em função da variável de progresso, c .

Com estas definições, o foco das seções a seguir passa a ser a apresentação de uma formulação matemática adequada para representar a evolução espacial e temporal da taxa de reação química nas escalas resolvidas de LES. Este trabalho emprega uma formulação de natureza estatística, a qual incorpora os principais processos físicos presentes nas chamas turbulentas pré-misturadas, ilustradas na Figura 3.1. Trata-se do método da função densidade probabilidade transportada.

3.3.

Método da Função Densidade Probabilidade Transportada

O método da função densidade probabilidade transportada (PDF) consiste em resolver uma equação de transporte para uma PDF conjunta da velocidade e campo escalar ou para uma PDF do campo escalar. Estas PDFs permitem fornecer uma descrição estatística completa, do tipo uni-ponto, do campo de velocidade e escalar ou do campo escalar, respectivamente. Uma das principais vantagens do método reside no fato de que os momentos estatísticos do termo de taxa de reação química podem ser calculados explicitamente, sem a necessidade de modelagem. Por outro lado, uma vez que o método fornece estatísticas do tipo uni-ponto, os termos que envolvem gradientes das propriedades do escoamento não podem ser resolvidos de forma explícita. Desta maneira, alguns efeitos importantes no transporte da PDF, tais como os de difusão molecular e dissipação do campo escalar devem ser modelados. Atualmente, os principais desenvolvimentos no âmbito das equações de transporte da PDF estão relacionados à melhoria do realismo físico de tais modelos, conhecidos como modelos de micro-mistura.

A equação de transporte da PDF conjunta da velocidade e campo escalar é uma equação multidimensional que envolve tantas variáveis independentes quanto as dimensões geométricas, do vetor velocidade e da composição da mistura. Esta equação contém termos de transporte transiente e convectivo da PDF, termos de gradiente de flutuação de pressão, de dissipação viscosa e difusão molecular condicionados ao campo escalar e termos de gradiente de pressão média e taxa de reação química. Sua resolução fornece uma descrição estatística completa dos campos de velocidade e do campo escalar. Os momentos estatísticos de primeira e segunda ordem, associados a métodos como RANS ou LES, podem ser facilmente determinados. Além disto, os momentos estatísticos de maior ordem, tais como correlações triplas de velocidades, podem ser calculados (Fox, 2003).

O presente trabalho emprega uma formulação baseada na equação de transporte da PDF do campo escalar, a qual não contém informações sobre a evolução dos campos de velocidade e de turbulência. Como consequência, é necessário realizar o acoplamento com um modelo que forneça o campo de velocidade do escoamento e as informações relativas às escalas características de

tempo e comprimento da turbulência. Neste trabalho, tal acoplamento é obtido através da modelagem híbrida LES-PDF.

Um dos maiores atrativos desta abordagem é que os principais processos físicos presentes em uma frente de chama turbulenta, compostos pela difusão molecular, mistura turbulenta e expansão térmica, são levados em consideração na determinação da taxa de reação química filtrada, $\bar{S}_\alpha$. Neste trabalho, isto é possível mediante a resolução de equações diferenciais estocásticas equivalentes à equação de transporte da PDF euleriana do campo escalar. O escoamento é representado por partículas estocásticas, cada uma delas carregando seu próprio conjunto de propriedades (posição no espaço físico e composição do campo escalar). Os valores de velocidade e turbulência e os coeficientes de difusão são obtidos do campo euleriano, usado para descrição do escoamento, possibilitando que os efeitos da difusão molecular, da mistura turbulenta e da reação química sejam avaliados em cada partícula. Em particular, o termo de reação química pode ser calculado de acordo com a Eq. (3-34), sem a necessidade de modelagem.

A equação de transporte da PDF do campo escalar pode ser obtida integrando-se no espaço amostral de velocidade a equação de transporte da PDF conjunta da velocidade e do campo escalar. A seguir, as formulações matemáticas destas duas equações são apresentadas. A abordagem lagrangeana é descrita em detalhe mediante a formulação das equações diferenciais estocásticas equivalentes à equação de transporte da PDF euleriana do campo escalar. Na última seção do capítulo, a formulação usada neste trabalho é apresentada e o acoplamento entre os métodos LES e PDF é discutido.

3.3.1.

PDF Conjunta da Velocidade e Campo Escalar

Considerando-se um campo vetorial $\Phi(\mathbf{x}, t) = [\mathbf{u}(\mathbf{x}, t), \mathbf{Y}(\mathbf{x}, t), h(\mathbf{x}, t)]$ como o conjunto do campo de velocidade, da fração mássica das espécies químicas e da entalpia, sua função densidade probabilidade conjunta $P_\Phi(\Psi; \mathbf{x}, t) = P_{\mathbf{u}, \mathbf{Y}, h}(\mathbf{V}, \boldsymbol{\varphi}, H; \mathbf{x}, t)$ é definida como a probabilidade de um evento onde os campos aleatórios de velocidade $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$, da fração mássica $\mathbf{Y}(\mathbf{x}, t)$ e da entalpia $h(\mathbf{x}, t)$ em um ponto $\mathbf{x}$ e no instante de tempo t encontram-se na vizinhança diferencial de valores fixos do espaço amostral $\mathbf{V}$, $\boldsymbol{\varphi}$, e H , isto é,

$$\begin{aligned}
P_{\Phi}(\Psi; \mathbf{x}, t) d\Psi &\equiv \text{Prob} \{ \Psi \leq \Phi(\mathbf{x}, t) < \Psi + d\Psi \} \\
&\equiv \text{Prob} (\{ \mathbf{V} \leq \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) < \mathbf{V} + d\mathbf{V} \} \cap \\
&\quad \{ \boldsymbol{\varphi} \leq \mathbf{Y}(\mathbf{x}, t) < \boldsymbol{\varphi} + d\boldsymbol{\varphi} \} \cap \{ H \leq h(\mathbf{x}, t) < H + dH \}) .
\end{aligned} \tag{3-36}$$

O lado direito é a probabilidade que as variáveis aleatórias $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$, $\mathbf{Y}(\mathbf{x}, t)$ e $h(\mathbf{x}, t)$ tem de se encontrarem no intervalo de valores do espaço amostral do vetor velocidade $\mathbf{V}$ e $\mathbf{V} + d\mathbf{V}$, do vetor de frações mássicas $\boldsymbol{\varphi}$ e $\boldsymbol{\varphi} + d\boldsymbol{\varphi}$ e do vetor de entalpia H e $H + dH$, respectivamente, para cada realização do escoamento turbulento reativo.

A equação de transporte da PDF conjunta da velocidade, fração mássica de espécies químicas e entalpia, a qual é derivada em detalhe no Apêndice B, pode ser escrita como,

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \rho(\Psi) P_{\Phi}(\Psi; \mathbf{x}, t)}{\partial t} + \frac{\partial \rho(\Psi) u_j P_{\Phi}(\Psi; \mathbf{x}, t)}{\partial x_j} &= - \frac{\partial}{\partial V_j} [\rho(\Psi) \langle A_j | \Psi \rangle P_{\Phi}(\Psi; \mathbf{x}, t)] \\
&\quad - \frac{\partial}{\partial \varphi_k} [\rho(\Psi) \langle C_k | \Psi \rangle P_{\Phi}(\Psi; \mathbf{x}, t)] - \frac{\partial}{\partial H} [\rho(\Psi) \langle C_h | \Psi \rangle P_{\Phi}(\Psi; \mathbf{x}, t)] ,
\end{aligned} \tag{3-37}$$

onde os termos de fluxos condicionados $\langle A_j | \Psi \rangle$, $\langle C_k | \Psi \rangle$ e $\langle C_h | \Psi \rangle$ são descritos respectivamente pelas equações (B-1), (B-2) e (B-3). Tais termos representam efeitos da aceleração condicionada e difusão/produção condicionada das frações mássicas das espécies químicas e da entalpia, respectivamente.

Percebe-se que esta equação evolui (i) no espaço físico, $\mathbf{x}$, devido ao campo de velocidade, u_j , (ii) no espaço amostral de velocidade devido ao termo de aceleração condicionado, $\langle A_j | \Psi \rangle$, (iii) no espaço amostral de frações mássicas devido ao termo de difusão/reação condicionado, $\langle C_k | \Psi \rangle$, e (iv) no espaço amostral de entalpia devido ao termo de difusão/fonte condicionado, $\langle C_h | \Psi \rangle$.

Como mencionado na seção 3.1, as equações de transporte das frações mássicas de espécies químicas e de entalpia apresentam, mediante algumas hipóteses simplificadoras, estruturas semelhantes. Ambas possuem um termo transiente, um termo convectivo, um termo difusivo e um termo fonte. Portanto, estas equações podem ser expressas em termos de uma única equação de transporte de um escalar. Assim, a Eq. (3.37) também pode ser re-escrita de uma

maneira mais compacta em termos de uma PDF conjunta da velocidade e campo escalar (Fox, 2003),

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho(\Psi) P_{\Phi}(\Psi; \mathbf{x}, t)}{\partial t} + \frac{\partial \rho(\Psi) u_j P_{\Phi}(\Psi; \mathbf{x}, t)}{\partial x_j} = \\ - \frac{\partial}{\partial V_j} [\rho(\Psi) \langle A_j | \Psi \rangle P_{\Phi}(\Psi; \mathbf{x}, t)] - \frac{\partial}{\partial \psi_{\alpha}} [\rho(\Psi) \langle \Theta_{\alpha} | \Psi \rangle P_{\Phi}(\Psi; \mathbf{x}, t)], \end{aligned} \quad (3-38)$$

onde ψ_{α} representa a variável do espaço amostral do campo escalar, $\langle A_j | \Psi \rangle$ o termo médio de aceleração condicionada, e $\langle \Theta_{\alpha} | \Psi \rangle$ representa o termo médio de difusão/fonte condicionadas,

$$\rho(\Psi) \langle A_j | \Psi \rangle = \left\langle \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} \middle| \Psi \right\rangle - \left\langle \frac{\partial p'}{\partial x_i} \middle| \Psi \right\rangle - \frac{\partial \langle p \rangle}{\partial x_i} + F_i, \quad (3-39)$$

$$\rho(\Psi) \langle \Theta_{\alpha} | \Psi \rangle = - \left\langle \frac{\partial J_{\alpha j}}{\partial x_j} \middle| \Psi \right\rangle + S_{\alpha}(\psi). \quad (3-40)$$

A principal vantagem desta formulação consiste no fato de que, uma vez conhecida a distribuição da PDF da velocidade e do campo escalar, $P_{\Phi}(\Psi; \mathbf{x}, t)$, os m -ésimos momentos estatísticos centrados, μ_m , de qualquer função $Q(\Phi)$ das variáveis aleatórias Φ podem ser calculados por integração,

$$\mu_m = \langle Q'^m(\Phi) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} [Q(\Psi) - \langle Q(\Phi) \rangle]^m P_{\Phi}(\Psi; \mathbf{x}, t) d\Psi. \quad (3-41)$$

Cabe observar que os momentos estatísticos usualmente associados às abordagens tradicionais de modelagem de escoamentos turbulentos reativos podem ser imediatamente obtidos utilizando-se esta equação. Em particular, a velocidade média $\langle \mathbf{u} \rangle$, o valor médio do escalar α $\langle \phi_{\alpha} \rangle$, os tensores de Reynolds $\langle u_i u_j \rangle$, os fluxos escalares $\langle u_i \phi'_{\alpha} \rangle$, as covariâncias de segunda ordem $\langle \phi'_{\alpha} \phi'_{\beta} \rangle$ e o termo de reação química média $\langle S_{\alpha}(\phi_{\alpha}) \rangle$ podem ser assim determinados. Além disto, os momentos estatísticos de ordens superiores também encontram-se disponíveis, tais como as correlações triplas de velocidade $\langle u_i u_j u_k \rangle$ (Fox, 2003). Portanto, a solução da equação de transporte da PDF da velocidade e campo escalar proporciona mais informações do que os métodos tradicionais de modelagem de escoamentos turbulentos reativos, sem envolver o problema usual de fechamento do termo de taxa de reação química.

Por outro lado, a principal desvantagem desta formulação reside no fato de que os valores médios de funções não lineares da velocidade e/ou de gradientes dos escalares aparecem de forma aberta e requerem modelagem. Este é o caso dos termos que correspondem aos efeitos da taxa de dissipação viscosa e de flutuações de pressão, os quais intervêm na Eq. (3-39), e do termo de difusão molecular, presente na Eq. (3-40).

Uma formulação mais simples, a qual exclui o termo de aceleração condicionada e mantém a forma fechada do termo de reação química, pode ser obtida a partir da equação de transporte da PDF conjunta da velocidade e do campo escalar. Trata-se da equação de transporte da PDF do campo escalar.

3.3.2. PDF do Campo Escalar

As principais vantagens da utilização da equação de transporte da PDF do campo escalar, $P_\phi(\boldsymbol{\psi}; \mathbf{x}, t)$, em relação ao uso da equação de transporte da PDF conjunta da velocidade e do campo escalar, $P_{\mathbf{u},\phi}(\mathbf{V}, \boldsymbol{\psi}; \mathbf{x}, t)$, consistem na sua formulação matemática mais simples e na menor demanda computacional pelo processo de resolução numérica (Pope, 1994b). No entanto, sua utilização requer que os valores do campo de velocidade e as escalas características de tempo e comprimento da turbulência sejam conhecidos. No presente trabalho estes valores são fornecidos por LES, sendo que a equação de transporte da PDF do campo escalar é utilizada para determinar os momentos estatísticos do campo escalar e do termo de taxa de reação química.

A equação de transporte da PDF do campo escalar pode ser obtida integrando-se a equação de transporte da PDF conjunta da velocidade e campo escalar sobre o espaço amostral de velocidade,

$$P_\phi(\boldsymbol{\psi}; \mathbf{x}, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} P_{\mathbf{u},\phi}(\mathbf{V}, \boldsymbol{\psi}; \mathbf{x}, t) d\mathbf{V}. \quad (3-43)$$

Executando-se esta operação e separando-se as contribuições dos termos de difusão molecular condicionado e de reação química, a equação de transporte da PDF do campo escalar pode ser escrita como,

$$\begin{aligned} & \frac{\partial \rho(\boldsymbol{\psi}) P_{\phi}(\boldsymbol{\psi}; \mathbf{x}, t)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} [\rho(\boldsymbol{\psi}) \langle u_j | \boldsymbol{\psi} \rangle P_{\phi}(\boldsymbol{\psi}; \mathbf{x}, t)] = \\ & - \frac{\partial}{\partial \psi_{\alpha}} \left[\rho(\boldsymbol{\psi}) \left\langle \frac{1}{\rho} \frac{\partial J_{\alpha j}}{\partial x_j} \middle| \boldsymbol{\psi} \right\rangle P_{\phi}(\boldsymbol{\psi}; \mathbf{x}, t) \right] - \frac{\partial}{\partial \psi_{\alpha}} [S_{\alpha}(\boldsymbol{\psi}) P_{\phi}(\boldsymbol{\psi}; \mathbf{x}, t)] . \end{aligned} \quad (3-44)$$

Nesta equação, a PDF do campo escalar evolui sob a influência (i) do transporte convectivo devido a velocidade condicionada, $\langle u_j | \boldsymbol{\psi} \rangle$, (ii) do transporte no espaço amostral do campo escalar devido a mistura molecular condicionada, $\langle 1/\rho \partial J_{\alpha j} / \partial x_j | \boldsymbol{\psi} \rangle$, e (ii) do termo de taxa de reação química, $S_{\alpha}(\boldsymbol{\psi})$. A velocidade condicionada pode ser decomposta em uma parcela filtrada e uma parcela sub-malha (Colucci et al., 1998),

$$\langle u_j | \boldsymbol{\psi} \rangle P_{\phi}(\boldsymbol{\psi}; \mathbf{x}, t) = \tilde{u}_j P_{\phi}(\boldsymbol{\psi}; \mathbf{x}, t) + [\langle u_j | \boldsymbol{\psi} \rangle - \tilde{u}_j] P_{\phi}(\boldsymbol{\psi}; \mathbf{x}, t) , \quad (3-45)$$

onde o primeiro termo representa o efeito de convecção da PDF devido ao campo de velocidade resolvido por LES e o segundo termo denota os efeitos da difusão turbulenta da PDF nas escalas sub-malha, o qual aparece de forma aberta e precisa ser modelado. Um modelo largamente utilizado é baseado no transporte do tipo difusão gradiente (Colucci et al., 1998),

$$[\langle u_j | \boldsymbol{\psi} \rangle - \tilde{u}_j] P_{\phi}(\boldsymbol{\psi}; \mathbf{x}, t) = \Gamma_{SGS} \frac{\partial P_{\phi}(\boldsymbol{\psi}; \mathbf{x}, t)}{\partial x_j} , \quad (3-46)$$

onde Γ_{SGS} é o coeficiente de difusão sub-malha do escalar, calculado por LES.

O termo de mistura molecular condicionada pode ser decomposto em duas parcelas (Colucci et al., 1998),

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial \psi_{\alpha}} \left[\rho(\boldsymbol{\psi}) \left\langle \frac{1}{\rho} \frac{\partial J_{\alpha j}}{\partial x_j} \middle| \boldsymbol{\psi} \right\rangle P_{\phi}(\boldsymbol{\psi}; \mathbf{x}, t) \right] = \\ & \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\Gamma_{\alpha} \frac{\partial P_{\phi}(\boldsymbol{\psi}; \mathbf{x}, t)}{\partial x_j} \right) - \frac{\partial^2}{\partial \psi_{\alpha}^2} \left[\left\langle \Gamma_{\alpha} \frac{\partial \phi_{\alpha}}{\partial x_j} \frac{\partial \phi_{\alpha}}{\partial x_j} \middle| \boldsymbol{\psi} \right\rangle P_{\phi}(\boldsymbol{\psi}; \mathbf{x}, t) \right] , \end{aligned} \quad (3-47)$$

onde o primeiro termo do lado direito representa o efeito de difusão molecular no transporte da PDF no espaço físico e o segundo termo do lado direito é conhecido como termo de micro-mistura, o qual representa os efeitos da dissipação escalar no transporte da PDF no espaço amostral do campo escalar.

O termo de micro-mistura apresenta-se aberto e sua modelagem caracteriza uma área de pesquisa a parte no âmbito dos métodos de transporte da PDF. Os primeiros modelos propostos, tais como os do tipo interação entre partículas, Curl (1963), e de relaxação em torno da média, Dopazo e O'Brien (1974), ainda são extensivamente utilizados em simulações de escoamentos turbulentos reativos. Recentemente, novos modelos foram propostos por Subramaniam e Pope (1998) e Sabel'nikov e Gorokhovski (2001), com o principal objetivo de incorporar um maior realismo na descrição do fenômeno de micro-mistura e de assim representar adequadamente sua influência sobre o transporte da PDF.

No presente trabalho um modelo clássico de micro-mistura conhecido como IEM (*Interaction by Exchange with the Mean*) é utilizado, o qual assume uma relaxação linear do escalar para seu valor médio (Dopazo e O'Brien, 1974),

$$\left\langle \Gamma_\alpha \frac{\partial \phi_\alpha}{\partial x_j} \frac{\partial \phi_\alpha}{\partial x_j} \middle| \boldsymbol{\psi} \right\rangle P_\phi(\boldsymbol{\psi}; \mathbf{x}, t) = \Omega_m(\psi_\alpha - \langle \phi_\alpha \rangle) P_\phi(\boldsymbol{\psi}; \mathbf{x}, t), \quad (3-48)$$

onde Ω_m é a frequência de mistura sub-malha fornecida por LES.

Uma vez apresentadas as estratégias de fechamento dos termos abertos, a equação de transporte modelada da PDF do campo escalar escreve-se,

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho(\boldsymbol{\psi}) P_\phi(\boldsymbol{\psi}; \mathbf{x}, t)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} [\rho(\boldsymbol{\psi}) \tilde{u}_j P_\phi(\boldsymbol{\psi}; \mathbf{x}, t)] &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left[(\Gamma + \Gamma_{SGS}) \frac{\partial P_\phi(\boldsymbol{\psi}; \mathbf{x}, t)}{\partial x_j} \right] \\ &+ \frac{\partial}{\partial \psi_\alpha} [\Omega_m(\psi_\alpha - \langle \phi_\alpha \rangle) P_\phi(\boldsymbol{\psi}; \mathbf{x}, t)] - \frac{\partial}{\partial \psi_\alpha} [S_\alpha(\boldsymbol{\psi}) P_\phi(\boldsymbol{\psi}; \mathbf{x}, t)]. \end{aligned} \quad (3-49)$$

Na equação de transporte modelada, a PDF do campo escalar evolui devido a efeitos de convecção e difusão no espaço físico e devido às contribuições da micro-mistura e da taxa de reação química no espaço amostral do campo escalar. Cabe observar que esta equação pode ser integrada no espaço escalar, $\boldsymbol{\psi}$, para se obter os momentos estatísticos do campo escalar. As equações resultantes para o primeiro e segundo momentos estatísticos centrados são idênticas àquelas que podem ser obtidas mediante um processo de filtragem de LES, com exceção de que o termo de reação química aparece de forma fechada e não precisa ser modelado (Colucci et al., 1998).

3.3.3.

Abordagem Lagrangeana da PDF do Campo Escalar

As equações de transporte da PDF conjunta da velocidade e campo escalar e da PDF do campo escalar, apresentadas nas duas últimas seções, são baseadas em referenciais eulerianos, para pontos fixos $\mathbf{x}$ no espaço e para instantes de tempo t . Estas equações apresentam uma alta dimensionalidade, uma vez que elas contêm um grande número de variáveis independentes, tais como, $\mathbf{V}$, ψ , $\mathbf{x}$ e t . Como consequência, o procedimento de solução numérica por meio de métodos de discretização tradicionais torna-se impraticável, visto o alto custo computacional associado à resolução das variáveis independentes necessárias para se representar os processos estocásticos no espaço amostral de velocidade e campo escalar.

Objetivando contornar este problema, a abordagem lagrangeana da PDF do campo escalar é utilizada no presente trabalho mediante a utilização de uma amostra de partículas estocásticas distribuídas no escoamento. Será visto na seção 4.2 que, ao contrário dos métodos tradicionais de discretização, nos quais os requerimentos computacionais variam exponencialmente com a dimensão da PDF, o custo computacional desta abordagem aumenta linearmente com a quantidade de variáveis independentes envolvidas no problema (Pope, 1985).

Na abordagem lagrangeana, as partículas estocásticas correspondem a diferentes realizações do escoamento turbulento reativo, as quais constituem uma representação discreta da PDF euleriana. Cada uma destas partículas transporta seu próprio conjunto de propriedades, isto é, posição no espaço e composição do campo escalar, o qual evolui de acordo com equações diferenciais estocásticas. Para uma grande amostra de partículas, tais equações diferenciais estocásticas fornecem resultados estatísticos equivalentes aos das equações de transporte da PDF euleriana do campo escalar.

Cabe mencionar que o tamanho da amostra das partículas pode exercer um papel fundamental na equivalência dos resultados estatísticos das abordagens euleriana e lagrangeana (Xu e Pope, 1999). Na seção 4.2.4, a qual trata dos métodos de estimativa dos momentos estatísticos, será mostrado que o número finito de partículas utilizado nas simulações proporciona o aparecimento de erros estatísticos, os quais diminuem na razão de $\sqrt{N_p}$, onde N_p é o número de partículas distribuídas inicialmente por volume de controle.

A formulação matemática baseada nas partículas estocásticas permite reproduzir os efeitos dos principais processos característicos das frentes de chamas turbulentas que ocorrem em escalas de comprimento muito pequenas, tais como a difusão molecular, a micro-mistura turbulenta e a expansão térmica oriunda das reações químicas. Em particular, os efeitos da taxa de reação química são reproduzidos sem a necessidade de modelagem. Sendo assim, as equações diferenciais estocásticas que governam a trajetória das partículas no espaço físico, $\mathbf{x}$, e no espaço amostral do campo escalar, $\boldsymbol{\phi}$, escrevem-se (Fox, 2003),

$$d\mathbf{x} = [\tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x}, t) + \langle \mathbf{u}' | \boldsymbol{\phi}, \mathbf{x} \rangle] dt , \quad (3-50)$$

$$d\boldsymbol{\phi} = \langle \boldsymbol{\Theta} | \boldsymbol{\phi}, \mathbf{x} \rangle dt , \quad (3-51)$$

onde $\tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x}, t)$ é o campo de velocidade filtrada calculado por LES, $\langle \mathbf{u}' | \boldsymbol{\phi}, \mathbf{x} \rangle$ é a flutuação de velocidade condicionada que aparece de forma aberta e precisa ser modelada e $\langle \boldsymbol{\Theta} | \boldsymbol{\phi}, \mathbf{x} \rangle$ é o fluxo condicionado médio de difusão e reação química descrito pela Eq. (3-40). A equação de transporte da PDF lagrangeana do campo escalar, $P_{\phi}^*(\boldsymbol{\psi}, \mathbf{x})$, correspondente a estas equações estocásticas é dada por,

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho(\boldsymbol{\psi}) P_{\phi}^*(\boldsymbol{\psi}, \mathbf{x})}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} [\rho(\boldsymbol{\psi}) (\tilde{u}_j + \langle u'_j | \boldsymbol{\psi} \rangle) P_{\phi}^*(\boldsymbol{\psi}, \mathbf{x})] = \\ - \frac{\partial}{\partial \psi_{\alpha}} [\rho(\boldsymbol{\psi}) \langle \Theta_{\alpha} | \boldsymbol{\psi} \rangle P_{\phi}^*(\boldsymbol{\psi}, \mathbf{x})] . \end{aligned} \quad (3-52)$$

Analogamente à abordagem euleriana, Eq. (3-46), o termo de flutuação de velocidade condicionada $\langle \mathbf{u}' | \boldsymbol{\phi}, \mathbf{x} \rangle$ é modelado mediante o uso da hipótese de transporte da PDF no espaço físico por difusão gradiente,

$$\begin{aligned} \langle u'_j | \boldsymbol{\psi} \rangle P_{\phi}^*(\boldsymbol{\psi}, \mathbf{x}) = -\Gamma_{SGS}(\mathbf{x}, t) \frac{\partial P_{\phi}^*(\boldsymbol{\psi}, \mathbf{x})}{\partial x_j} \\ = \left(\frac{\partial \Gamma_{SGS}}{\partial x_j} \right) P_{\phi}^*(\boldsymbol{\psi}, \mathbf{x}) - \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x_j} (2\Gamma_{SGS}) P_{\phi}^*(\boldsymbol{\psi}, \mathbf{x}) . \end{aligned} \quad (3-53)$$

Substituindo-se este resultado na Eq. (3.50), encontra-se a forma final da equação diferencial estocástica que descreve a trajetória das partículas no espaço físico, $\mathbf{x}$,

$$d\mathbf{x} = [\tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x}, t) + \nabla \Gamma_{SGS}(\mathbf{x}, t)]dt + [2\Gamma_{SGS}(\mathbf{x}, t)]^{1/2}d\mathbf{W}(t). \quad (3-54)$$

Nesta equação, o processo de Wiener, $\mathbf{W}(t)$, corresponde a uma variável aleatória Gaussiana com média zero e variância igual a dt (Fox, 2003, Higham, 2001). Este processo modela a natureza aleatória da difusão turbulenta representada pelo segundo termo do lado direito da Eq. (3-53). A evolução de cada partícula ocorre segundo incrementos $d\mathbf{W}(t)$, os quais são estatisticamente independentes. Cabe observar, também, que nesta equação o coeficiente de difusão sub-malha, Γ_{SGS} , é fornecido por LES, de acordo com a Eq. (3-33).

O termo de fluxo condicionado médio de difusão/reação química $\langle \Theta | \phi, \mathbf{x} \rangle$, contém contribuições da difusão molecular e da taxa de reação química. Como visto na seção anterior, o termo de taxa de reação química aparece de forma fechada e não necessita modelagem. O termo de difusão molecular pode ser modelado de forma análoga à abordagem euleriana, mediante a utilização, por exemplo, do modelo de micro-mistura IEM, Eq. (3-48). Deste modo, a forma final da equação diferencial estocástica que descreve a trajetória das partículas no espaço de campo escalar, ϕ , é dada por,

$$d\phi = [\Omega_m(\langle \phi \rangle - \phi) + S(\phi)]dt, \quad (3-55)$$

onde Ω_m é a frequência de mistura sub-malha fornecida por LES.

Nota-se que o modelo IEM assume uma relaxação linear do escalar em torno de seu valor médio. No espaço amostral escalar, ψ , as partículas deslocam-se em direção a média, $\langle \phi \rangle$, com velocidade proporcional a sua distância de $\langle \phi \rangle$ neste espaço amostral. Ou seja, as partículas convergem para posição $\psi = \langle \phi \rangle$ quando $t \rightarrow \infty$. Uma vez que este modelo não contém nenhuma informação correspondente aos gradientes dos escalares, a PDF sempre mantém sua forma original (Pope, 1985).

Como mencionado anteriormente, a modelagem do termo de micro-mistura caracteriza uma área de pesquisa a parte no âmbito dos métodos de transporte da PDF. Atualmente, os principais desenvolvimentos nas equações de transporte da PDF estão relacionados à melhoria do realismo físico destes modelos. Na seção seguinte, apresenta-se uma breve discussão sobre as implicações da escolha do modelo de micro-mistura utilizado neste trabalho.

3.3.3.1. Modelo de Micro-Mistura

Os modelos baseados em função densidade probabilidade transportada são, a princípio, aplicáveis para escoamentos a qualquer número de Damköhler. As equações de transporte da PDF levam em consideração os principais processos físicos envolvidos em uma chama turbulenta e podem ser aplicadas para todos os casos de combustão turbulenta pré-misturada. No entanto, a modelagem das influências da dissipação turbulenta no campo escalar, processo este conhecido como micro-mistura, restringe a aplicação generalizada de tais equações.

Nos regimes de chamas dobradas e corrugadas, nas situações em que o número de Damköhler é alto, porém finito, a frente de chama turbulenta pode ser representada por uma coleção de chamas com características locais de chamas laminares, constantemente dobradas e corrugadas pelos efeitos da turbulência. A micro-mistura turbulenta exerce grande influência na camada de pré-aquecimento, aumentando a difusividade do campo escalar e modificando a velocidade de propagação destas chamas. No entanto, os gradientes instantâneos dos campos escalares são basicamente controlados pelas reações químicas que ocorrem nas camadas internas das chamas. Desta maneira, a contribuição do termo de micro-mistura na evolução da PDF não pode ser determinada sem que se leve em consideração ambas as influências da dissipação turbulenta e das reações químicas. Qualquer modelo que não considere explicitamente o forte acoplamento entre a dissipação turbulenta e a taxa de reação química não é capaz de descrever satisfatoriamente a influência do termo de micro-mistura no transporte da PDF, quando das configurações de chamas dobradas e corrugadas.

Neste contexto, alguns autores propuseram modelos de micro-mistura que consideram explicitamente o acoplamento entre a dissipação turbulenta e a taxa de reação química para os regimes de chamas citados acima. Dentre estes modelos, destacam-se aqueles propostos por Pope e Anand (1984) e, mais recentemente, por Mura et al. (2003). Este último apresenta um modelo unificado que generaliza a aplicação dos modelos de PDF transportada para qualquer regime de combustão turbulenta pré-misturada.

No entanto, é importante mencionar que, como será visto no Cap. 5, as situações estudadas no presente trabalho são representativas do regime de zona de

reação fina, o qual é caracterizado pelo baixo número de Damköhler e pela existência de chamas espessas e distribuídas. Nestas configurações, os gradientes escalares são controlados predominantemente pela mistura turbulenta, de modo que o termo de micro-mistura pode ser determinado separadamente, sem levar-se em consideração de maneira explícita as influências das reações químicas. Sendo assim, o modelo IEM é utilizado no presente trabalho por sua simplicidade de implementação numérica e por seu baixo custo computacional. Neste cenário, é esperado que a escolha do modelo de micro-mistura, dentre aqueles atualmente disponíveis na literatura, não exerça significativa influência na predição estatística das propriedades escalares da frente de chama turbulenta.

3.4. Acoplamento LES-PDF do Campo Escalar

Como visto nas seções anteriores, as formulações matemáticas dos métodos LES e PDF do campo escalar, usadas neste trabalho, são baseadas em referenciais distintos, sendo a primeira utilizada em um sistema de coordenadas eulerianas e a segunda baseada em partículas lagrangeanas distribuídas no escoamento. A presente seção conclui o capítulo pela descrição das propriedades transportadas entre estes dois referenciais, ilustradas de maneira esquemática na Figura 3.2, e pela apresentação da formulação matemática utilizada.

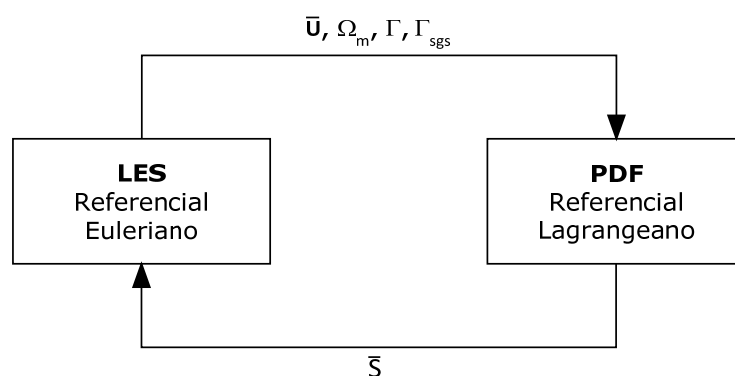


Figura 3.2 Representação esquemática da troca de propriedades transportadas no âmbito da formulação LES, resolvida no referencial euleriano, e pela formulação da PDF do campo escalar, resolvida no referencial lagrangeano.

No referencial euleriano, os campos filtrados de velocidade e pressão são calculados pelas equações de transporte de massa e de quantidade de movimento linear. Em notação indicial, para i, j e $k = 1, 2, 3$, escrevem-se,

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i}{\partial x_i} = 0, \quad (3-56)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{u}_i}{\partial x_j} = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[(\mu + \mu_{SGS}) \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \right) \right], \quad (3-57)$$

onde μ_{SGS} é calculado pela Eq.(3-28).

Os campos de velocidade filtrada, $\tilde{u}_i$, dos coeficientes de difusão, Γ e Γ_{SGS} , e de frequência turbulenta, Ω_m , são fornecidos para as partículas lagrangeanas. Estas informações são necessárias para que estas partículas evoluam no espaço físico e de campo escalar. Mediante algumas hipóteses simplificadoras da cinética química, apresentadas no Apêndice A, o campo escalar pode ser representado por uma temperatura normalizada, conhecida como variável de progresso da reação química, c . As equações estocásticas que descrevem a evolução das partículas no espaço físico, $\mathbf{x}$, e da variável de progresso da reação química, c , são dadas por,

$$d\mathbf{x} = [\tilde{\mathbf{u}} + \nabla(\Gamma + \Gamma_{SGS})]dt + [2(\Gamma + \Gamma_{SGS})]^{1/2}d\mathbf{W}, \quad (3-58)$$

$$dc = [\Omega_m(\langle c \rangle - c) + S(c)]dt. \quad (3-59)$$

Estas equações permitem determinar as estatísticas da variável de progresso da reação química, c , e da taxa de reação química, $S(c)$. Como será mostrado na seção 4.2.4, o termo de taxa de reação química filtrada, $\bar{S}(c)$, corresponde ao primeiro momento estatístico centrado de $S(c)$. Este termo é fornecido para o modelo no referencial euleriano, caracterizando o ciclo interativo existente entre os dois referenciais. Convém notar que a média $\langle c \rangle$ é calculada utilizando-se a Eq. (2.24).

Com as hipóteses simplificadoras das equações de transporte e da cinética química empregadas, as influências da combustão no escoamento são exercidas exclusivamente em função da variação da densidade do fluido, resultante da expansão térmica associada às reações químicas. Neste trabalho, estas influências são determinadas mediante a resolução de uma equação de transporte da variável de progresso da reação química filtrada, $\tilde{c}$, no referencial euleriano,

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{c}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{c}}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\bar{\rho} (\Gamma + \Gamma_{SGS}) \frac{\partial \tilde{c}}{\partial x_j} \right] + \bar{S}(c), \quad (3-60)$$

onde Γ_{SGS} é calculado pela Eq. (3-33) e o termo de taxa de reação química filtrada, $\bar{S}(c)$, é oriundo do referencial lagrangeano.

Convém ressaltar que os momentos estatísticos da variável de progresso, c , também podem ser obtidos diretamente das equações estocásticas, Eqs. (3-58) e Eq. (3-59), mediante o método de simulação de Monte Carlo. Na seção 4.2.4 será visto que a variável de progresso filtrada, $\tilde{c}$, pode ser obtida mediante o cálculo do primeiro momento estatístico centrado de c .

Assim, com o campo da variável de progresso da reação química obtido, o campo de temperatura filtrada, $\tilde{T}$, é determinado e o novo valor da densidade, $\bar{\rho}$, pode ser calculado mediante uma equação de estado,

$$\bar{\rho} = \frac{p_0}{R\tilde{T}}, \quad (3-61)$$

onde p_0 é uma pressão de referência considerada constante neste trabalho, de acordo com as hipóteses simplificadoras vistas na seção 3.1, e R é a constante dos gases ideais.