

## 5 Resultados e Discussões

Os resultados obtidos pelo método LES-PDF, proposto neste trabalho, e as discussões correspondentes são realizadas no presente capítulo. Inicialmente, a configuração experimental de Moreau (1977) e Magre et al. (1988), escolhida para as comparações com os resultados numéricos, é apresentada em detalhe. Uma estimativa do regime de combustão turbulenta pré-misturada, encontrado neste experimento, é descrito em seguida.

Na segunda parte do capítulo, os resultados das simulações dos casos quimicamente inertes são apresentados, com o objetivo de, primeiramente, verificar a equivalência estatística entre os resultados fornecidos pelos métodos dos volumes finitos e o método de Monte Carlo, em termos do transporte de um escalar passivo inerte. Em seguida, uma breve avaliação do desempenho da paralelização do programa de partículas é elaborada e uma análise detalhada da estrutura do escoamento inerte é realizada. Finalizando esta parte do capítulo, são realizadas comparações com os dados experimentais, em termos do primeiro e segundo momentos estatísticos do campo de velocidade e temperatura e das PDFs da temperatura.

Na terceira parte do capítulo, os resultados das simulações dos casos reativos são discutidos em detalhe. Em um primeiro momento, as influências da turbulência sobre a combustão são mostradas, mediante análises das propriedades e da estrutura das chamas turbulentas. As influências da combustão sobre a turbulência são ilustradas com base em análises das propriedades médias e flutuantes do escoamento. As comparações entre os resultados obtidos e os dados experimentais são apresentadas em termos das evoluções transversais da velocidade média e do rms da flutuação da velocidade, de evoluções transversais da temperatura média e da variância da temperatura, e em termos das PDFs da temperatura.

## 5.1. Banco de Dados Experimentais

Os experimentos em combustão turbulenta pré-misturada são mais escassos do que aqueles que envolvem a combustão turbulenta não pré-misturada (Pitsch, 2006). Em particular, existem poucos trabalhos experimentais na literatura que disponibilizam bancos de dados completos, os quais contenham medições das propriedades do escoamento turbulento e da combustão, que sejam adquiridos em configurações geométricas simples, para todos os regimes de combustão pré-misturada, e que possam ser utilizados na validação de aplicações de LES.

Neste contexto, os estudos experimentais de Moreau (1977), Moreau e Boutier (1977) e Magre et al. (1988) podem ser destacados, uma vez que estes disponibilizam bancos de dados relativamente amplos, os quais são obtidos mediante a utilização de uma seção de testes experimental que possui uma configuração geométrica simples. Embora tais estudos envolvam medições das propriedades da turbulência e da combustão para uma faixa restrita de número de Karlovitz,  $Ka$ , estes são utilizados nas comparações com os resultados numéricos obtidos no presente trabalho, tendo em vista as dificuldades citadas acima e pelo fato do programa *Fluids3d* possuir a limitação de ser capaz de tratar apenas geometrias simples, tais como dutos de seção transversal retangular ou quadrada, com a possibilidade de conter um degrau descendente. Cabe ressaltar que esta limitação pode ser contornada, por exemplo, mediante a utilização da técnica da fronteira imersa, descrita por Silveira-Neto et al. (2003). Este trabalho, fora do escopo do presente estudo, encontra-se atualmente em desenvolvimento.

Os trabalhos de Moreau (1977), Moreau e Boutier (1977) e Magre et al. (1988) possuem um objetivo em comum, o qual é investigar experimentalmente as implicações da interação entre a turbulência e a combustão, mediante medições das propriedades do escoamento turbulento, a altos números de Reynolds, e de uma chama turbulenta pré-misturada de metano e ar. Para isto, estes autores fazem uso da mesma bancada de testes experimental, a qual consiste de um canal de seção transversal quadrada, onde a combustão é iniciada e estabilizada com o auxílio de um escoamento paralelo de gases queimados. A maior diferença entre estes trabalhos é o emprego de diferentes condições de entrada na seção de testes, em termos dos valores de velocidade e dos valores de riqueza da mistura.

A Figura 5.1 mostra, de maneira esquemática, a configuração experimental utilizada. Pela dificuldade de se estabilizar, a temperatura ambiente, a combustão do metano em um escoamento caracterizado por altas velocidades, ou seja, por altos valores do número de Reynolds, o ar é pré-aquecido a uma temperatura de 600 K e introduzido no duto de admissão. A partir da entrada deste duto, o escoamento pode ser dividido em três regiões: (a) do duto principal, (b) do queimador auxiliar, e (c) da seção de testes.

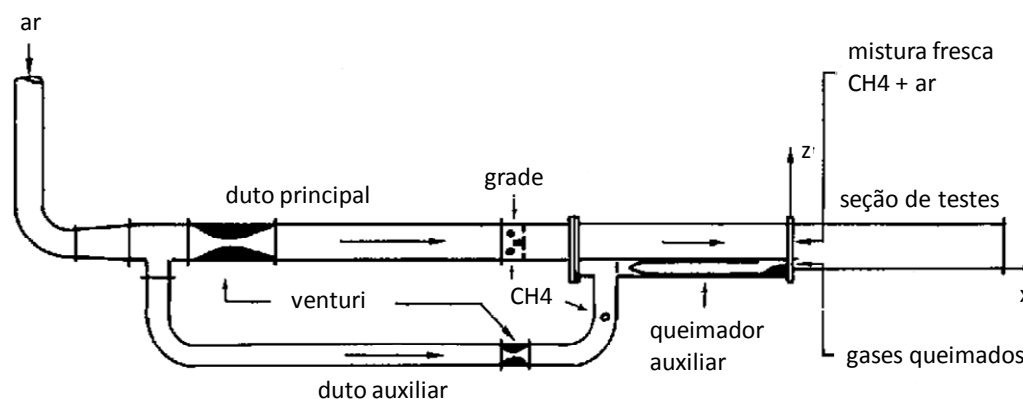


Figura 5.1 Representação esquemática do experimento envolvendo escoamento paralelo de gases frescos e de gases queimados, apresentado por Moreau (1977), Moreau e Boutier (1977) e Magre et al. (1988).

No duto principal, a vazão mássica de ar é medida por um tubo de Venturi, sendo que a velocidade de entrada pode variar de 20 m/s a 130 m/s. O metano é introduzido a montante de uma grade geradora de turbulência, a qual é utilizada para aumentar e homogeneizar a mistura deste com o ar. A riqueza da mistura,  $\phi$ , definida como a relação entre a fração mássica do metano e a do ar, pode variar de 0,5 a 1,2.

No queimador auxiliar, a vazão mássica de ar também é medida por um tubo de Venturi. O metano é introduzido e misturado com o ar a montante de uma câmara de combustão auxiliar, a qual é utilizada na queima da mistura. Na maioria dos experimentos, a temperatura dos gases queimados é da ordem de 2000 K, e a velocidade do escoamento no duto auxiliar é cerca do dobro da velocidade do escoamento no duto principal. A parede que separa o queimador auxiliar do duto principal possui cerca de 1 mm de espessura, na entrada da seção de testes, o que previne a formação de recirculação do escoamento nesta região.

A seção de testes consiste de um canal de seção transversal quadrada e constante, de 100 x 100 mm, com comprimento de 1.300 mm, na qual uma janela transparente de sílica permite a visualização da chama. Esta janela se estende por toda altura do canal, e possui um comprimento de 650 mm, medido a partir da entrada da seção de testes, definindo assim a região onde foram realizadas as medições por meio de técnicas ópticas e fotográficas. A entrada do escoamento na seção de testes consiste dos gases queimados, provenientes do queimador auxiliar, e da mistura fresca, oriunda do duto principal. A seção transversal do queimador auxiliar é de 20 x 100 mm e a do duto principal é de 80 x 100 mm. A combustão é iniciada pelo contato dos gases frescos e dos gases queimados, a partir da entrada da seção de testes, e a chama é estabilizada obliquamente ao eixo longitudinal desta.

Cabe mencionar que é possível obter-se uma alta intensidade de flutuação de velocidade na entrada da seção de testes, a qual pode atingir cerca de 20% da componente longitudinal da velocidade média, mediante a utilização de grades geradoras de turbulência no duto principal. Adicionalmente à alta turbulência na entrada, esta configuração geométrica propicia um elevado nível de turbulência ao longo do escoamento, o qual é produzido pelo desenvolvimento de uma camada cisalhante, resultante da diferença de velocidade acentuada entre os escoamentos oriundos do duto principal e do queimador auxiliar.

Neste contexto, a configuração geométrica em questão permite investigar diferentes aspectos da interação entre a turbulência e a combustão, mediante observações experimentais do comportamento do escoamento turbulento e das chamas. Nos trabalhos de Moreau (1977), Moreau e Boutier (1977) e Magre et al. (1988), estas observações são apresentadas em termos de:

- (a) visualizações das estruturas das chamas e de suas propriedades globais,
- (b) evolução transversal de velocidade média,
- (c) evolução transversal da energia cinética turbulenta, para casos quimicamente inertes e reativos,
- (d) evolução transversal de temperatura média, para casos inertes e reativos,
- (e) PDFs da temperatura, para casos inertes e reativos.

Os resultados obtidos nos moldes destes itens são utilizados para fins de comparação com os resultados numéricos obtidos neste trabalho.

## 5.2. Regimes de Combustão Turbulenta Pré-Misturada

Como visto na seção 5.1, poucos trabalhos experimentais envolvendo a combustão turbulenta pré-misturada disponibilizam medições das propriedades do escoamento turbulento e da combustão, para uma faixa de número de Karlovitz extensa, a qual inclua todos os regimes de combustão turbulenta pré-misturada. Em particular, os trabalhos de Moreau (1977), Moreau e Boutier (1977) e Magre et al. (1988) envolvem medições das propriedades da turbulência e da combustão para uma faixa restrita de número de Karlovitz,  $Ka$ . Por este motivo, antes de apresentar as discussões dos resultados numéricos obtidos neste trabalho, e as comparações com os resultados experimentais, é necessário identificar os regimes de combustão turbulenta pré-misturada, característicos dos experimentos, sobre os quais as análises e as discussões serão fundamentadas.

Neste contexto, Magre et al. (1988) apresenta uma estimativa do regime de combustão turbulenta pré-misturada encontrado em seus experimentos, a qual é baseada nas escalas características de tempo e comprimento do escoamento turbulento e das chamas. Nesta estimativa, as propriedades da turbulência e das chamas turbulentas são medidas experimentalmente, e as propriedades das chamas laminares, de uma mistura de metano e ar, tais como a velocidade,  $S_L$ , e a espessura,  $l_F$ , são aproximadas de acordo com valores típicos encontrados na literatura. Neste trabalho, a estimativa destas últimas é revisada mediante o uso de valores obtidos com o auxílio da ferramenta PREMIX-CHEMKIN (Kee et al., 2006), a qual permite determinar as principais propriedades das chamas laminares utilizando mecanismos detalhados para descrição da cinética química.

O trabalho de Magre et al. (1988) menciona que a velocidade de propagação de uma chama laminar de metano e ar,  $S_L$ , pode ser estimada em 0,5 m/s, para uma riqueza de mistura,  $\varphi$ , igual a 0,8, e sob condições de pressão atmosférica. Esta pode ser uma estimativa adequada, na situação em que a mistura fresca se encontra a temperatura ambiente. No entanto, como mencionado na descrição do experimento, o ar admitido no duto principal é pré-aquecido a uma temperatura de 600 K. Nesta temperatura, a velocidade de propagação da chama é superior àquela obtida a temperatura ambiente. A Figura 5.2 ilustra a variação da velocidade de chama laminar,  $S_L$ , de uma mistura de metano e ar, em função da riqueza desta

mistura,  $\varphi$ , para temperaturas de 300 e 600 K, e a pressão atmosférica. Percebe-se que  $S_L$  é da ordem de 1,2 m/s, para a temperatura de 600 K, e aproximadamente 0,3 m/s para a temperatura de 300 K, sendo ambos os valores correspondentes a  $\varphi$  igual a 0,8.

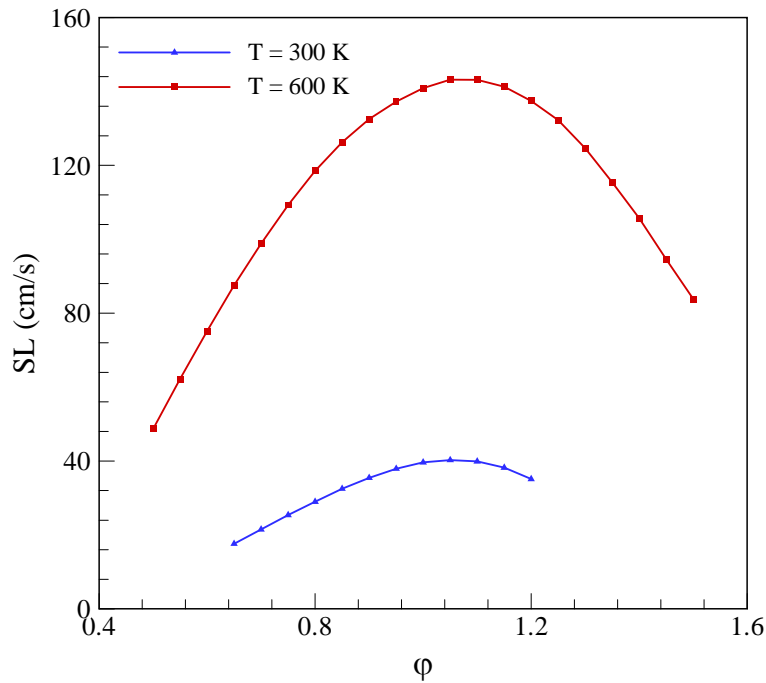


Figura 5.2 Velocidade de uma chama laminar pré-misturada de metano e ar em função da riqueza da mistura, para temperaturas de 300 K e 600 K.

A espessura de chama laminar pré-misturada de metano e ar é estimada com base na Figura 5.3, na qual é traçada a evolução da temperatura ao longo da chama laminar, isto é, entre os gases frescos e os gases queimados, para riqueza de mistura igual a 0,8. Percebe-se que para a temperatura de 600 K, nos gases frescos, a temperatura de combustão adiabática é da ordem de 2200 K, nos gases queimados. Segundo Poinot e Veynante (2005), a espessura da chama laminar pré-misturada de metano e ar,  $l_F$ , pode ser determinada pela relação,

$$l_F = \frac{T_b - T_u}{\max\left(\left|\frac{dT}{dx}\right|\right)}, \quad (5-1)$$

onde  $T_b$  é a temperatura dos gases queimados,  $T_u$  é a temperatura dos gases frescos e  $\max(|dT/dx|)$  é o valor absoluto do máximo gradiente de temperatura entre os gases frescos e queimados.

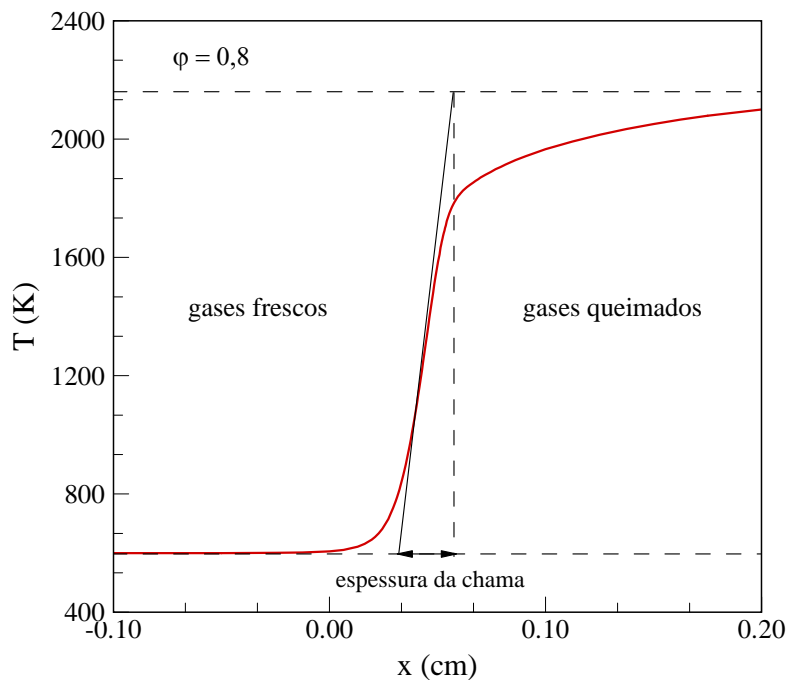


Figura 5.3 Evolução da temperatura em uma chama laminar pré-misturada de metano e ar, ilustrando o esquema utilizado para o cálculo da espessura de chama laminar,  $l_F$ .

No presente trabalho, o cálculo da espessura da chama laminar,  $l_F$ , resulta em 0,26 mm, o qual é praticamente idêntico ao valor de 0,25 mm, reportado no trabalho de Magre et al. (1988). A espessura da camada interna da chama laminar,  $l_\delta$ , será aqui estimada por  $0,1l_F$ , ou seja, em torno de 26  $\mu\text{m}$ . Uma estimativa mais rigorosa de  $l_\delta$ , que considere a taxa de liberação de calor na frente de chama, não será realizada, uma vez que pretende-se apenas utilizar este valor para uma análise de ordem de grandeza. Outros valores relevantes para identificação do regime de combustão turbulenta pré-misturada são a intensidade da flutuação turbulenta,  $u'$ , a qual é medida ao longo de uma seção transversal próxima a entrada da seção de testes, e varia de 5 a 20 m/s, e a escala de comprimento de Kolmogorov,  $\eta$ , a qual varia de 0,07 a 0,14 mm (Magre et al., 1988). A escala integral de comprimento do movimento turbulento,  $l$ , é estimada pelas espessuras mínima e máxima da camada de mistura, cujos valores são da ordem de 10 e 50 mm, respectivamente.

Conhecidos estes valores, as relações necessárias para determinação do regime de combustão turbulenta pré-misturada,  $u'/S_L$  e  $l/l_F$ , e os números de Karlovitz,  $Ka$  e  $Ka_\delta$ , são calculados. A Tabela 5.1 mostra os resultados destes cálculos, para intensidades turbulenta mínima de 5 m/s e máxima de 20 m/s.

Tabela 5.1 Grandezas necessárias para determinação do regime de combustão turbulenta pré-misturada, para intensidades de turbulência mínima e máxima.

Intensidade da Turbulência	$u'$ (m/s)	$u'/S_L$	$l/l_F$	$Ka$	$Ka_\delta$
Mínima	5,0	4,3	40	12,7	0,127
Máxima	20,0	16,7	200	12,7	0,127

O regime de combustão turbulenta pré-misturada, no qual se encontram os experimentos de Magre et al. (1988), é identificado mediante a utilização de um diagrama de Borghi, similar àquele discutido na seção 2.1.2. Este diagrama é mostrado na Figura 5.4, no qual a ordenada corresponde aos valores de  $u'/S_L$  e a abscissa expressa os valores de  $l/l_F$ , estando os dois eixos coordenados em escala logarítmica.

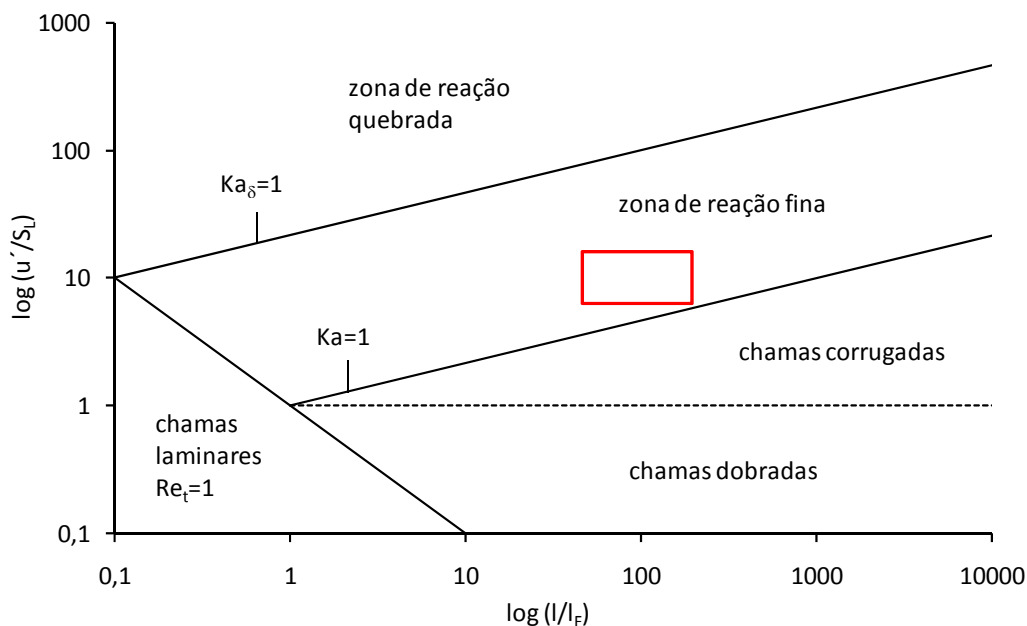


Figura 5.4 Diagrama de Borghi. O retângulo vermelho corresponde ao regime de combustão turbulenta pré-misturada, encontrado nos experimentos de Magre et al. (1988).

Na Figura 5.4, o retângulo vermelho corresponde ao regime de combustão turbulenta pré-misturada, resultante da combinação dos valores de  $u'/S_L$  e  $l/l_F$ . Percebe-se que, para as combinações possíveis destes parâmetros, o experimento se situa no regime de zona de reação fina. Neste regime, a turbulência atua de modo a aumentar a espessura e a velocidade de propagação das chamas, mediante o aumento da difusividade do calor liberado pelas reações químicas, motivo pelo



qual estas chamas são largamente encontradas em aplicações industriais (Pitsch, 2006). Discussões mais detalhadas serão realizadas na seção 5.4, a qual apresenta os resultados das simulações numéricas das chamas, para condições de entrada de intensidade de turbulência máxima.

Um diagrama de regime de combustão turbulenta pré-misturada para LES, similar àquele mostrado na seção 2.3.2, também pode ser elaborado. Neste tipo de diagrama, as escalas integrais de tempo e comprimento da turbulência são substituídas por aquelas características de uma simulação de grandes escalas. Ou seja, a escala de comprimento integral da turbulência é representada pela largura de filtragem, ou espaçamento de malha,  $\Delta$ , e a intensidade da flutuação turbulenta,  $u'$ , é substituída pela flutuação de velocidade sub-malha,  $u'_\Delta$ . A razão  $\Delta/l_F$ , que relaciona o espaçamento de malha com a espessura da chama laminar, é colocada na ordenada, em função do número de Karlovitz baseado nas escalas sub-malha,  $Ka_\Delta = [(u'_\Delta/S_L)^3 l_F/\Delta]^{1/2}$ , como mostra a Figura 5.5.

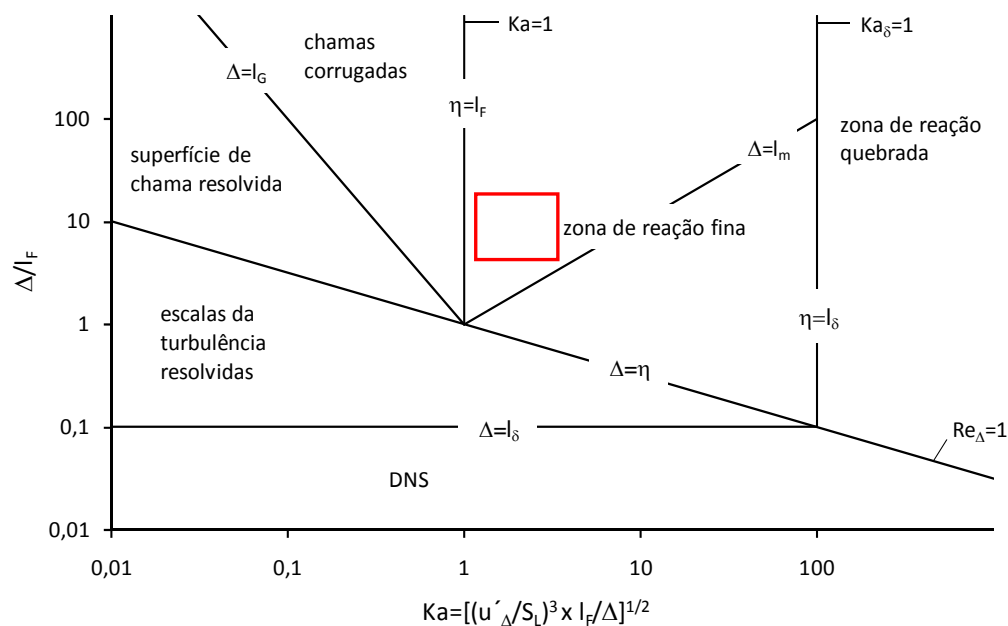


Figura 5.5 Diagrama de combustão turbulenta pré-misturada para LES. O retângulo vermelho indica o regime de combustão turbulenta relativo ao emprego de espaçamento de malha variando de 1 a 5 mm.

Nota-se que a variação do espaçamento de malha,  $\Delta$ , influencia o valor da flutuação da velocidade sub-malha,  $u'_\Delta$ . Adotando a hipótese de que a dissipação

da energia cinética turbulenta,  $\varepsilon$ , é equivalente para as escalas de comprimento integral e filtrada,  $u'_\Delta$  pode ser calculada por,

$$\varepsilon = \frac{u'^3}{l} = \frac{u'_\Delta{}^3}{\Delta} . \quad (5-2)$$

O diagrama da Figura 5.5 permite identificar os regimes de combustão turbulenta pré-misturada para LES, em função da variação do espaçamento de malha utilizado. Além disto, é possível verificar se o refinamento de malha é suficiente para resolver as escalas de comprimento da turbulência e/ou das reações químicas, ou se estas se situam parcial ou integralmente em escalas sub-malha.

Neste trabalho, os espaçamentos de malha típicos variam de 1 a 5 mm, considerando as três direções cartesianas. Neste intervalo, o regime de combustão turbulenta pré-misturada para LES pode ser caracterizado pela região contida no retângulo vermelho da Figura 5.5. Percebe-se que, para qualquer espaçamento de malha adotado neste intervalo, o regime encontrado é o de zona de reação fina, de maneira análoga àquele verificado no diagrama de Borghi, na Figura 5.4.

Convém lembrar que, neste regime, não é cabível a utilização de modelos baseados no conceito de elementos de chama laminar, uma vez que estes adotam a hipótese de cinética química rápida quando comparada com a velocidade do movimento turbulento, característica esta encontrada somente nos regimes de chamas dobradas e corrugadas. Por outro lado, o modelo utilizado neste trabalho, baseado na equação de transporte da PDF do campo escalar, pode ser empregado sem restrições na simulação das propriedades das chamas encontradas no regime de zona de reação fina.

Outra informação importante, fornecida pelo diagrama da Figura 5.5, é que as reações químicas se encontram integralmente nas escalas sub-malha. Nesta situação, espera-se que a contribuição destas na dinâmica do escoamento seja determinada pelo modelo da PDF do campo escalar, mediante o uso da abordagem por partículas estocásticas, descrita no Cap. 3.

Também é importante ressaltar que a espessura instantânea de chama, informada por Magre et al. (1988), é da ordem de 2 a 10 cm. Dado o espaçamento de malha adotado neste trabalho, esta chama será resolvida sobre um conjunto de, no mínimo, 4 volumes de controle, em cada direção cartesiana. Como conseqüência, esta resolução será fina o suficiente para evitar problemas de ordem numérica.

### 5.3. Simulações de Casos Quimicamente Inertes

Para que as simulações de escoamentos turbulentos reativos possam ser realizadas corretamente, é essencial que o escoamento turbulento quimicamente inerte seja representado de maneira adequada. No presente trabalho, os resultados das simulações numéricas são avaliados, primeiramente, em relação aos dados experimentais obtidos sem a presença de reações químicas. Uma vez concluída esta primeira fase de avaliação, uma segunda etapa é realizada envolvendo a presença das chamas.

Neste contexto, o ponto de partida para qualquer simulação numérica é a delimitação da configuração geométrica a ser simulada. Como visto na seção 5.1, o programa *Fluids3d* possui a limitação de ser capaz de tratar apenas geometrias simples, tais como canais de seção transversal quadrada ou retangular. Por este motivo, o domínio computacional utilizado, tanto nas simulações quimicamente inertes, quanto nas de casos reativos, se restringe a geometria da seção de testes, sem incluir o duto principal, o queimador auxiliar e a parede que separa estes dois últimos. A Figura 5.6 ilustra a seção longitudinal da bancada de ensaios, na qual a linha tracejada delimita a configuração geométrica que é utilizada nas simulações.

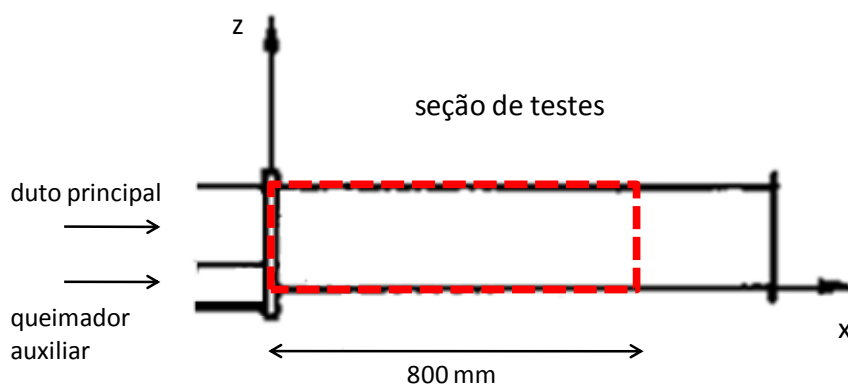


Figura 5.6 Seção longitudinal da configuração geométrica experimental, contendo o duto principal, o queimador auxiliar e a seção de testes, na qual a linha tracejada vermelha delimita a região simulada no presente trabalho.

Percebe-se que o comprimento da região simulada é de 800 mm, medido na direção  $x$ , ao invés de 1.300 mm, que é o comprimento total da seção de testes. Este valor foi escolhido com base em simulações preliminares, as quais foram

realizadas empregando ambos os comprimentos, e mostraram que o deslocamento da fronteira de saída não exerceu influência sobre os resultados numéricos obtidos na primeira metade do canal, região na qual os trabalhos de Moreau (1977), Moreau e Boutier (1977) e Magre et al. (1988) dispõem de dados experimentais. Além disto, constatou-se que o comprimento de 800 mm foi o suficiente para representar de maneira adequada o desenvolvimento e a amplificação da camada de mistura e evacuar corretamente as estruturas turbulentas na saída do domínio. Convém ressaltar, também, que esta redução do comprimento a ser simulado possibilitou a utilização de malhas mais refinadas, sem causar problemas devidos a limitação dos recursos computacionais.

Definido o domínio a ser simulado, é importante mencionar que na maioria das aplicações de LES existe uma necessidade de alargamento dos volumes de controle em regiões de baixa intensidade turbulenta no domínio de cálculo, devido à limitação dos recursos computacionais, o que provoca erros de comutatividade. De acordo com Germano (2000), dependendo do processo de filtragem, os efeitos destes tipos de erros podem corresponder àqueles de uma dissipação espúria. Em particular, se o espaçamento da malha aumenta na direção contrária ao fluxo, o valor do coeficiente de difusão espúrio, associado ao erro de comutatividade, pode se tornar negativo e causar fortes instabilidades numéricas. Por outro lado, se a malha computacional se alarga na direção do fluxo, a dissipação espúria pode causar uma atenuação na solução numérica maior do que a necessária, o que também não é desejável (Sampaio, 2006).

Uma solução viável para prevenir erros desta natureza, é a utilização de uma malha computacional uniforme. Neste trabalho, o domínio computacional possui dimensões de, no máximo, 800 x 100 x 100 mm. Como consequência, as malhas uniformes podem ser utilizadas sem preocupações com a limitação dos recursos computacionais e de maneira que as estruturas turbulentas sejam resolvidas mediante o emprego de um espaçamento de malha adequado.

É importante ressaltar que o emprego da malha uniforme fornece uma maior estabilidade numérica, quando comparada ao emprego de malhas que apresentam excessivo alargamento ou contração ao longo do domínio de cálculo. Todas as simulações realizadas neste trabalho utilizam o esquema numérico de diferenças centradas (CDS), sem a ocorrência de problemas de instabilidades numéricas. Este

esquema é de segunda ordem, menos dissipativo do que os esquemas de primeira ordem, tais como o *upwind* de primeira ordem (Ferziger e Peric, 2002).

Feitas estas considerações, as simulações dos casos quimicamente inertes são realizadas com os objetivos principais de verificar a equivalência estatística dos métodos dos volumes finitos e de Monte Carlo, de analisar o desempenho da paralelização do programa lagrangeano, e de avaliar os resultados das simulações de grandes escalas, mediante comparações destes com os dados experimentais. Estes objetivos e os resultados correspondentes são discutidos separadamente nas três seções a seguir.

### 5.3.1. Equivalência das Abordagens Euleriana e Lagrangeana

O modelo da PDF transportada, empregado no presente trabalho, baseia-se na hipótese de que as equações diferenciais estocásticas, Eqs. (3-54) e (3-55), produzem resultados estatisticamente equivalentes aos da equação de transporte euleriana da PDF do campo escalar, Eq. (3-49), quando resolvidas sobre um número suficientemente grande de partículas lagrangeanas, mediante o uso do método de Monte Carlo. Sendo assim, um pré-requisito para a utilização do modelo da PDF transportada, em conjunto com um modelo baseado em volumes finitos, é a verificação da equivalência estatística entre as duas abordagens, baseadas nos referenciais lagrangeano e euleriano, respectivamente. No presente trabalho, esta verificação é realizada mediante simulações de casos quimicamente inertes, onde o primeiro e segundo momentos estatísticos centrados de um escalar passivo inerte são calculados pelas duas abordagens e comparados em seções transversais localizadas ao longo da direção principal do escoamento.

Para fins destas comparações, uma malha medindo 800 x 50 x 100 mm é empregada, sendo estas dimensões correspondentes ao comprimento (direção  $x$ ), profundidade (direção  $y$ ) e altura (direção  $z$ ), respectivamente. Nestas direções, são utilizados 200 x 10 x 50 volumes de controle, resultando em uma malha computacional uniforme contendo 100.000 volumes de controle, cada um destes com dimensões iguais a 4 x 5 x 2 mm.

Por uma questão de simplicidade, condições de contornos periódicas são adotadas na profundidade do domínio de cálculo, medida na direção  $y$ , e paredes

sem deslizamento são empregadas nas extremidades da altura do canal, a qual é medida na direção  $z$ . As condições de contorno de saída são de derivada nula da componente longitudinal da velocidade, normal a fronteira de saída, e ambas as componentes transversais da velocidade nulas. Como condições de contorno de entrada são prescritas as componentes longitudinais da velocidade média,  $\bar{u}_q$  e  $\bar{u}_p$ , provenientes do queimador auxiliar e do duto principal, as quais são distribuídas uniformemente e iguais a 112 e 57 m/s, respectivamente. Sobre estas componentes são impostas flutuações de 8%. As componentes transversais da velocidade média,  $\bar{v}$  e  $\bar{w}$ , são nulas, e sobre estas são prescritas flutuações de 4% do valor médio entre  $\bar{u}_q$  e  $\bar{u}_p$ .

Como os escoamentos do duto principal, do queimador auxiliar, e a parede que os divide não estão incluídos na malha computacional, é necessário que as condições de contorno de entrada representem a camada de mistura que se forma pela diferença de velocidade entre os dois escoamentos, na entrada do domínio de cálculo. Esta camada de mistura pode ser representada por uma evolução da componente longitudinal da velocidade média na forma de uma tangente hiperbólica,

$$\bar{u}(h) = \frac{\bar{u}_q + \bar{u}_p}{2} + \frac{\bar{u}_q - \bar{u}_p}{2} \tanh \frac{2h}{c_m}, \quad (5-3)$$

onde  $\bar{u}_q$  e  $\bar{u}_p$  são as componentes longitudinais da velocidade média, provenientes do queimador auxiliar e do duto principal, respectivamente, onde  $\bar{u}_q > \bar{u}_p$ ,  $h$  é a altura do domínio de cálculo, e  $c_m$  é a espessura de quantidade de movimento da camada de mistura.

Nos resultados apresentados nesta seção, a espessura da camada de mistura,  $\delta_m$ , utilizada na entrada do domínio de cálculo, é de 10 mm. Este valor foi escolhido de maneira arbitrária, tendo em vista que o objetivo aqui é comparar os resultados numéricos, obtidos pelos métodos dos volumes finitos e de Monte Carlo, sem se preocupar com as comparações com os resultados experimentais. O número de Reynolds,  $Re_\delta = \bar{u}_c \delta_m / \nu$ , é determinado com base na espessura da camada de mistura, onde a velocidade média de convecção,  $\bar{u}_c = (\bar{u}_q + \bar{u}_p)/2$ , é igual a 84,5 m/s e a viscosidade cinemática do ar,  $\nu$ , considerada a temperatura de 600 K, é de  $55 \text{ m}^2/\text{s}$ , resultando em um  $Re_\delta = 1.500$ .

As condições de entrada no domínio de cálculo do escalar passivo inerte, o qual é representado pela variável de progresso, são de  $c = 1,0$ , na entrada dos

gases queimados, que se encontram a temperatura de 2000 K, e de  $c = 0$  na entrada de gases frescos, que se encontram a temperatura de 600 K. A distribuição da variável de progresso é determinada de maneira similar àquela utilizada para a de velocidade, porém, esta variável não apresenta flutuações. Ou seja, a espessura da camada de transição entre os valores da variável de progresso, referentes aos gases queimados e gases frescos, também é de 10 mm. A Figura 5.7 apresenta uma seção longitudinal da malha computacional, com as indicações das condições de contorno empregadas. A evolução transversal da componente longitudinal da velocidade média,  $\bar{u}$ , e da variável de progresso,  $c$ , na fronteira de entrada é mostrada na Figura 5.8.

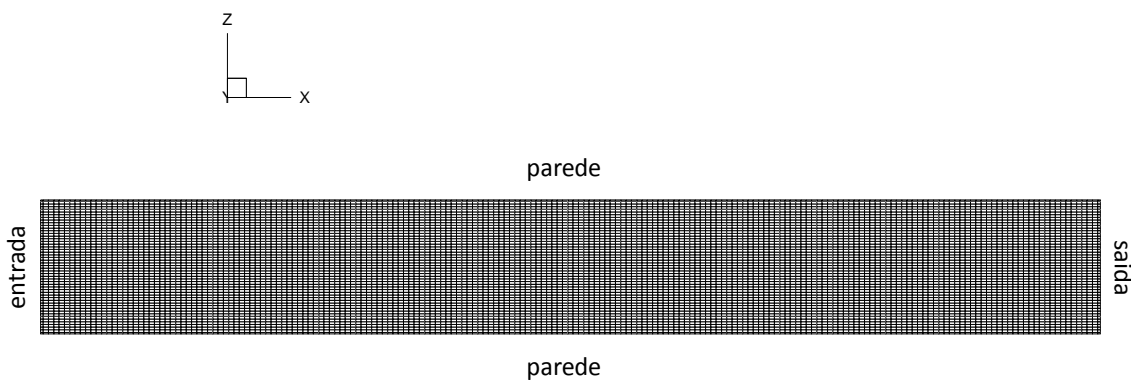


Figura 5.7 Seção longitudinal da malha computacional, com as indicações das condições de contorno, utilizada nas simulações de comparação dos métodos dos volumes finitos e de Monte Carlo.

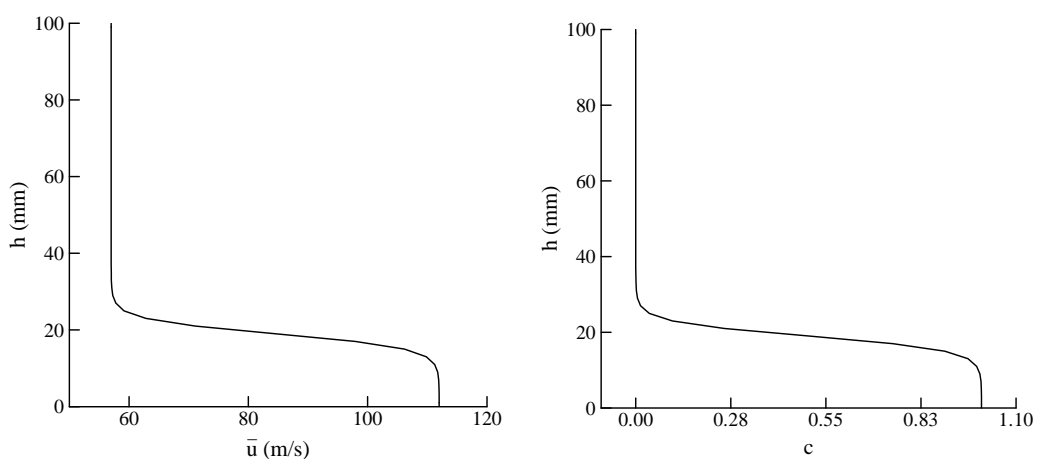


Figura 5.8 Componentes longitudinais da velocidade média e da variável de progresso, impostos como condição de contorno de entrada nas simulações de comparação entre os métodos dos volumes finitos e de Monte Carlo.

Em relação ao método de Monte Carlo, as condições de contorno de entrada das partículas são idênticas às utilizadas na entrada do domínio de cálculo euleriano. Ou seja, cada partícula recebe o valor da variável de progresso armazenado no volume de fronteira dentro do qual esta se encontra. As partículas que deixam o domínio computacional pela fronteira de saída são re-inseridas em uma posição aleatória dentro dos volumes de controle de fronteira de entrada e recebem os valores da variável de progresso de acordo com o procedimento descrito acima. As partículas cujas posições excedem às das paredes da malha computacional são refletidas para o domínio de cálculo, e aquelas cujas posições excedem uma face da fronteira periódica são re-inseridas na face oposta.

Como visto no Cap. 5, o número de partículas por volume de controle,  $N_p$ , é responsável pelo erro estatístico relacionado ao método de Monte Carlo, o qual é proporcional a  $N_p^{-1/2}$ . Neste trabalho, uma análise de sensibilidade é realizada, mediante simulações que empregam 100, 200 e 300 partículas por volume de controle. É observado que, neste intervalo de número de partículas, os resultados referentes aos primeiro e segundo momentos estatísticos da variável de progresso são praticamente idênticos. Por este motivo, e visando uma maior agilidade no processamento dos cálculos, todos os resultados apresentados daqui por diante, os quais envolvam comparações de diferentes métodos ou de resultados numéricos com experimentais, são obtidos mediante o emprego de 100 partículas por volume de controle. Convém mencionar que a utilização de uma ordem de grandeza de número de partículas maior do que esta é inviável em termos de tempo de processamento computacional.

O passo de tempo utilizado nas simulações apresentadas nesta seção é de  $\Delta t = 10 \mu s$ , de forma que o critério CFL não ultrapasse o valor de 0,56. O tempo total de simulação é de  $t = 10 ms$ , equivalente a 10.000 iterações numéricas, sendo que um regime estatisticamente estacionário é obtido após 2.000 iterações. Este período inicial não é utilizado nos cálculos dos momentos estatísticos da variável de progresso, os quais são baseados nas 8.000 iterações sob o regime estatisticamente estacionário.

Uma comparação qualitativa entre os resultados dos métodos dos volumes finitos e de Monte Carlo é apresentada na Figura 5.9, na qual a distribuição da variável de progresso,  $c$ , é mostrada para uma seção longitudinal central ao



domínio de cálculo, no instante de tempo  $t = 100 \text{ ms}$ . É possível verificar a equivalência entre as abordagens, mediante uma análise visual, a qual mostra que o desenvolvimento e a amplificação da camada de mistura acontecem de maneira análoga para ambos os métodos. Da metade do canal para jusante, o método de Monte Carlo fornece uma solução um pouco mais atenuada, porém, consistente com aquela apresentada pelo método dos volumes finitos. Cabe ressaltar que estes são valores instantâneos, os quais apresentam flutuações no tempo, e se limitam a fornecer uma comparação qualitativa entre os métodos.

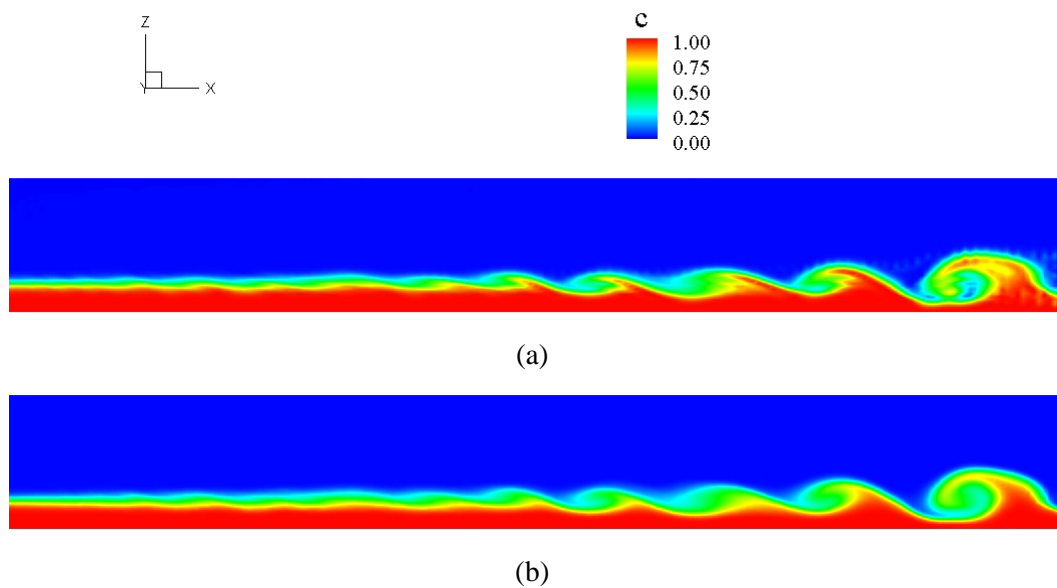


Figura 5.9 Distribuição da variável de progresso,  $c$ , para uma seção longitudinal central ao domínio de cálculo, no instante de tempo  $t = 100 \text{ ms}$ . (a) Método dos volumes Finitos e (b) método de Monte Carlo.

A equivalência estatística entre as duas abordagens é avaliada de maneira quantitativa, mediante comparações do primeiro e segundo momentos estatísticos centrados da variável de progresso,  $c$ , correspondentes a média temporal e a variância, as quais são determinadas utilizando-se os valores instantâneos obtidos nas 8.000 iterações finais. As comparações da média temporal são realizadas para quatro seções transversais, chamadas de seções 1, 2, 3 e 4, as quais são localizadas ao longo do comprimento do canal, nas coordenadas  $x = 42, 122, 251$  e  $351 \text{ mm}$ , respectivamente. A localização destas seções coincide com aquelas utilizadas para as medições experimentais realizadas nos trabalhos de Moreau (1977), Moreau e Boutier (1977) e Magre et al. (1988).

A Figura 5.10 apresenta as comparações da média temporal da variável de progresso,  $\bar{c}$ , calculada pelos métodos dos volumes finitos e de Monte Carlo, para as seções 1, 2, 3 e 4. Nota-se que os resultados são praticamente coincidentes na seção 1, e pequenas diferenças são verificadas nas seções 2, 3 e 4. Uma avaliação quantitativa é apresentada na Tabela 5.2, na qual as diferenças percentuais entre os resultados são colocadas em função da altura das seções transversais,  $h$ , para intervalos de 5 mm. Nota-se que, na seção 2, a diferença percentual máxima é de 6,81%, para  $h = 20 \text{ mm}$ . Nas seções 3 e 4, as maiores diferenças são de cerca de 8%, as quais são verificadas no interior da camada de mistura para as alturas de 20 e 30 mm. Com exceção destes pontos, as diferenças encontradas são menos expressivas, e os resultados coincidentes são predominantes ao longo da altura das seções transversais.

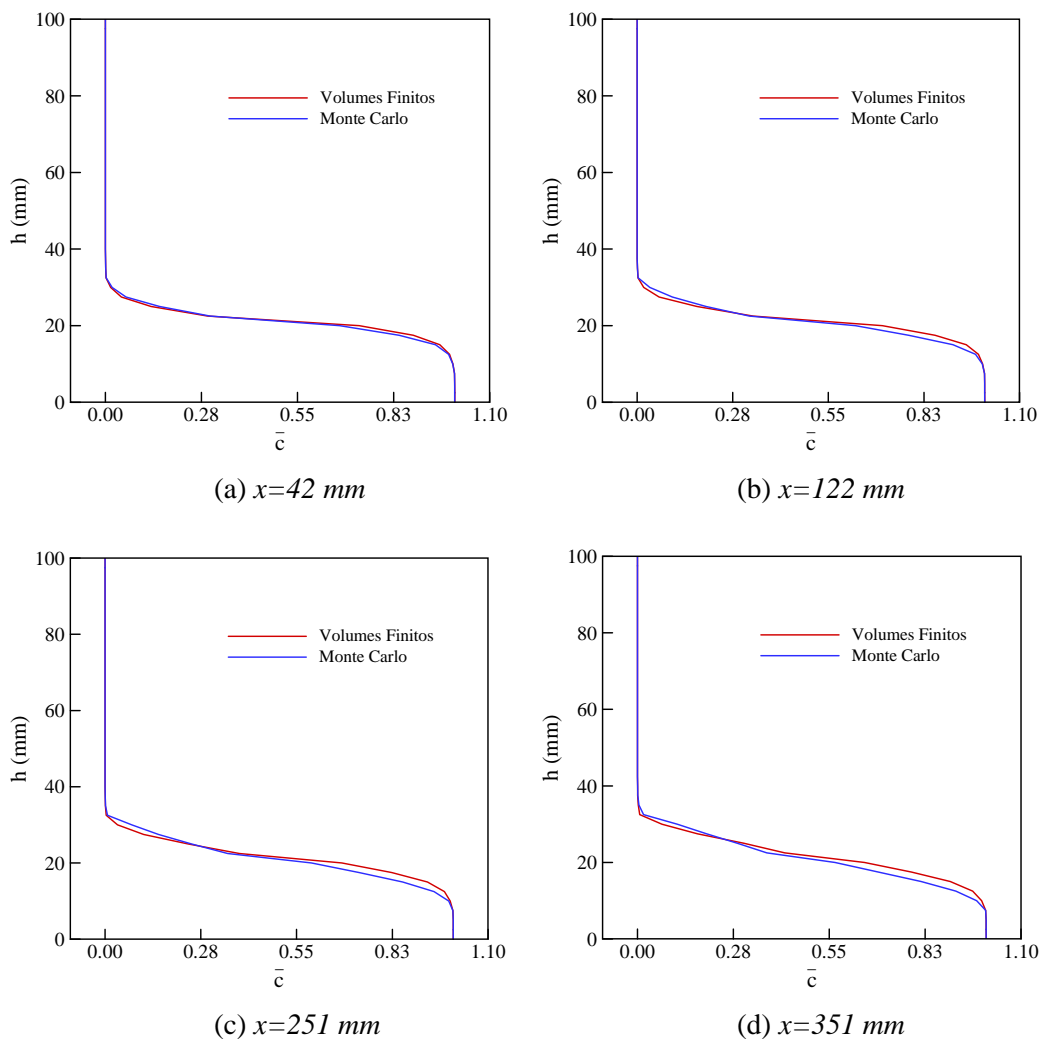


Figura 5.10 Comparação da média temporal da variável de progresso,  $\bar{c}$ , calculada pelos métodos dos volumes finitos e de Monte Carlo, para as seções 1, 2, 3 e 4, localizadas em  $x = 42, 122, 251$  e  $351 \text{ mm}$ , respectivamente.

Tabela 5.2 Diferenças percentuais da média temporal da variável de progresso, calculada pelos métodos dos volumes finitos e de Monte Carlo.

h (mm)	Diferenças de $\bar{c}$ em porcentagem			
	<i>Seção 1</i>	<i>Seção 2</i>	<i>Seção 3</i>	<i>Seção 4</i>
0	0,00	0,01	0,03	0,02
5	0,00	0,00	0,00	0,00
10	0,05	0,06	0,31	1,00
15	0,90	2,79	5,27	6,32
20	4,82	6,81	7,88	7,80
25	4,37	4,33	1,52	2,61
30	0,83	3,92	8,76	8,80
35	0,02	0,02	0,06	0,48
40	0,00	0,00	0,00	0,00
45	0,00	0,00	0,00	0,00
50	0,00	0,00	0,00	0,00
55	0,00	0,00	0,00	0,00
60	0,00	0,00	0,00	0,00
65	0,00	0,00	0,00	0,00
70	0,00	0,00	0,00	0,00
75	0,00	0,00	0,00	0,00
80	0,00	0,00	0,00	0,00
85	0,00	0,00	0,00	0,00
90	0,00	0,00	0,00	0,00
95	0,00	0,00	0,00	0,00
100	0,00	0,00	0,00	0,00

As comparações da variância da variável de progresso,  $\overline{c'^2}$ , são realizadas para as seções 1 e 2 e ilustradas na Figura 5.11. Nota-se uma boa concordância na representação da espessura da camada de mistura, de modo que as diferenças mais acentuadas são encontradas na região central desta camada, onde os valores da variância são extremos. Estas diferenças podem estar relacionadas ao erro estatístico do Método de Monte Carlo, o qual é proporcional ao inverso da raiz quadrada do número de partículas utilizadas inicialmente por volume de controle. Realizando-se uma análise de ordem de grandeza, no caso do emprego de 100 partículas por volume de controle, o erro estatístico admitido é de cerca de 10%. A dimensão dos volumes de controle também exerce influência sobre a precisão das simulações, uma vez que estes contribuem na determinação da densidade de partículas no domínio computacional. Outro fator que pode exercer influência nos resultados é o valor do passo de tempo usado no avanço temporal das equações estocásticas que governam as propriedades das partículas. Nas simulações apresentadas nesta seção, o passo de tempo é adotado de modo a resultar em um

CFL em torno de 0,5. Cabe mencionar que uma análise detalhada da influência da malha computacional e do passo de tempo sobre os resultados do método de Monte Carlo está fora do escopo do presente trabalho.

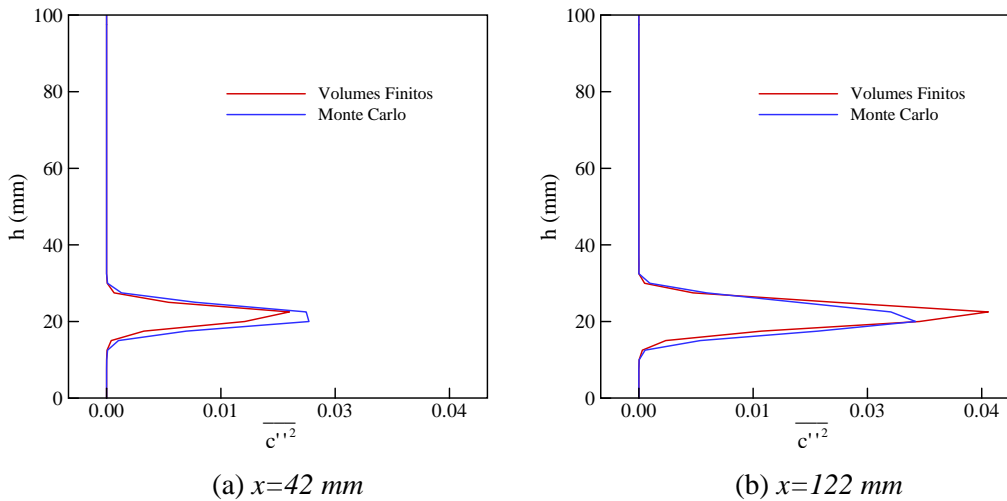


Figura 5.11 Comparação da variância da variável de progresso,  $\overline{c''^2}$ , calculada pelos métodos dos volumes finitos e de Monte Carlo, para as seções transversais 1 e 2, localizadas em  $x = 42$  e  $122\text{ mm}$ , respectivamente.

### 5.3.2.

#### Avaliação da Paralelização do Programa de Partículas

As simulações apresentadas nesta seção objetivam avaliar a aceleração (*speedup*), fornecida pela paralelização do programa de partículas e determinar o número adequado de partículas a ser inicialmente distribuído por processador, o qual será utilizado nas simulações dos casos reativos apresentadas na seção 5.4. Visto que a paralelização do método de Monte Carlo, realizada no âmbito deste trabalho, parte da existência de um algoritmo de paralelização implementado para o método dos volumes finitos, é impossível realizar uma análise da primeira sem levar em consideração os efeitos da segunda. Objetivando manter estes efeitos constantes em todos os resultados das simulações apresentadas na presente seção, estas utilizam a mesma malha e as mesmas condições de contorno empregadas na seção 5.3.1, variando somente o número de partículas inicialmente distribuídas por volume de controle. Assim, são utilizadas 200 e 300 partículas por volume de controle, resultando em totais de 20 e 30 milhões de partículas no domínio de cálculo, respectivamente. Pelo fato destes valores serem muito maiores do que o número de volumes de controle da malha euleriana, é esperado que o custo com-

putacional do método de Monte Carlo seja superior ao do método dos volumes finitos. Conseqüentemente, espera-se que os efeitos da aceleração oriundos da paralelização do primeiro sejam mais evidentes do que aqueles relativos a paralelização do segundo.

A Tabela 5.3 mostra o número de processadores usados nas simulações, o número total de partículas inicialmente distribuídas em cada processador, o tempo de CPU em horas, referentes a 100 iterações, e a aceleração obtida para os casos de 200 e 300 partículas inicialmente distribuídas por volumes de controle. Cabe lembrar que todas as simulações desta tabela utilizam uma malha computacional de 100.000 volumes de controle.

Tabela 5.3 Parâmetros de avaliação da paralelização do programa de partículas.

Número de Partículas por VC	Número de Processadores	Número de partículas por processador (milhões)	Tempo de CPU (horas) para 100 iterações	Aceleração ( <i>speedup</i> )
200	1	20,00	0,907	1,00
	2	10,00	0,489	1,85
	3	6,67	0,391	2,31
	4	5,00	0,382	2,36
300	1	30,00	1,127	1,00
	2	15,00	0,645	1,74
	3	10,00	0,402	2,80
	4	7,50	0,362	3,11
	5	5,00	0,357	3,15

A Figura 5.12 ilustra a evolução da aceleração,  $Sp$ , obtida nas simulações contendo 200 e 300 partículas inicialmente distribuídas por volumes de controle, em função do número de processadores,  $np$ . Percebe-se que em ambos os casos a aceleração obtida é satisfatória até o valor da ordem de 10 milhões de partículas distribuídas por processador. A partir deste valor, o custo computacional da troca de mensagens entre os processadores torna-se elevado e a paralelização não fornece resultados satisfatórios, sendo que com a utilização de cerca de 5 milhões de partículas por processador a aceleração obtida é praticamente constante. Além disto, nota-se que quanto maior o número de partículas inicialmente distribuídas por volume de controle, maior é o valor de aceleração obtido.

Com base nestes resultados, todas as simulações realizadas em paralelo na seção 5.4 utilizam cerca de 10 milhões de partículas inicialmente distribuídas em cada processador. Desta maneira, de acordo com a Tabela 5.3, com o passo de tempo igual a  $\Delta t = 10 \mu s$ , o tempo estimado para uma simulação de 200 ms, ou 20.000 iterações, por exemplo, é de cerca de 100 horas.

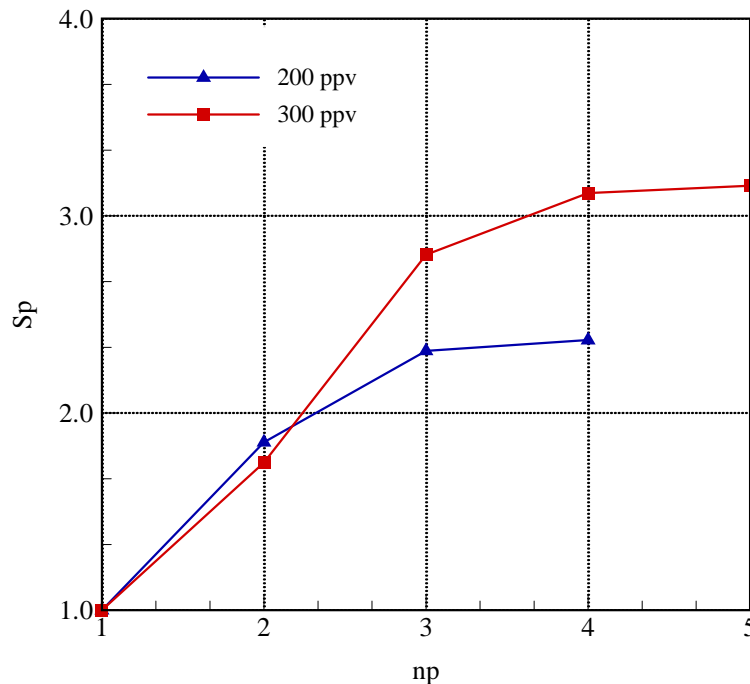


Figura 5.12 Aceleração obtida em função do número de processadores para 200 e 300 partículas inicialmente distribuídas por volume de controle.

Cabe notar que a aceleração demonstrada pela técnica desenvolvida para o programa lagrangeano é bastante medíocre quando comparada com aquela que pode ser obtida com a técnica clássica de decomposição de domínios, aplicada no programa euleriano. As origens deste fraco desempenho não foram investigadas, porém, conforme detalhado no Cap. 4, a paralelização do algoritmo lagrangeano envolve uma busca, realizada sobre todas as partículas, que determina aquelas que serão transportadas para o domínio vizinho. Esta busca e o conseqüente envio das partículas uma-a-uma envolvem um grande *overhead* de comunicação e seriam os primeiros candidatos a uma otimização de desempenho.

Por fim, cabe ressaltar que todas as simulações realizadas em paralelo neste trabalho utilizam o *cluster* do laboratório computacional de fenômenos de transporte do Departamento de Engenharia Mecânica da PUC-Rio, que é constituído de

14 processadores AMD 64 2,1 GHz e 25 processadores Intel Duo Core 2,13 GHz, os quais contém, respectivamente, 2 e 3 GB de memória RAM utilizadas sob um sistema de memória distribuída. O compilador utilizado pelo programa *Fluids3d* é o *Intel Fortran Compiler* (ifc) e o protocolo de transmissão de mensagens do MPI é o MPICH-2 (Gropp et al., 1999a, 1999b, Chergui et al., 2006).

### 5.3.3.

#### **Análise da Estrutura do Escoamento Inerte**

Os resultados das simulações de grandes escalas são primeiramente avaliados mediante uma análise da estrutura do escoamento inerte, utilizando-se malhas com diferentes níveis de refinamento. Para isto, simulações de casos quimicamente inertes são realizadas usando malhas mais refinadas do que aquelas usadas nas seções 5.3.1 e 5.3.2. De acordo com o trabalho de Magre et al. (1988), a escala de comprimento de Kolmogorov,  $\eta$ , medida nos experimentos, é da ordem de 0,07 a 0,14 mm. Com base nestes valores, as escalas de comprimento dos volumes de controle que compõem as malhas escolhidas para estas simulações variam de 1 a 3,2 mm, nas três direções cartesianas. Estas dimensões são adotadas visando garantir a viabilidade do processamento computacional, uma vez que o uso conjunto do método LES com o modelo de PDF transportada exige uma alta capacidade de processamento. Além disto, a utilização de volumes de controle muito menores do que estes fariam com que a resolução das simulações tendesse a de uma DNS, afastando-se assim do objetivo do presente trabalho. Cabe ressaltar que, embora a escala de comprimento característica dos volumes de controle seja uma ordem de grandeza maior do que as escalas de comprimento de Kolmogorov, é esperado que a maior parte do espectro de energia associado ao movimento turbulento seja resolvida explicitamente.

Neste contexto, três malhas uniformes são escolhidas para as simulações, chamadas de 500k, 800k e 1600k, todas elas medindo 800 x 100 x 100 mm, sendo estas dimensões correspondentes às direções  $x$ ,  $y$  e  $z$ , respectivamente. A Tabela 5.4 apresenta o número de volumes de controle empregado nestas malhas e suas dimensões relativas às três direções cartesianas. Percebe-se que as malhas 500k e 800k apresentam volumes de controle com baixo alongamento, sendo o maior va-

lor igual a 1,6/1, encontrado na malha 500k. A malha 1600k apresenta um alongamento máximo de 2,5/1.

Tabela 5.4 Dimensões das malhas utilizadas nas simulações dos casos quimicamente inertes, realizadas para avaliar a qualidade dos resultados de LES.

Malha	Número de volumes de controle nas direções $x, y, z$	Dimensão dos volumes de controle em $x, y, z$ (mm)	Número total de volumes de controle
500k	250 x 40 x 50	3,2 x 2,5 x 2	500.000
800k	320 x 50 x 50	2,5 x 2 x 2	800.000
1600k	320 x 50 x 100	2,5 x 2 x 1	1.600.000

Condições de contorno de paredes sem deslizamento são empregadas nas extremidades da profundidade e da altura destas malhas, medidas nas direções  $y$  e  $z$ , respectivamente. Como nas simulações das seções 5.3.1 e 5.3.2, as condições de saída são de derivada nula da componente longitudinal da velocidade, normal a fronteira de saída, e ambas as componentes transversais da velocidade nulas.

O trabalho de Magre et al. (1988) fornece os valores de entrada no domínio de cálculo da variável de progresso, a qual é distribuída de maneira uniforme, com  $c = 1,0$  na entrada dos gases queimados, para temperatura de 2000 K, e de  $c = 0$  na entrada de gases frescos, para temperatura de 600 K.

A evolução do campo de velocidade na entrada da seção de testes não é fornecida pelos estudos experimentais de Moreau (1977), Moreau e Boutier (1977) e Magre et al. (1988). Tais estudos apresentam a evolução da componente longitudinal da velocidade média e o rms das flutuações da componente longitudinal da velocidade somente para uma seção transversal localizada 39 mm a jusante da entrada da seção de testes. Por este motivo, neste trabalho duas opções de condições de contorno de entrada do campo de velocidade são utilizadas, as quais são chamadas de  $C1$  e  $C2$ , e os resultados correspondentes analisados separadamente. A primeira delas consiste na evolução da velocidade média na forma de uma tangente hiperbólica, sobreposta por flutuações aleatórias normalmente distribuídas, e a segunda é baseada na evolução do campo de velocidade média típica de escoamentos turbulentos desenvolvidos em canais, os quais são provenientes do duto principal e do queimador auxiliar, sobreposta por flutuações aleatórias normalmente distribuídas.



### 5.3.3.1.

#### Descrição das Condições de Contorno de Entrada C1 e Análise dos Resultados Obtidos

As condições de contorno de entrada do campo de velocidade C1 são baseadas na evolução da componente longitudinal da velocidade média para uma seção transversal localizada 39 mm a jusante da entrada da seção de testes, apresentada nas medições de Moreau e Boutier (1977). Tais medições mostram que as componentes longitudinais da velocidade média,  $\bar{u}_p$  e  $\bar{u}_q$ , oriundas do duto principal e do queimador auxiliar, são distribuídas de maneira aproximadamente uniforme, e seus valores são iguais a 65 e 130 m/s, respectivamente. A espessura da camada de mistura é da ordem de 7,5 mm. Uma vez que não há dados experimentais que mostrem a evolução transversal da velocidade média na entrada da seção de testes, as condições de entrada no domínio de cálculo são estimadas mediante a hipótese de que uma camada de mistura autosimilar tem início 5 mm a jusante da entrada da seção de testes e se desenvolve linearmente a partir deste ponto até a seção transversal situada em 39 mm, onde as medições experimentais são disponibilizadas. Desta maneira, é possível estimar a espessura da camada de mistura a ser adotada na entrada do domínio de cálculo pela relação (Pope, 2000),

$$\delta_m = \delta_m^{39} - C_\delta \frac{\bar{u}_q - \bar{u}_p}{\bar{u}_q + \bar{u}_p} (x_{39} - x_5) , \quad (5-4)$$

onde  $\delta_m^{39}$  é a espessura da camada de mistura na coordenada  $x_{39} = 39\text{mm}$ , a qual é da ordem de 7,5 mm,  $C_\delta$  é uma constante empírica igual a 0,2 e  $\delta_m$  é a espessura da camada de mistura na coordenada  $x_5 = 5\text{mm}$ . Substituindo estes valores na Eq. (5-4), o valor resultante de  $\delta_m$  é de aproximadamente 5 mm. As componentes transversais da velocidade média,  $\bar{v}$  e  $\bar{w}$ , são nulas na entrada da seção de testes.

As flutuações da velocidade na entrada do domínio de cálculo são prescritas por flutuações aleatórias que seguem uma distribuição Gaussiana com média zero e variância unitária,  $N(0,1)$ , as quais fornecem estatísticas temporais de segunda ordem que permitem determinar as componentes do tensor de Reynolds,

$$\mathbf{R} = \overline{\mathbf{u}'\mathbf{u}'^T} = \begin{bmatrix} R_{11} & R_{12} & R_{13} \\ R_{21} & R_{22} & R_{23} \\ R_{31} & R_{32} & R_{33} \end{bmatrix} , \quad (5-5)$$

onde  $\mathbf{u}'$  é o vetor das componentes flutuantes da velocidade e a barra superior denota uma média temporal.

O trabalho de Moreau e Boutier (1977) fornece a evolução da componente  $R_{11}$ , para a seção transversal localizada 39 mm a jusante da entrada da seção de testes, e indica que os valores de  $R_{22}$  e  $R_{33}$  são de aproximadamente metade de  $R_{11}$ . Convém notar que a componente  $R_{13}$ , a qual não é fornecida no experimento, desempenha um papel fundamental na taxa de espalhamento da camada de mistura, sendo responsável pela maioria do transporte turbulento da quantidade de movimento na direção  $z$ . Assim, os valores desta componente são determinados mediante o uso da relação ilustrada na Figura 5.13, a qual mostra a razão  $R_{13}/\Delta\bar{u}^2$  em função da espessura da camada de mistura adimensionalizada,  $\xi = h/\delta_m$ , sendo  $\Delta\bar{u}$  a diferença entre  $\bar{u}_q$  e  $\bar{u}_p$ . Esta relação é apresentada, por exemplo, nos trabalhos de Browand e Latigo (1979) e Bruker e Sarkar (2007), a qual é válida para camadas de mistura autosimilares. As componentes  $R_{12} = R_{21}$  e  $R_{23} = R_{32}$  são tomadas como nulas.

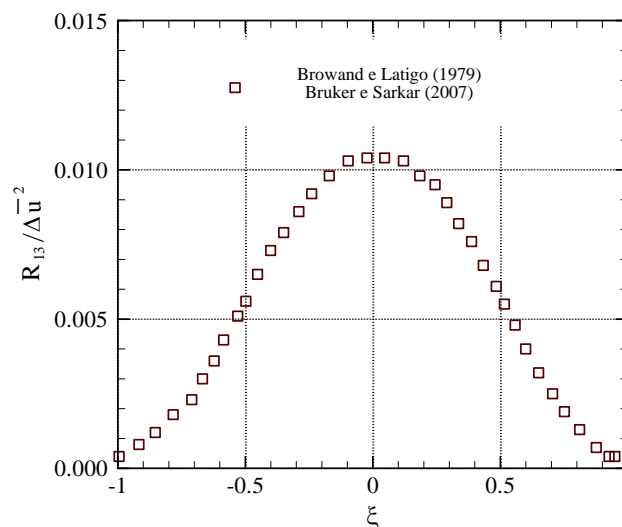


Figura 5.13 Relação da componente  $R_{13}$  do tensor de Reynolds com a velocidade média  $\Delta\bar{u}^2$  em função da espessura da camada de mistura adimensionalizada,  $\xi$ .

Para prescrever as flutuações de velocidade em termos das componentes  $\mathbf{u}'$  na entrada do domínio de cálculo, o tensor  $\mathbf{R}$  é diagonalizado mediante uma transformação unitária (Pope, 2000),

$$\mathbf{A}^T \mathbf{R} \mathbf{A} = \mathbf{\Lambda} , \tag{5-6}$$

onde  $\mathbf{A}$  é uma matriz unitária, cujas propriedades são  $\mathbf{A}\mathbf{A}^T = \mathbf{A}^T\mathbf{A} = \mathbf{I}$ , sendo  $\mathbf{I}$  a matriz identidade, e  $\mathbf{\Lambda}$  é uma matriz diagonal que contém as componentes transformadas do tensor de Reynolds,

$$\mathbf{\Lambda} = \begin{bmatrix} \hat{R}_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \hat{R}_{22} & 0 \\ 0 & 0 & \hat{R}_{33} \end{bmatrix}. \quad (5-7)$$

As componentes da flutuação da velocidade,  $\mathbf{u}'$ , são obtidas por,

$$\mathbf{u}' = \mathbf{A}\mathbf{\Lambda}^{1/2}N(0,1), \quad (5-8)$$

e sobrepostas às componentes da velocidade média prescritas na entrada do domínio de cálculo.

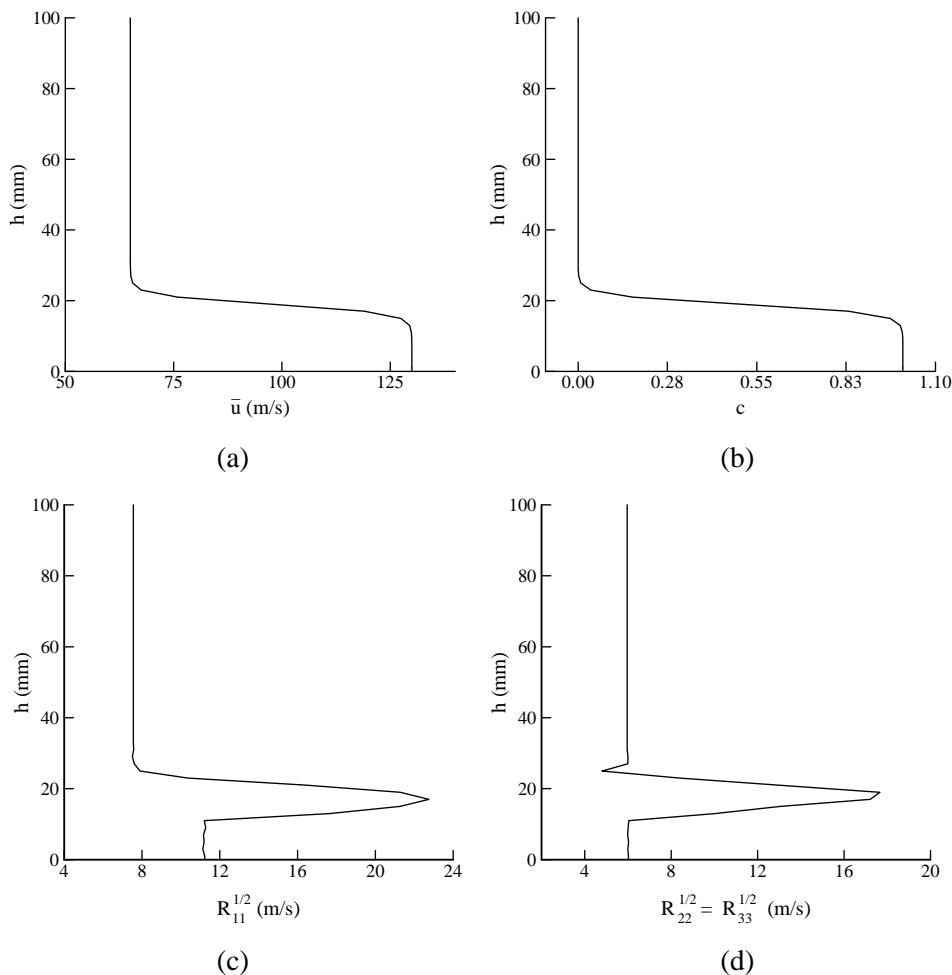


Figura 5.14 Evolução transversal das condições de contorno de entrada C1: (a) componente longitudinal da velocidade média, (b) variável de progresso (c) rms da componente longitudinal da velocidade flutuante, (d) rms das componentes transversais da velocidade flutuante.

Nas simulações que empregam as condições de contorno de entrada  $C1$ , o número de Reynolds, baseado na espessura de entrada da camada de mistura,  $Re_\delta$ , é determinado mediante os valores da velocidade de convecção,  $\bar{u}_c = 97,5 \text{ m/s}$ , da viscosidade cinemática do ar,  $\nu = 55 \text{ m}^2/\text{s}$ , e da espessura da camada de mistura,  $\delta_m = 5 \text{ mm}$ , resultando em  $Re_\delta = 800$ . O passo de tempo utilizado nas simulações é de  $\Delta t = 10 \mu\text{s}$ , sendo que o critério CFL não ultrapassa o valor de 0,5. O tempo total de simulação é de  $t = 500 \text{ ms}$ , o qual é equivalente a 50.000 iterações numéricas. A evolução transversal da componente longitudinal da velocidade média, do rms das componentes longitudinal e transversal da velocidade flutuante e a evolução da variável de progresso, usadas como condição de contorno na entrada do domínio de cálculo, são ilustradas na Figura 5.14.

Uma maneira de se avaliar qualitativamente os resultados das simulações de grandes escalas é verificar o comportamento das interações entre as estruturas turbulentas de diferentes dimensões características presentes no escoamento. No caso de turbulência homogênea e isotrópica, esta interação acontece na forma de uma transferência da energia cinética do movimento turbulento das grandes para as pequenas escalas, nas quais esta é dissipada pelos efeitos da viscosidade. Neste processo, conhecido como cascata de energia (Sagaut, 2005), as estruturas pertencentes a uma faixa intermediária de comprimentos de onda do espectro de energia não sofrem influência da viscosidade, sendo a sua evolução determinada unicamente por efeitos inerciais. De acordo com as hipóteses de Kolmogorov (1941), o espectro de energia desta região assume uma forma universal, o qual obedece a lei de  $-5/3$ ,

$$E(k) = C\varepsilon^{2/3}k^{-5/3} , \quad (5-9)$$

onde  $E(k)$  é o espectro de energia em função do número de onda  $k$ ,  $\varepsilon$  é a taxa de dissipação e  $C$  é uma constante. A região do espectro de energia onde esta equação é válida é chamada de região inercial do espectro. A comparação do espectro resultante das simulações com a lei universal de  $-5/3$  é uma maneira eficiente de avaliar se as simulações de grandes escalas prevêm uma correta dissipação da energia contida em diferentes comprimentos de onda.

O espectro de energia numa determinada posição é calculado como o quadrado do módulo da transformada de Fourier do sinal temporal das componentes de velocidade,

$$S(f) = |u_i(f)|^2 , \quad (5-10)$$

onde  $f$  é a frequência e  $u_j(f)$  a transformada de Fourier da componente  $j$  da velocidade,  $\bar{u}_j(t)$ , a qual é dada por,

$$u_j(f) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \bar{u}_j(t) e^{-i2\pi ft} dt , \quad (5-11)$$

ou, no caso discreto, por

$$u_j(f) = \frac{1}{M_T} \sum_{m=0}^{M_T-1} \bar{u}_j(m\Delta t) e^{-i2\pi f m\Delta t} , \quad (5-12)$$

onde  $\Delta t$  é o intervalo entre duas amostragens consecutivas,  $M_T$  é o número total de amostras do sinal, de modo que o período deste é  $T = M_T\Delta t$ . As frequências para as quais o somatório é calculado são aquelas múltiplas do inverso do período do sinal.

Os espectros temporais do sinal da componente longitudinal da velocidade,  $\bar{u}(t)$ , amostrados na linha de centro do canal, na altura  $h = 25\text{mm}$  e nas coordenadas  $x = 122, 251, 351$  e  $500\text{mm}$ , são mostrados na Figura 5.15. Uma vez que os espectros resultantes das três malhas utilizadas foram praticamente idênticos, os resultados apresentados nesta figura correspondem àqueles obtidos com a malha 1600k.

Nota-se que, em todas as posições analisadas, a faixa de frequências intermediária do espectro é reproduzida em bom acordo com a lei universal de  $-5/3$ . É interessante notar, no entanto, que em  $x = 122\text{mm}$ , região esta influenciada pela escolha das condições de contorno de entrada, o nível de energia é mais baixo do que nas posições situadas mais a jusante. Isto pode ser uma indicação de que a turbulência ainda encontra-se em desenvolvimento nesta região, levando a crer que as flutuações de velocidade, impostas na entrada do domínio de cálculo por flutuações aleatórias normalmente distribuídas, não representam adequadamente a distribuição de frequência da turbulência oriunda do duto principal e do queimador auxiliar.

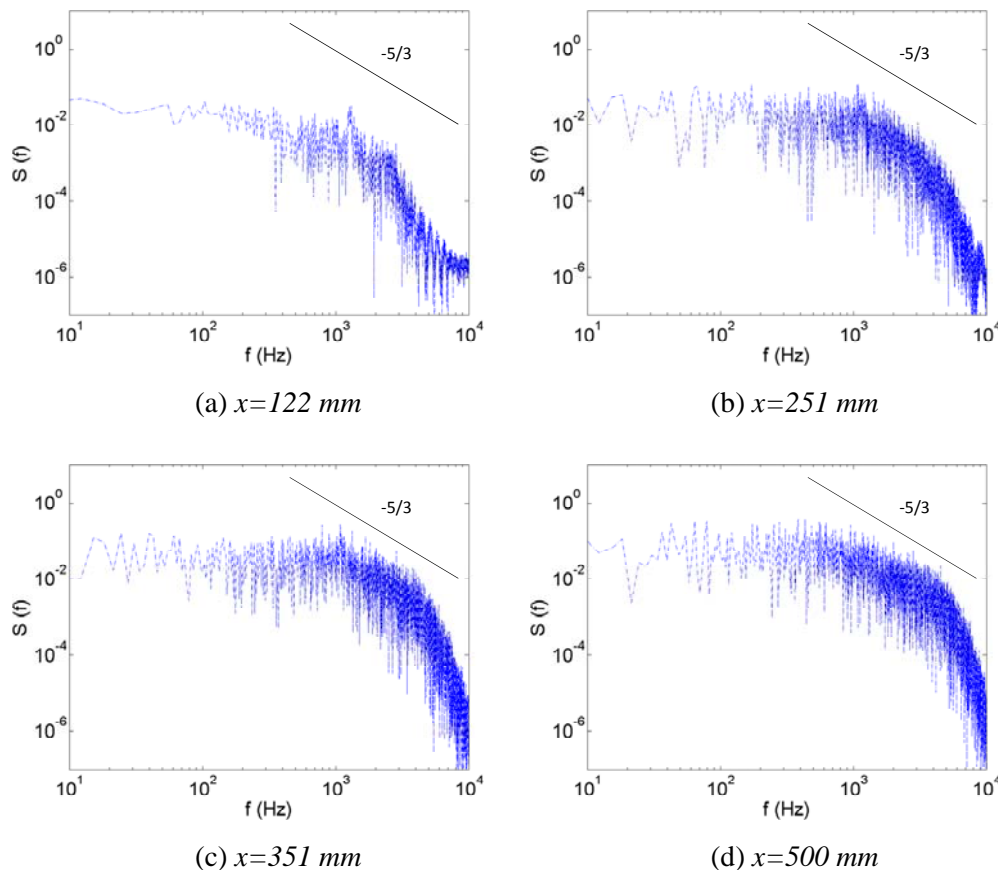


Figura 5.15 Espectros de energia da componente longitudinal da velocidade, obtido com as condições de contorno  $C1$ , para sondas situadas na linha central do canal, na altura de 25 mm e nas coordenadas: (a)  $x = 122$  mm, (b)  $x = 251$  mm, (c)  $x = 351$  mm e (d)  $x = 500$  mm.

Nas três outras posições analisadas, situadas mais a jusante ao longo do canal, nota-se o desenvolvimento da turbulência e uma mudança na inclinação dos espectros nas regiões de frequências mais elevadas. Aparentemente, esta mudança de inclinação indica uma aproximação da região das escalas dissipativas. É possível perceber, também, que a posição mais distante da entrada do domínio de cálculo, em  $x = 500$  mm, é aquela que apresenta a faixa de frequências mais extensa que se comporta de acordo com a lei universal de  $-5/3$ , e também apresenta os maiores níveis de energia, indicando que a turbulência se encontra totalmente desenvolvida nesta região.

O desenvolvimento espacial do movimento turbulento é analisado qualitativamente mediante a distribuição das componentes do tensor de Reynolds ao longo do escoamento. A Figura 5.16 ilustra a distribuição das componentes  $R_{11}$ ,  $R_{13}$  e  $R_{33}$  para uma seção longitudinal central ao canal, obtida com a malha 800k.

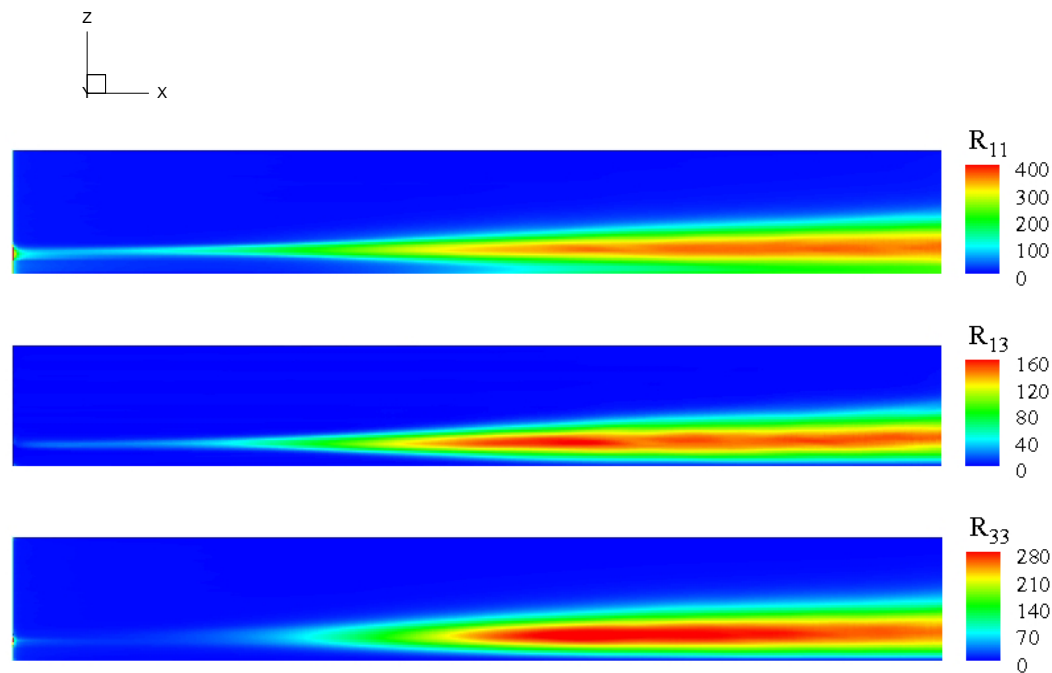


Figura 5.16 Distribuição das componentes do tensor de Reynolds, em  $m^2/s^2$ , obtida com as condições de contorno C1 e a malha 800k, para uma seção longitudinal central ao canal. Em cima, componente  $R_{11}$ , no meio, componente  $R_{13}$ , embaixo, componente  $R_{33}$ .

Nota-se, claramente, a existência de um amortecimento destas componentes, imediatamente a jusante da entrada do domínio. É possível constatar que um comprimento de cerca de um quarto do canal é necessário para que a turbulência se desenvolva. Suspeita-se que este comportamento esteja relacionado à escolha das condições de contorno das flutuações de velocidade de entrada. Neste trabalho, as flutuações de velocidade impostas na entrada correspondem a um espectro de energia de alta frequência uniformemente distribuído, o que faz com que as flutuações sejam amortecidas nos primeiros volumes de controle adjacentes à entrada do domínio de cálculo, de modo que é necessário um comprimento adicional para que as estruturas turbulentas se desenvolvam. Uma solução para esta questão seria adotar condições de contorno de entrada que satisfizessem não somente as estatísticas temporais de segunda ordem do campo de velocidade, como também o espectro de energia turbulenta e a fase entre os modos de flutuação de velocidade.

Convém observar que este comportamento anômalo na entrada do domínio de cálculo pode implicar em resultados numéricos subestimados para taxa de crescimento da camada de mistura na região inicial do canal, uma vez que as flutuações turbulentas na região inicial do escoamento influenciam significati-

vamente os valores deste parâmetro (Stanley, 1997, Stanley e Sarkar, 1999). Em particular, a componente  $R_{13}$  exerce um papel importante no transporte turbulento da quantidade de movimento e do campo escalar na direção normal a principal do canal, na região inicial do escoamento. De acordo com Vreman et al. (1996), esta componente é a principal responsável pela produção de turbulência na camada de mistura, devido aos altos gradientes da componente longitudinal da velocidade média na direção normal ao eixo principal do escoamento, o que pode ser constatado aplicando-se a hipótese de Bousinesq,

$$R_{13} = \overline{u'w'} \approx \mu_{SGS} \left( \frac{\partial \bar{u}}{\partial z} \right) , \quad (5-13)$$

onde observa-se que a componente  $R_{13}$  é proporcional ao coeficiente de difusão sub-malha,  $\mu_{SGS}$ , e ao gradiente da componente longitudinal da velocidade média na direção normal àquela principal do escoamento.

Sendo assim, uma análise da componente  $R_{13}$  é realizada para seções transversais localizadas no plano central do canal, nas coordenadas  $x = 122, 251$  e  $351 \text{ mm}$ , para as três malhas computacionais. Os valores da relação  $R_{13}/\Delta \bar{u}^2$  são avaliados para a espessura da camada de mistura adimensionalizada,  $\xi = h/\delta_m$ , de maneira análoga ao apresentado na Figura 5.13. Para camadas de mistura auto-similares, a evolução da razão  $R_{13}/\Delta \bar{u}^2$  deve estar de acordo com o comportamento mostrado da Figura 5.13.

A Figura 5.17(a) mostra que os valores resultantes da relação  $R_{13}/\Delta \bar{u}^2$  ao longo da camada de mistura são inferiores àqueles apresentados na Figura 5.13, para a seção transversal situada em  $x = 122 \text{ mm}$ . Nota-se que a malha 1600k é aquela que fornece os níveis mais elevados, sendo o valor máximo próximo de 0,008. As outras duas malhas apresentam comportamentos semelhantes entre si, com os valores máximos em torno de 0,007. Este comportamento reforça a hipótese da existência de uma subestimativa da componente  $R_{13}$  na região imediatamente a jusante da entrada do domínio de cálculo. A Figura 5.17(b) mostra que os resultados obtidos pelas três malhas computacionais, para a seção transversal localizada em  $x = 251 \text{ mm}$ , giram em torno de 0,009, indicando a existência de uma amplificação das flutuações da componente longitudinal da velocidade, na direção normal a principal do escoamento, em relação as medições realizadas na seção transversal a montante.



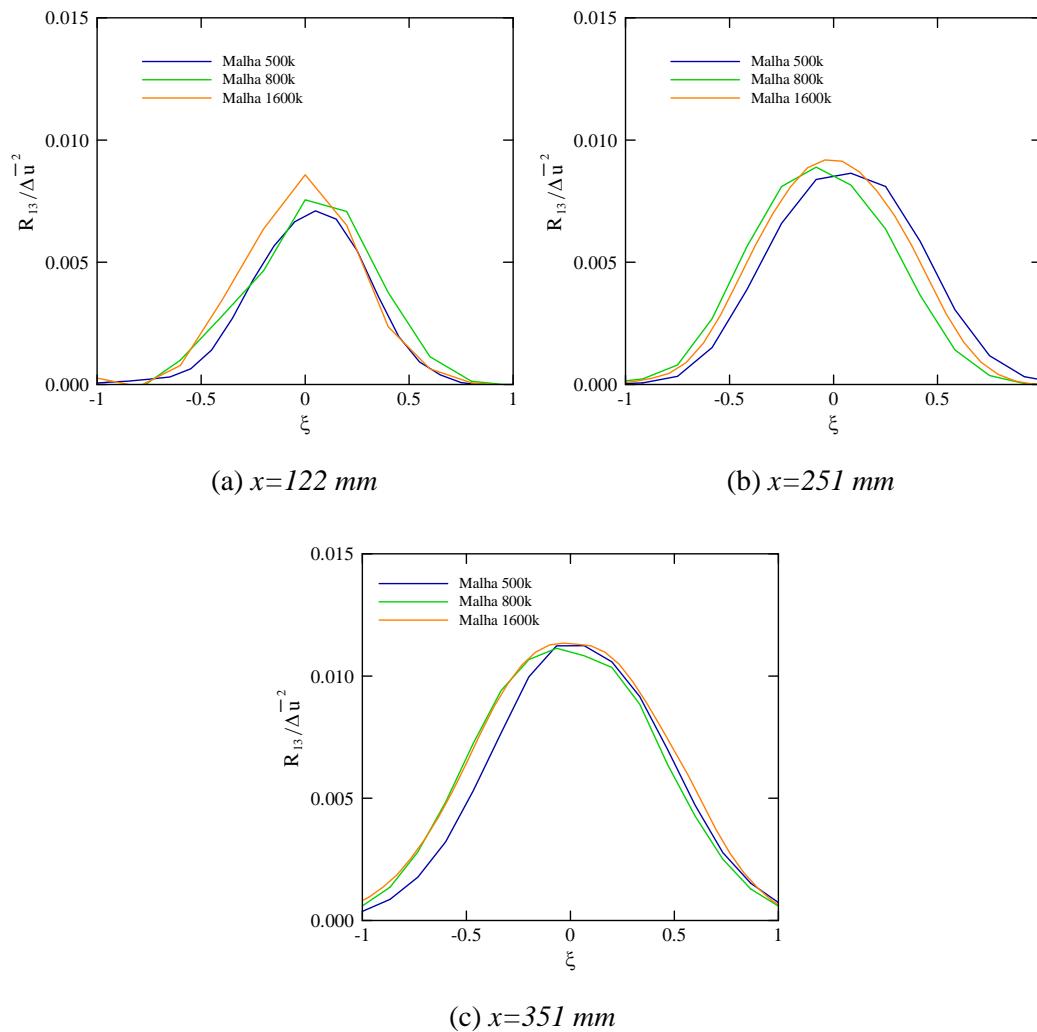


Figura 5.17 Comparação dos resultados em termos da relação  $R_{13}/\Delta \bar{u}^2$  em função da espessura da camada de mistura adimensionalizada,  $\xi$ , obtidos com as três malhas computacionais e com as condições de contorno  $C1$ , para as seções transversais situadas em: (a)  $x = 122 \text{ mm}$ , (b)  $x = 251 \text{ mm}$  e (c)  $x = 351 \text{ mm}$ .

Os resultados para a seção transversal situada em  $x = 351 \text{ mm}$ , mostrados na Figura 5.17(c), indicam um aumento dos valores da relação  $R_{13}/\Delta \bar{u}^2$  ao longo da camada de mistura, estando o valor máximo na ordem de 0,011. É pertinente observar que somente nesta última seção transversal a evolução de  $R_{13}/\Delta \bar{u}^2$  está de bom acordo com aquela ilustrada na Figura 5.13, sendo que as três malhas apresentam comportamentos idênticos. Convém mencionar, também, que a partir da coordenada em torno de  $x = 400 \text{ mm}$  a camada de mistura perde a característica de autosimilaridade devido a interação desta com a parede inferior do canal. Por este motivo, as comparações são realizadas somente para as seções transversais situadas a montante desta coordenada.

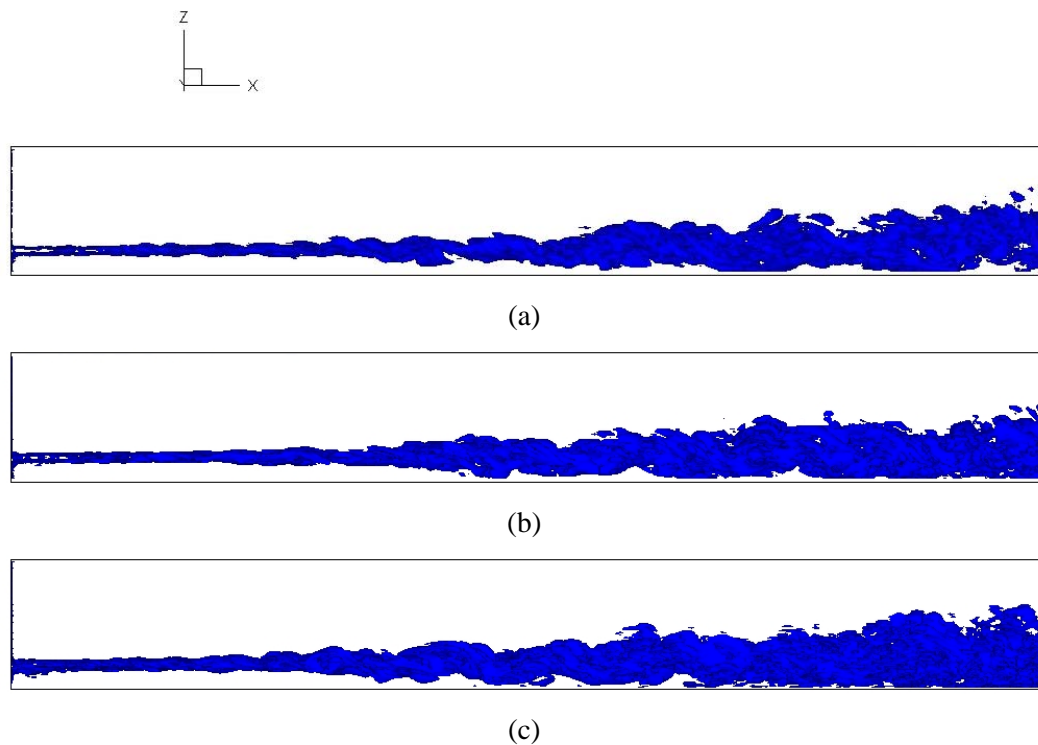


Figura 5.18 Iso-superfícies do módulo da vorticidade, no valor  $|\omega| = 8000 \text{ s}^{-1}$ , obtidas com as condições de contorno de entrada  $C1$ , para o instante de tempo  $t = 500 \text{ ms}$ : (a) malha 500k, (b) malha 800k, (c) malha 1600k.

A influência da malha computacional na taxa de crescimento da camada de mistura é analisada mediante uma comparação visual do desenvolvimento espacial da camada de mistura. Para isto, a Figura 5.18 mostra isosuperfícies do módulo da vorticidade, com  $|\omega| = 8000 \text{ s}^{-1}$ , para as três malhas utilizadas nas simulações, no instante de tempo  $t = 500 \text{ ms}$ . Esta figura sugere que o refinamento de malha não influencia substancialmente a taxa de espalhamento da camada de mistura na região inicial do escoamento. Somente percorrido cerca de um quarto do canal, pequenas diferenças são verificadas na taxa de crescimento para a malha 1600k, indicando que, para esta malha, o início das amplificações das instabilidades que levam ao desenvolvimento da turbulência ocorre um pouco mais a montante, quando comparado com as outras duas malhas menos refinadas.

Por fim, é interessante ressaltar que, de uma maneira geral, os resultados obtidos com as três malhas selecionadas para as simulações, mediante o uso das condições de contorno de entrada  $C1$ , são muito próximos entre si. Esta semelhança é encontrada em termos da representação da estrutura do escoamento quimicamente inerte.

### 5.3.3.2.

#### Descrição das Condições de Contorno de Entrada C2 e Análise dos Resultados Obtidos

As condições de contorno de entrada do campo de velocidade C2 são baseadas na hipótese de que os escoamentos oriundos do duto principal e do queimador auxiliar se encontram totalmente desenvolvidos. Desta forma, a evolução transversal da componente longitudinal da velocidade média na entrada do domínio de cálculo é fornecida por uma distribuição típica de escoamentos turbulentos desenvolvidos em canais, com os valores máximos de  $\bar{u}_q = 130 \text{ m/s}$  e  $\bar{u}_p = 65 \text{ m/s}$ . As componentes transversais da velocidade média,  $\bar{v}$  e  $\bar{w}$ , são nulas na entrada do domínio de cálculo.

É importante notar que, com esta escolha, a espessura da parede que separa o duto principal do queimador auxiliar é representada na entrada do domínio de cálculo. O valor desta espessura é de 1 mm, de acordo com o trabalho de Moreau e Boutier (1977). Como consequência, as simulações que empregam as condições de contorno de entrada C2 são realizadas usando a malha 1600k somente, uma vez que nas malhas 500k e 800k o comprimento mínimo entre os centros dos volumes de controle na direção  $z$  é de 2 mm, fato que impossibilita a representação da espessura da parede de acordo com o valor informado no experimento.

As flutuações da componente longitudinal da velocidade na entrada do domínio de cálculo são prescritas por flutuações aleatórias que seguem uma distribuição Gaussiana com média zero e variância unitária. Estas flutuações são baseadas nas medições experimentais realizadas por Moreau e Boutier (1977), para uma seção transversal localizada em  $x = 39 \text{ mm}$ , as quais mostram intensidades turbulentas médias de 10% e 20% da componente longitudinal da velocidade média, para os escoamentos oriundos do duto principal e do queimador auxiliar, respectivamente. As flutuações de ambas as componentes transversais da velocidade são distribuídas uniformemente e iguais a 10 m/s. A evolução transversal da variável de progresso também é fornecida por uma distribuição uniforme, com  $c = 0$  para o escoamento oriundo do duto principal, e  $c = 1$  para o escoamento proveniente do queimador auxiliar. A Figura 5.19 mostra a evolução transversal da componente longitudinal da velocidade média e da variável de progresso, empregadas como condições de contorno na entrada no domínio de cálculo.

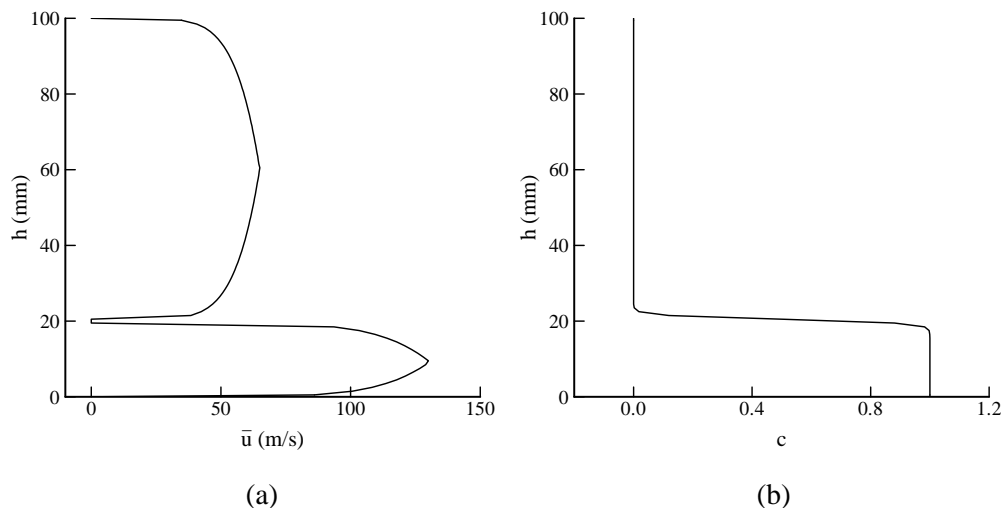


Figura 5.19 Condições de contorno de entrada  $C2$ : (a) evolução transversal da componente longitudinal da velocidade média, (b) evolução transversal da variável de progresso.

Nas simulações que empregam as condições de contorno de entrada  $C2$ , o número de Reynolds do canal,  $Re_{ch}$ , é estimado pela velocidade máxima oriunda do duto principal,  $u_p = 65 \text{ m/s}$ , pela altura do duto principal,  $h_p = 80 \text{ mm}$ , e pela viscosidade cinemática do ar a temperatura de  $600 \text{ K}$ ,  $\nu = 55 \text{ m}^2/\text{s}$ , resultando em um  $Re_{ch} = 94.540$ . O passo de tempo empregado nas simulações é de  $\Delta t = 10 \mu\text{s}$ , sendo que o critério CFL não ultrapassa o valor de  $0,5$ . O tempo total de simulação é de  $t = 500 \text{ ms}$ , o qual equivale a  $50.000$  iterações numéricas.

A Figura 5.20 ilustra os espectros temporais do sinal da componente longitudinal da velocidade, amostrados na linha de centro do canal, nas coordenadas  $x = 122, 251, 351$  e  $500 \text{ mm}$ . De maneira análoga aos resultados obtidos com as condições de contorno  $C1$ , apresentados na seção 5.3.3.1, nota-se que o nível de energia obtido para a posição  $x = 122 \text{ mm}$  é mais baixo do que aqueles apresentados nas posições situadas mais a jusante, indicando a possibilidade da existência de um amortecimento das flutuações introduzidas na entrada do domínio de cálculo e sugerindo que a turbulência ainda encontra-se em desenvolvimento nesta região. Para as outras três posições analisadas mais a jusante ao longo do canal, a faixa de frequências intermediárias do espectro de energia é reproduzida de bom acordo com a lei universal de  $-5/3$ , sendo que todas elas exibem uma mudança de inclinação na região de frequências mais elevadas, o que pode estar relacionado a uma aproximação da região das escalas dissipativas.

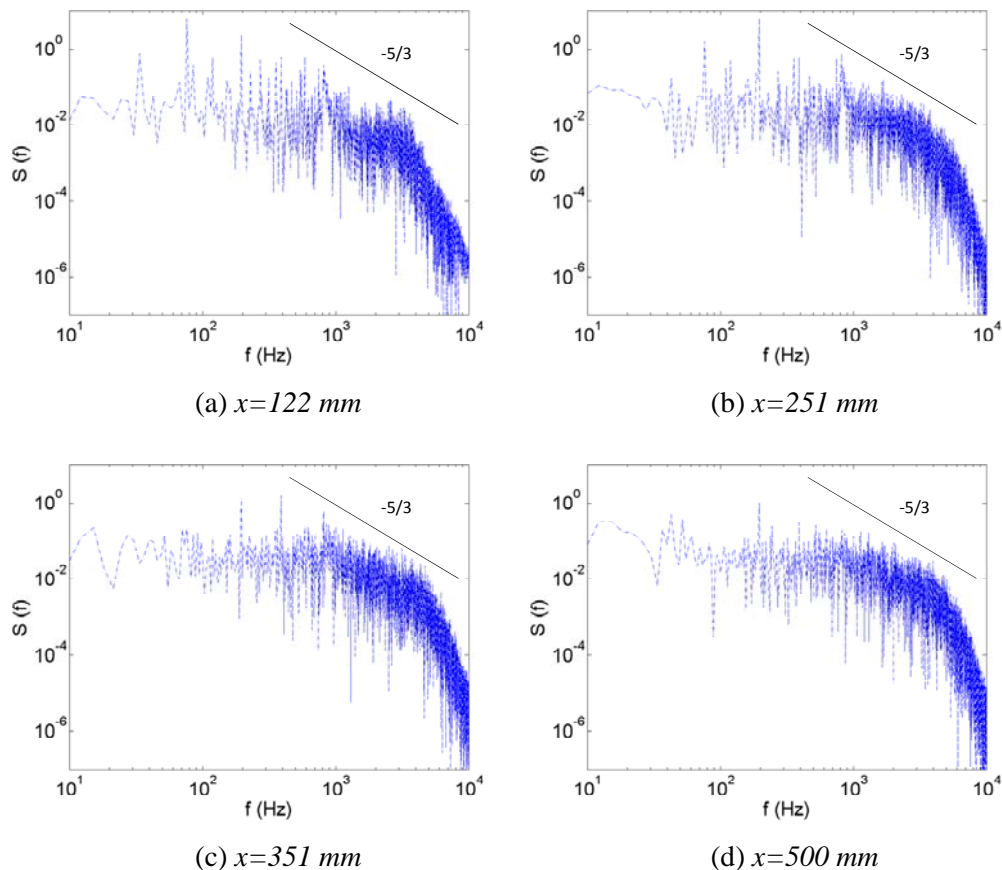


Figura 5.20 Espectros de energia da componente longitudinal da velocidade, obtidos com as condições de contorno  $C2$ , para sondas situadas na linha central do canal, na altura de 25 mm e nas coordenadas: (a)  $x = 122\text{mm}$ , (b)  $x = 251\text{mm}$ , (c)  $x = 351\text{mm}$  e (d)  $x = 500\text{mm}$ .

O desenvolvimento espacial do movimento turbulento é analisado mediante a distribuição das componentes  $R_{11}$ ,  $R_{13}$  e  $R_{33}$  do tensor e Reynolds, apresentada na Figura 5.21. Nota-se que os fortes gradientes da componente longitudinal da velocidade na direção  $z$ , impostos na entrada do domínio de cálculo, resultam em uma intensa atividade turbulenta na região da parede que separa os escoamentos oriundos do duto principal e do queimador auxiliar. Este movimento turbulento acontece imediatamente a jusante da entrada do domínio de cálculo, ao longo de cerca de 10 mm, sendo amortecido em seguida, na medida em que o escoamento avança longitudinalmente no canal. A partir deste amortecimento, um comprimento da ordem de 100 mm é necessário para que a componente  $R_{11}$  do tensor de Reynolds se desenvolva, e aproximadamente um quarto do canal é percorrido até que as componentes  $R_{13}$  e  $R_{33}$  voltem a apresentar valores mais elevados na região da camada de mistura.

É interessante notar que as atividades turbulentas mais intensas estão concentradas na região de influência da camada de mistura, na qual os gradientes da componente longitudinal da velocidade na direção  $z$  são acentuados. Esta região se restringe à metade inferior do canal, ao longo de todo seu comprimento. Na metade superior do canal, os gradientes da componente longitudinal da velocidade na direção  $z$  são menores, e os níveis de turbulência são bastante inferiores.

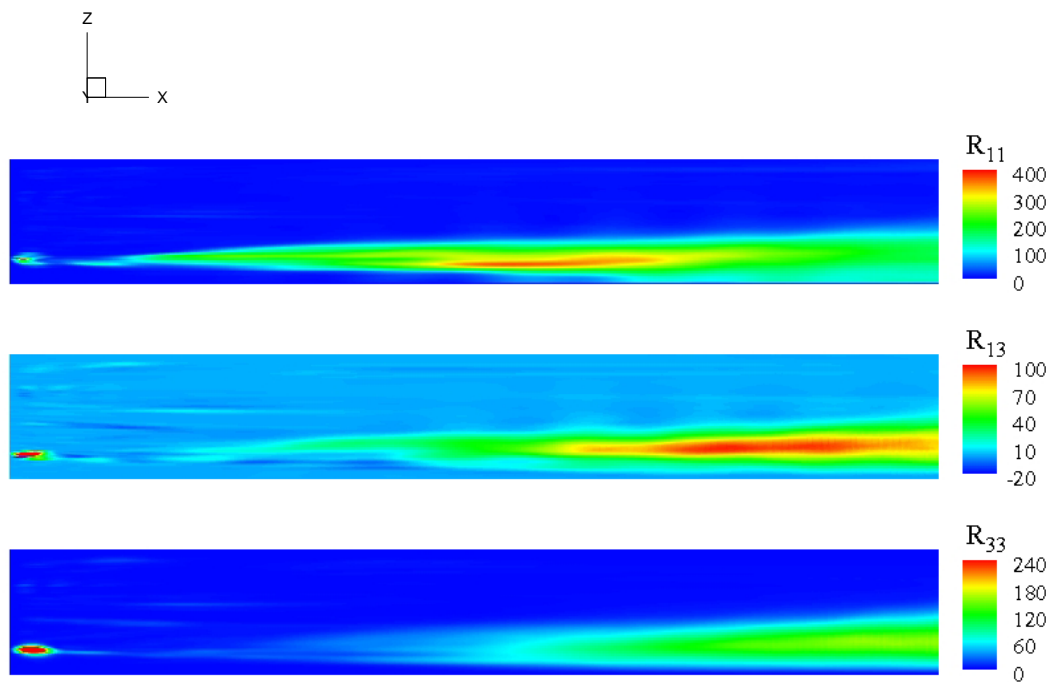


Figura 5.21 Distribuição das componentes do tensor de Reynolds, em  $m^2/s^2$ , para uma seção longitudinal central ao canal, obtida com as condições de contorno de entrada  $C2$ . Em cima, componente  $R_{11}$ , no meio, componente  $R_{13}$ , embaixo, componente  $R_{33}$ .

O comportamento da componente  $R_{13}$  do tensor de Reynolds é analisado mediante a evolução da razão  $R_{13}/\Delta\bar{u}^2$  em função da espessura da camada de mistura adimensionalizada,  $\xi$ , para seções transversais situadas em  $x = 122, 251$  e  $351 \text{ mm}$ , como mostra a Figura 5.22. Percebe-se que, para a seção transversal localizada em  $x = 122 \text{ mm}$ , os valores máximos desta relação giram em torno de 0,002. De fato, ao longo de toda a espessura da camada de mistura, os valores obtidos são muito inferiores aos fornecidos na Figura 5.13, o que confirma a subestimativa de  $R_{13}$  na região inicial do canal. Os resultados obtidos na seção transversal situada em  $x = 251 \text{ mm}$  apresentam um aumento considerável da relação  $R_{13}/\Delta\bar{u}^2$ , em relação aos valores obtidos na seção transversal a montante, sendo

que os valores máximos giram em torno de 0,008. Na seção transversal localizada em  $x = 351 \text{ mm}$ , os valores máximos obtidos são da ordem de 0,011. Da mesma forma que acontece com as condições de contorno de entrada  $C1$ , a evolução da relação  $R_{13}/\Delta\bar{u}^2$  está de acordo com aquela apresentada na Figura 5.13 somente na seção transversal localizada mais a jusante.

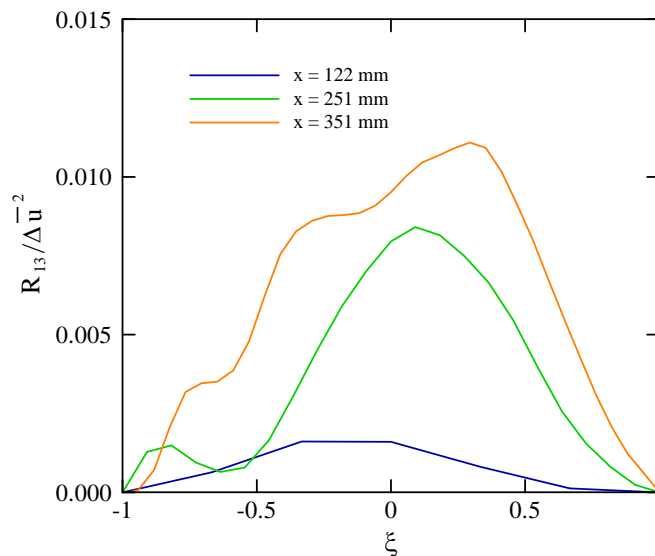


Figura 5.22 Evolução da relação  $R_{13}/\Delta\bar{u}^2$  em função da espessura da camada de mistura adimensionalizada,  $\xi$ , obtidas com as condições de contorno  $C2$  e para as seções transversais localizadas nas coordenadas  $x = 122, 251$  e  $351 \text{ mm}$ .

Convém ressaltar que os resultados obtidos com o uso das condições de contorno de entrada  $C2$ , em termos da distribuição das componentes do tensor de Reynolds, refletem um comportamento análogo ao dos resultados alcançados com o emprego das condições de contorno de entrada  $C1$ . Ou seja, em ambos os casos, as flutuações prescritas na entrada do domínio de cálculo são amortecidas na região inicial do canal. Em particular, na região do escoamento proveniente do duto principal, estas flutuações são propagadas com baixa intensidade, na medida em que o escoamento avança de montante a jusante. Na região da camada de mistura, existe a necessidade de um comprimento de cerca de um quarto do canal para que o movimento turbulento se desenvolva. A princípio, este comportamento pode estar relacionado com a técnica simplificada de geração de condições de contorno de entrada turbulentas utilizada no presente trabalho. Discussões mais detalhadas envolvendo o comportamento das propriedades da turbulência são apresentadas na seção a seguir.

### 5.3.4. Comparações com Dados Experimentais

Nesta seção, a qualidade dos resultados das simulações de grandes escalas é avaliada de maneira quantitativa, mediante comparações dos resultados numéricos obtidos com os dados experimentais de Moreau e Boutier (1977) e Magre et al. (1988), em termos de:

- (a) evoluções transversais da componente longitudinal da velocidade média,
- (b) evoluções transversais do rms da componente longitudinal da velocidade flutuante,
- (c) evoluções transversais da temperatura média,
- (d) evoluções transversais da variância da temperatura,
- (e) PDFs da temperatura.

As comparações são realizadas mediante o uso das malhas apresentadas na Tabela 5.4 e as condições de contorno são idênticas as utilizadas na seção 5.3.3. Os resultados obtidos mediante o emprego das condições de contorno de entrada *C1* e *C2* são analisados separadamente, com o objetivo principal de identificar qual condição de entrada do campo de velocidade fornece a melhor descrição do escoamento inerte em relação aos dados experimentais. Cabe ressaltar que a descrição adequada do escoamento quimicamente inerte, em particular do comportamento quantitativo das propriedades da turbulência, é de grande importância para o sucesso das simulações dos casos reativos, uma vez que, como mostrado nos Caps. 2 e 3, as configurações das chamas turbulentas pré-misturadas dependem da interação existente entre a turbulência e a combustão.

#### 5.3.4.1. Resultados Obtidos com as Condições de Contorno de Entrada *C1*

A evolução transversal da componente longitudinal da velocidade média, para uma seção localizada no centro do canal e na coordenada  $x = 39 \text{ mm}$ , obtida mediante o uso das condições de contorno *C1*, é ilustrada na Figura 5.23. Nota-se que os resultados obtidos pelas três malhas apresentam bom acordo com os dados experimentais. Esta boa concordância sugere que o escalonamento da espessura da camada de mistura, realizado de acordo com a Eq. (5-4), permite uma estimativa adequada do campo de velocidade média na região inicial do canal.



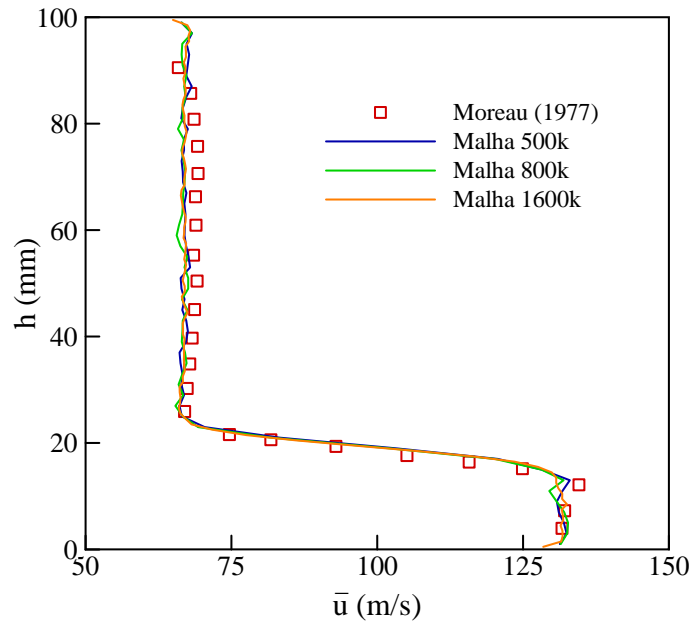


Figura 5.23 Evolução da componente longitudinal da velocidade média na seção transversal localizada em  $x = 39 \text{ mm}$  para condições de contorno de entrada C1.

As Figuras 5.24(a) a (f) ilustram a evolução transversal do rms da componente longitudinal da velocidade flutuante e da taxa de turbulência média, relativa a componente longitudinal da velocidade, para seções transversais localizadas no plano central do canal, nas coordenadas  $x = 39, 251$  e  $438 \text{ mm}$ .

As Figuras 5.24(a) e (b) mostram que os valores calculados de flutuação turbulenta e da taxa de turbulência são inferiores àqueles obtidos no experimento para a seção transversal situada em  $x = 39 \text{ mm}$ . Na região do escoamento proveniente do duto principal, os resultados das simulações mostram uma intensidade turbulenta média de 5%, enquanto os valores medidos no experimento são da ordem de 10%. Os valores calculados do rms da componente longitudinal da velocidade flutuante são da ordem de 4 m/s, ao passo que os valores experimentais são de cerca de 8 m/s.

Em relação a região do escoamento influenciada pela camada de mistura, os resultados calculados numericamente são da ordem de 50% dos valores experimentais. Os primeiros mostram valores máximos da intensidade turbulenta média ao redor de 12%, enquanto que os segundos estão na faixa de 22%. Os valores máximos calculados do rms da flutuação da velocidade são de 13 m/s, enquanto os valores máximos medidos experimentalmente giram em torno de 21 m/s.

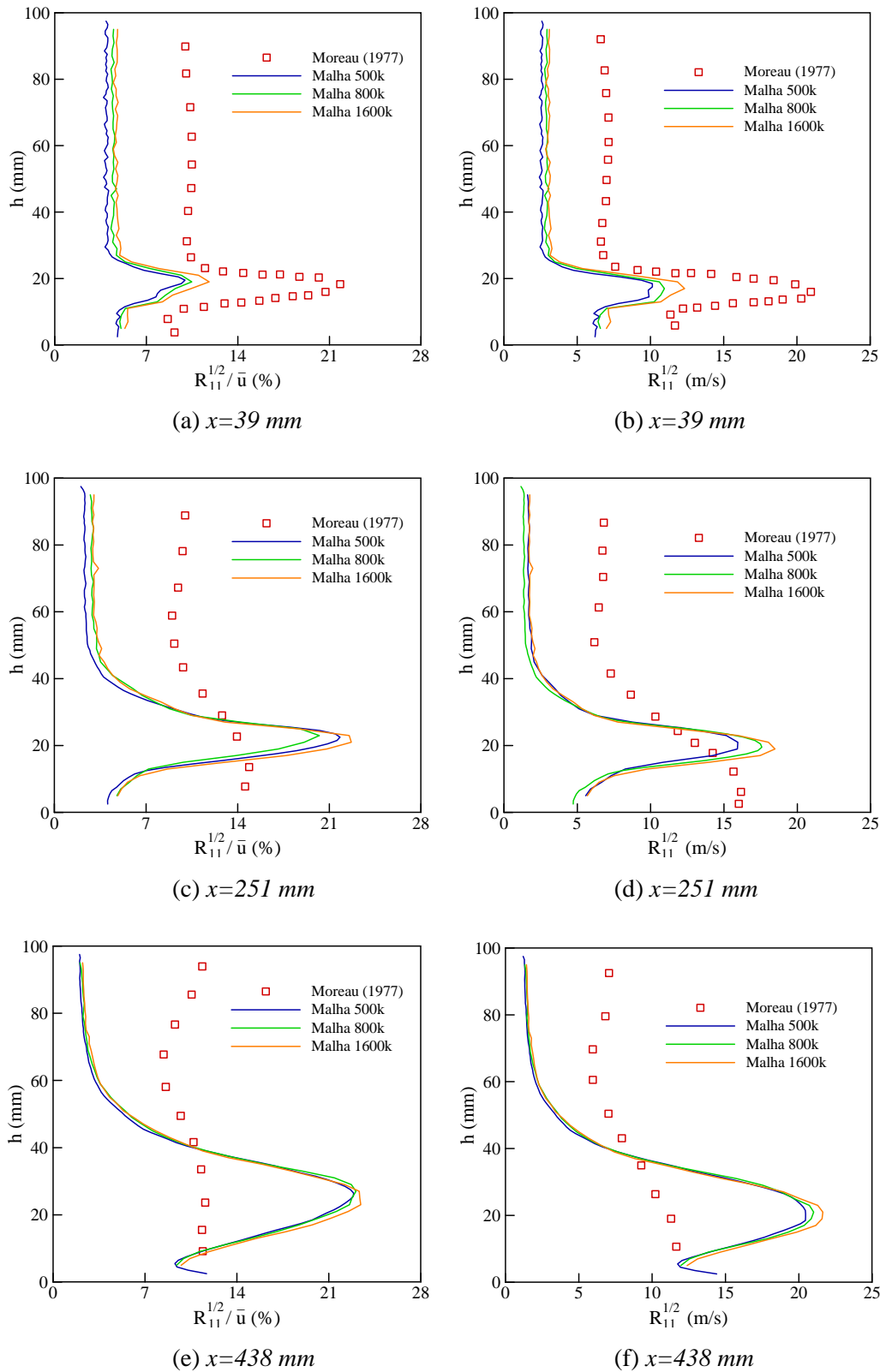


Figura 5.24 Lado esquerdo: evolução transversal da intensidade turbulenta. Lado direito: evolução transversal do rms da componente longitudinal da velocidade flutuante. Seções transversais localizadas em  $x = 39, 251$  e  $438$  mm. Resultados obtidos com as condições de contorno de entrada C1.

Como mencionado anteriormente, esta baixa estimativa das propriedades da turbulência na região inicial do escoamento pode estar relacionada à escolha das condições de contorno das flutuações de velocidade na entrada do domínio de cálculo. Apesar das flutuações de entrada representarem os momentos estatísticos de segunda ordem do campo de velocidade medidos em Moreau e Boutier (1977), estas não representam adequadamente a distribuição de frequência do espectro de energia turbulenta. A técnica simplificada para geração de condições de contorno de entrada turbulentas, utilizada neste trabalho, resulta em flutuações que correspondem a um espectro de energia uniformemente distribuído de altas frequências. Estas flutuações de alta frequência são dissipadas imediatamente a jusante da entrada no domínio de cálculo, sendo necessário um comprimento adicional do canal para que as estruturas turbulentas se desenvolvam.

Nas Figuras 5.24(c) e (d) nota-se que os resultados calculados para a seção transversal situada em  $x = 251 \text{ mm}$  apresentam uma amplificação significativa das flutuações turbulentas em relação as medições realizadas a montante. Os valores máximos da intensidade turbulenta se concentram na região da camada de mistura e giram em torno de 20%. Na parte superior do canal, acima de  $h = 50 \text{ mm}$ , os níveis de flutuação se mantêm praticamente inalterados. De maneira oposta, os valores experimentais de flutuação turbulenta decaem na região da camada de mistura, em relação as medições realizadas na seção transversal a montante. Nesta seção, estes valores apresentam uma distribuição mais uniforme ao longo da altura do canal, quando comparada com a dos resultados numéricos.

As Figuras 5.24(e) e (f) mostram que os valores máximos calculados da flutuação turbulenta, para a seção transversal localizada em  $x = 438 \text{ mm}$ , apresentam um pequeno aumento em relação aos valores calculados na seção transversal a montante. Percebe-se que a região de influência do movimento turbulento produzido na região da camada de mistura avança na direção da metade superior do canal, sugerindo uma tendência de uniformização da evolução transversal dos valores das flutuações de velocidade, na medida em que o escoamento evolui de montante a jusante. Cabe notar que, nesta seção transversal, os dados experimentais mostram uma distribuição praticamente uniforme das flutuações turbulentas.

Uma alternativa para diminuir o amortecimento das flutuações de velocidade na região inicial do canal e melhorar os resultados do desenvolvimento espacial da turbulência seria o uso de técnicas para geração de condições de contorno de

entrada turbulentas que forneçam o espectro de energia turbulenta contendo as fases corretas entre os modos de flutuação de velocidade, tais como aquelas encontradas, por exemplo, nos estudos de Smirnov et al.(2001), Klein et al. (2003) e Spode (2006). Além disto, seria interessante empregar modelos sub-malha menos dissipativos do que o modelo de Smagorinsky, tais como, por exemplo, o de Smagorinsky dinâmico, no qual o valor da constante do modelo seria avaliado para cada posição no espaço e para cada passo de tempo (Germano et al., 1991). É importante ressaltar que os resultados obtidos mediante o uso das três malhas escolhidas para este trabalho não apresentam diferenças significativas, levando a crer que um refinamento mais intenso da malha não forneceria um ganho de qualidade nos resultados sem que as modificações citadas acima fossem realizadas.

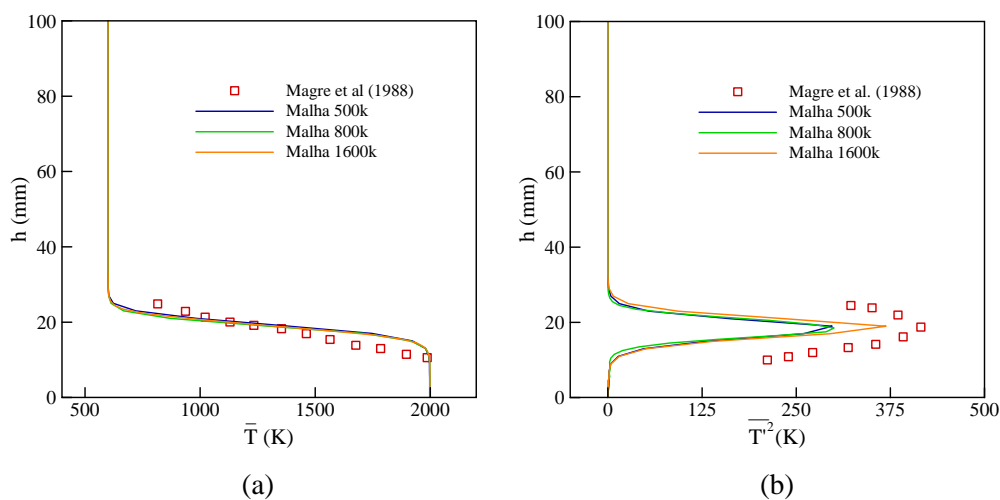


Figura 5.25 Evolução transversal da (a) temperatura média e da (b) variância da temperatura, obtida com as condições de contorno  $C2$ , para uma seção localizada 42 mm a jusante da entrada do canal.

As comparações envolvendo a temperatura são realizadas para uma seção transversal localizada no plano central do canal, na coordenada  $x = 42 \text{ mm}$ . A Figura 5.25(a) ilustra a evolução transversal da temperatura média. É possível perceber disparidades nos resultados obtidos pelas três malhas em relação aos dados experimentais. Em particular, notam-se diferenças na representação da espessura da camada de mistura calculada, em relação aos valores medidos no experimento.

A Figura 5.25(b) mostra a evolução transversal da variância da temperatura. Nota-se que a malha 1600k é aquela que melhor representa o extremo dos valores da variância, em relação as malhas 500k e 800k, que produzem resultados seme-

lhantes entre si. Entretanto, percebe-se que os resultados das três malhas são praticamente idênticos em termos da representação da espessura da camada de mistura, mostrando evoluções transversais mais estreitas quando comparadas aos dados experimentais. Mais precisamente, a discrepância entre os valores experimentais e calculados em termos da espessura da camada de mistura é da ordem de 15%.

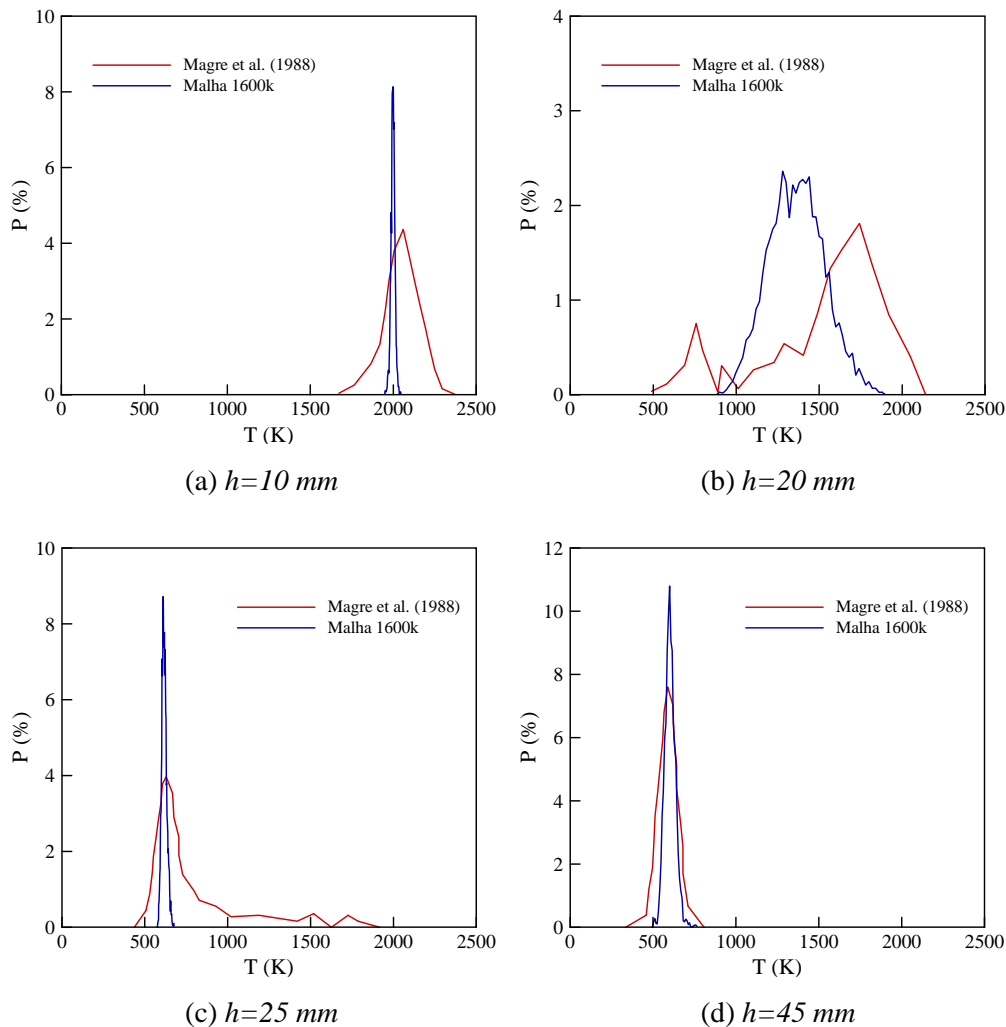


Figura 5.26 Comparações das PDFs da temperatura calculadas em relação as medidas, obtidas mediante o emprego da malha 1600k e das condições de contorno C1, para o plano central ao canal, na coordenada  $x = 42$  mm, e para alturas iguais a: (a) 10 mm, (b) 20 mm, (c) 25 mm, e (d) 45 mm.

As Figuras 5.26(a) a (d) ilustram as PDFs da temperatura, obtidas mediante o uso da malha 1600k, na linha de centro do canal, na coordenada  $x = 42$  mm, e para alturas  $h = 10, 20, 25$  e 45 mm, respectivamente. Nota-se que para a posição  $h = 10$  mm, a qual é situada em uma região predominada pelos gases queimados, os cálculos mostram uma probabilidade máxima de 8% da ocorrência de gases a

temperatura de 2000 K, enquanto nos dados experimentais esta probabilidade gira em torno de 4%. Percebe-se, também, que os cálculos fornecem uma faixa restrita de valores possíveis de temperatura, os quais giram em torno de 2000 K, enquanto no experimento as temperaturas possíveis de ocorrer variam entre 1700 e 2300 K. Cabe ressaltar que ambos os casos apresentam PDFs monomodais.

Na posição  $h = 20 \text{ mm}$ , região esta fortemente influenciada pela camada de mistura, a PDF medida experimentalmente apresenta uma forma bimodal, com as maiores probabilidades de ocorrência de temperaturas de 700 e 1700 K. A PDF calculada mostra valores máximos de probabilidade em torno de 2%, para temperaturas entre 1200 e 1300 K, e apresenta uma distribuição próxima a gaussiana.

Os dados experimentais sugerem a existência de uma influência da região da camada de mistura na posição  $h = 25 \text{ mm}$ , sendo que as temperaturas possíveis de se obter variam de 500 a 1800 K, com probabilidade máxima de encontrar gases a temperatura de 600 K. As PDFs calculadas não representam adequadamente estas influências, tendo em vista a faixa restrita de valores possíveis de temperatura que gira em torno de 600 K, indicando a predominância dos gases frescos nesta posição. Cabe mencionar que estes resultados corroboram aqueles ilustrados nas Figuras 5.26(a) e (b), os quais indicam uma baixa estimativa dos cálculos em relação à espessura da camada de mistura.

Na posição  $h = 45 \text{ mm}$ , ambas as PDFs, calculada e medida experimentalmente, são monomodais e sugerem a predominância dos gases frescos com valores de temperatura na ordem de 600 K.

As Figuras 5.27(a) a (d) mostram as PDFs da temperatura, obtidas mediante o uso da malha 1600k, na linha de centro do canal, na coordenada  $x = 122 \text{ mm}$ , e para alturas  $h = 10, 20, 30$  e  $40 \text{ mm}$ , respectivamente. Nota-se que, para a posição  $h = 10 \text{ mm}$ , os cálculos indicam que temperaturas na faixa de 1300 a 2200 K podem ser encontradas, com a maior probabilidade de ocorrência de gases a temperatura de 2000 K. Os dados experimentais indicam uma distribuição aproximadamente uniforme da probabilidade de obter temperaturas entre 1200 e 2100 K.

Na posição  $h = 20 \text{ mm}$ , a PDF calculada sugere uma distribuição gaussiana com probabilidade máxima de 1% para temperaturas em torno de 1400 K. A PDF medida apresenta uma forma aproximadamente bimodal, com probabilidades extremas de 1% para as temperaturas de 700 e 1500 K.

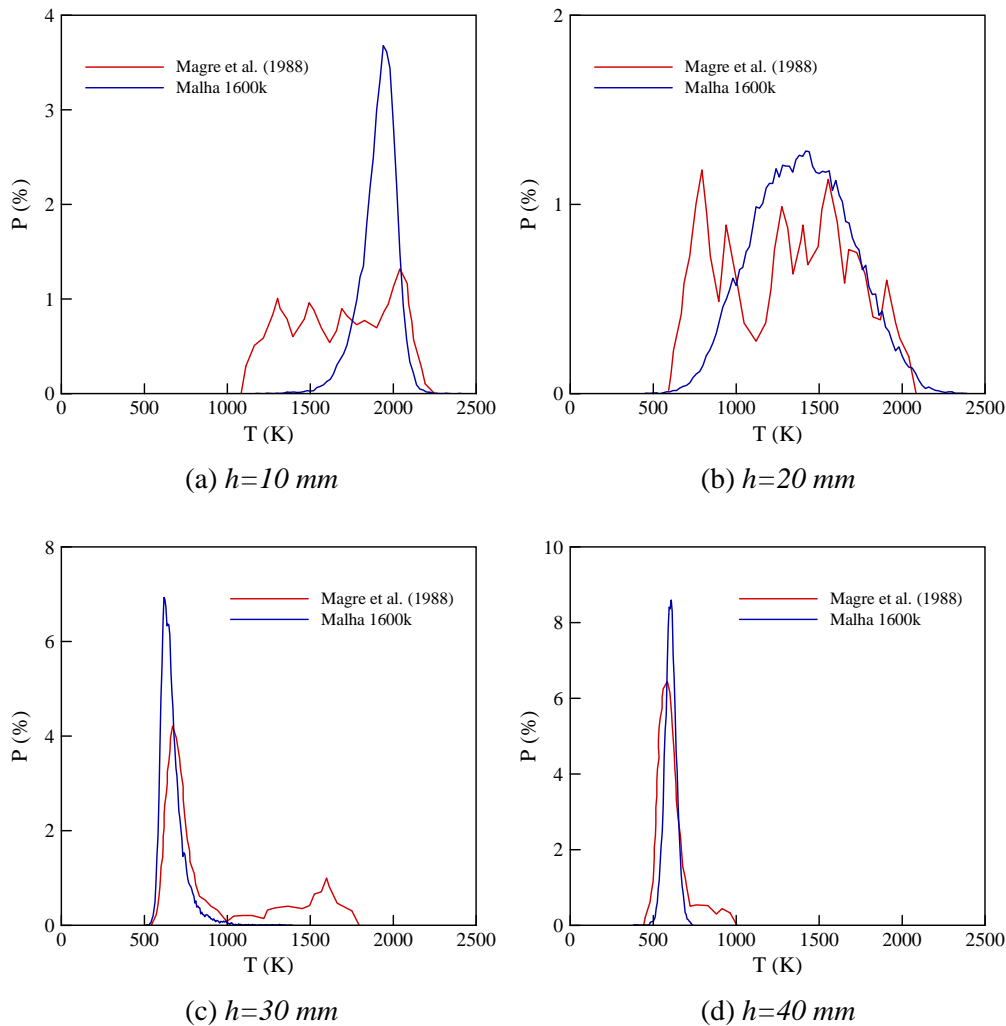


Figura 5.27 Comparações das PDFs da temperatura calculadas em relação às medidas, obtidas mediante o emprego da malha 1600k e das condições de contorno  $C1$ , para o plano central ao canal, na coordenada  $x = 122\text{ mm}$ , e para alturas de: (a)  $10\text{ mm}$ , (b)  $20\text{ mm}$ , (c)  $30\text{ mm}$ , e (d)  $40\text{ mm}$ .

Na posição  $h = 30\text{ mm}$ , a PDF obtida no experimento possui valor máximo de 4% para valores de temperatura de cerca de 600 K e 1% para temperatura de 1600 K, caracterizando uma distribuição bimodal e indicando que nesta posição existe uma influência da região da camada de mistura. A PDF calculada apresenta uma forma monomodal e sugere uma predominância dos gases frescos a temperatura de 600 K, mas com possibilidades de ocorrência de temperaturas entre 500 e 1000 K.

Na posição  $h = 40\text{ mm}$ , as PDFs calculada e medida no experimento apresentam boa concordância entre si e apontam para a predominância dos gases frescos com temperatura de 600 K.

### 5.3.4.2.

#### Resultados Obtidos com as Condições de Contorno de Entrada C2

A Figura 5.28 mostra a evolução transversal da componente longitudinal da velocidade média, obtida mediante o uso das condições de contorno C2, para uma seção localizada no centro do canal e na coordenada  $x = 39 \text{ mm}$ .

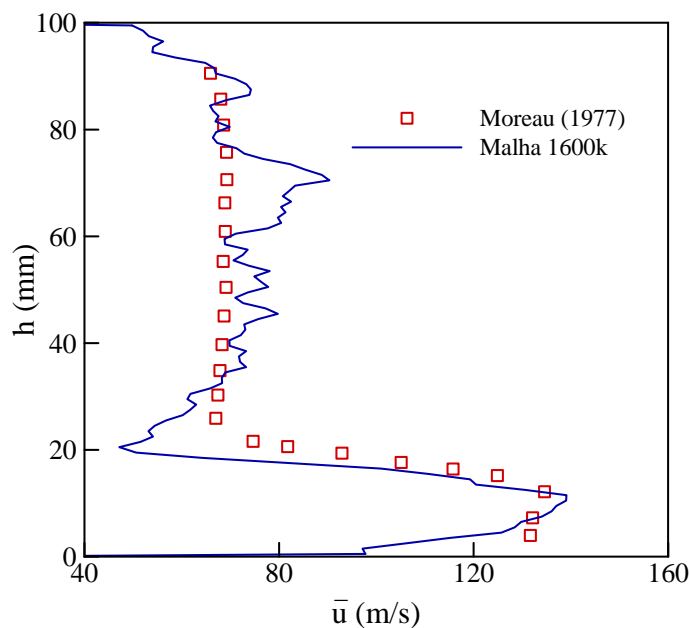


Figura 5.28 Evolução da componente longitudinal da velocidade média na seção transversal localizada em  $x = 39 \text{ mm}$  para condições de contorno de entrada C2.

Nesta figura, constata-se uma forte influência das condições de contorno de entrada nos resultados calculados, sendo que, na região do escoamento oriundo do duto principal, estes apresentam uma distribuição típica de escoamentos turbulentos desenvolvidos em canais, sobreposta pelos efeitos das flutuações prescritas na entrada do domínio de cálculo, com valores máximos na ordem de 80 m/s. Os dados experimentais apresentam uma evolução transversal mais uniforme do que a dos resultados calculados nesta região, com valores médios em torno de 65 m/s. Para o escoamento oriundo do queimador auxiliar existe uma boa concordância dos valores extremos da velocidade média e na região de influência da parede, localizada em torno de  $h = 20 \text{ mm}$ , observam-se valores calculados de aproximadamente 50 m/s, enquanto os dados experimentais mostram valores em torno de 70 m/s.



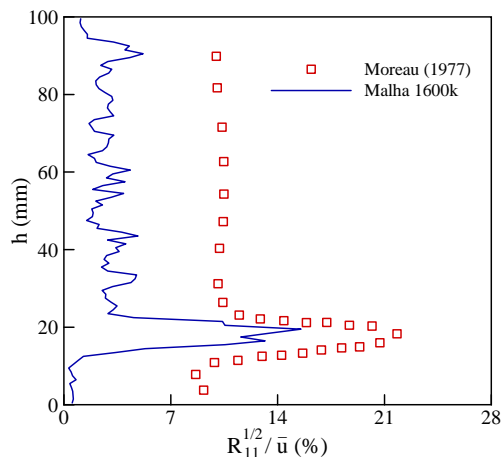
As evoluções do rms da componente longitudinal da velocidade flutuante e da taxa de turbulência média correspondente, para seções transversais localizadas no plano central do canal e nas coordenadas  $x = 39,251$  e  $351 \text{ mm}$ , são mostradas nas Figuras 5.29(a) a (f).

Nas Figuras 5.29(a) e (b), observa-se que o comportamento das flutuações turbulentas na seção localizada em  $x = 39 \text{ mm}$  é análogo ao obtido com o uso das condições de contorno  $C1$ . A intensidade turbulenta calculada na região do escoamento proveniente do duto principal é de cerca de 5%, enquanto os dados experimentais mostram valores na ordem de 10%. Na região da camada de mistura, os valores máximos calculados são da ordem de 15 %, ao passo que o experimento mostra valores em torno de 22%.

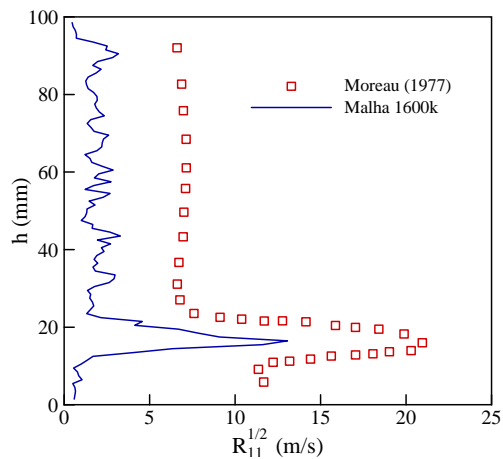
As Figuras 5.29(c) e (d) mostram uma amplificação das flutuações turbulentas, para a seção transversal localizada em  $x = 251 \text{ mm}$ . Os valores máximos da intensidade turbulenta calculada se concentram na região de influência da camada de mistura e giram em torno de 21%. Na metade superior do canal, os níveis de turbulência são similares aos obtidos na seção transversal anterior, os quais giram em torno de 5%. Os dados experimentais mostram níveis de intensidade turbulenta máxima de 15% na região da camada de mistura e de cerca de 10 % na metade superior do canal.

Nas Figuras 5.29(e) e (f) percebe-se que, na seção transversal localizada em  $x = 438 \text{ mm}$ , a região de influência da camada de mistura é ampliada em relação àquela mostrada na seção transversal anterior, se estendendo até a altura de cerca de  $50 \text{ mm}$ . A intensidade turbulenta máxima calculada é da ordem de 20% em  $h = 20 \text{ mm}$ . Na metade superior do canal, a intensidade turbulenta calculada é de cerca de 6% e a experimental gira em torno de 10%. Cabe notar que, nesta seção, os dados experimentais mostram uma evolução transversal da intensidade turbulenta aproximadamente uniforme

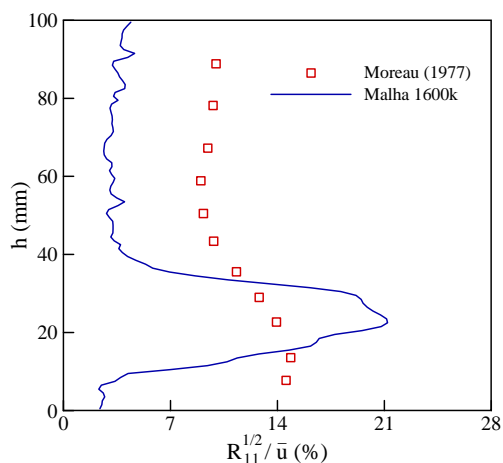
Convém ressaltar que os resultados obtidos mediante o uso das condições de contorno de entrada  $C2$  são similares àqueles obtidos com as condições de entrada  $C1$ . Pequenas diferenças são encontradas nas seções localizadas em  $x = 251$  e  $438 \text{ mm}$ , ilustradas nas Figuras 5.29(c), (d), (e) e (f), nas quais as condições de contorno  $C2$  fornecem uma ligeira melhora na comparação com os dados experimentais em termos de evolução transversal da intensidade turbulenta. No entanto,



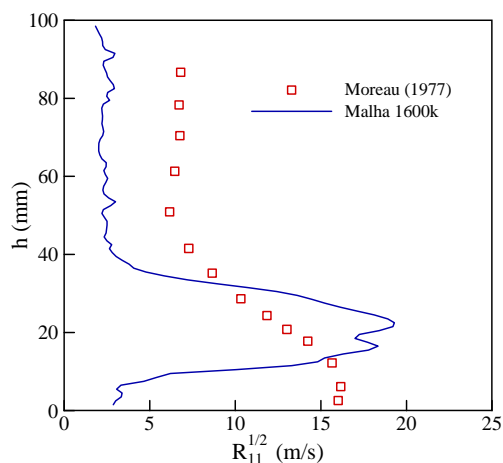
(a)  $x=39\text{ mm}$



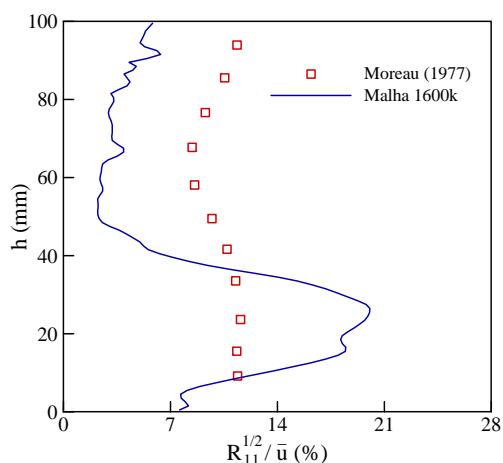
(b)  $x=39\text{ mm}$



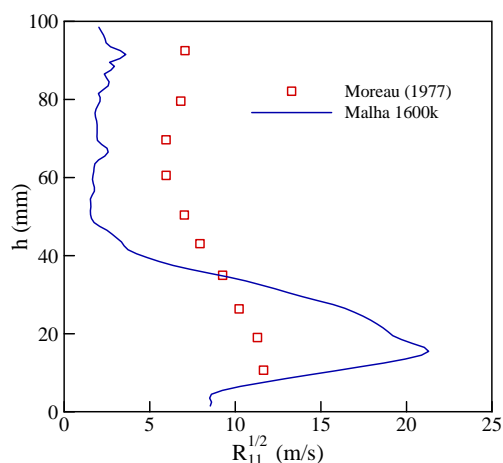
(c)  $x=251\text{ mm}$



(d)  $x=251\text{ mm}$



(e)  $x=438\text{ mm}$



(f)  $x=438\text{ mm}$

Figura 5.29 Lado esquerdo: evolução transversal da intensidade turbulenta. Lado direito: evolução transversal do rms da componente longitudinal da velocidade flutuante. Seções transversais localizadas em  $x = 39, 251$  e  $438\text{ mm}$ . Resultados obtidos com as condições de contorno de entrada C2.

o problema da baixa estimativa da intensidade turbulenta na metade superior do canal persiste. Como mencionado anteriormente, acredita-se que uma melhora considerável desta questão poderia ser obtida mediante duas modificações principais: a utilização de métodos mais sofisticados de geração de condições de contorno de entrada turbulentas e o emprego de um modelo dinâmico para o cálculo da viscosidade sub-malha (Klein et al., 2003, Spode, 2006).

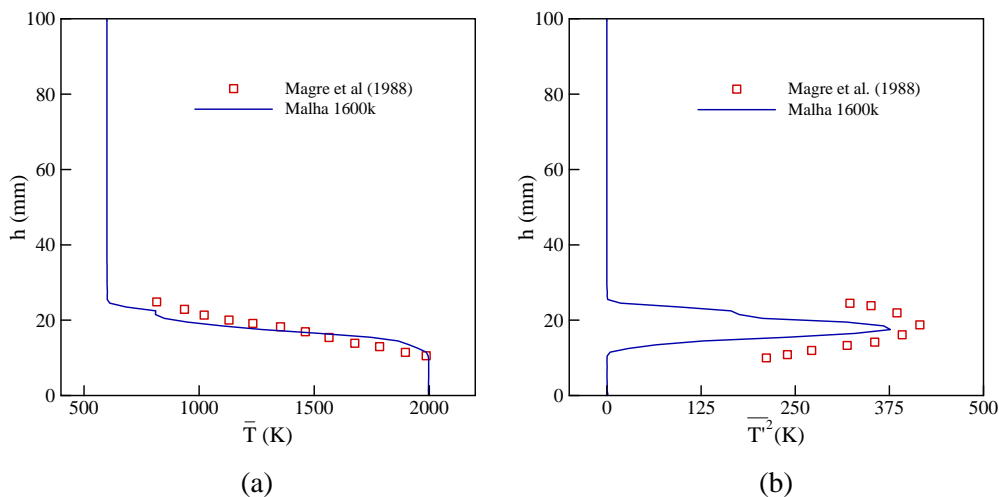


Figura 5.30 Condições de contorno  $C2$ : evolução transversal da (a) temperatura média, (b) variância da temperatura, para uma seção localizada 42 mm a jusante da entrada do canal.

A evolução transversal da temperatura média, calculada com a utilização das condições de contorno  $C2$ , para uma seção central ao canal e na coordenada  $x = 42 \text{ mm}$ , é mostrada na Figura 5.30(a). De maneira semelhante aos resultados obtidos com as condições  $C1$ , notam-se discrepâncias entre os resultados calculados e os dados experimentais em termos da representação da espessura da camada de mistura. Os primeiros mostram uma espessura próxima de 15 mm, enquanto os segundos sugerem um valor em torno de 20 mm. A Figura 5.30(b) mostra a evolução da variância da temperatura para mesma seção transversal, a qual confirma a baixa estimativa da espessura da camada de mistura. Os valores extremos calculados da variância estão na ordem de 375 K, enquanto os dados experimentais giram em torno de 400 K.

As Figuras 5.31(a) a (d) ilustram as PDFs da temperatura, obtidas na linha de centro do canal, na coordenada  $x = 42 \text{ mm}$ , e para as alturas  $h = 10, 20, 25$  e  $45 \text{ mm}$ , respectivamente. De maneira semelhante as condições de contorno de

entrada  $C1$ , para a posição  $h = 10 \text{ mm}$ , os cálculos fornecem uma faixa restrita de valores possíveis de temperatura, girando em torno de 2000 K, quando comparados com as medições experimentais, as quais mostram que as temperaturas podem variar de 1700 a 2300 K. Em ambos os casos as PDFs apresentam uma forma monomodal.

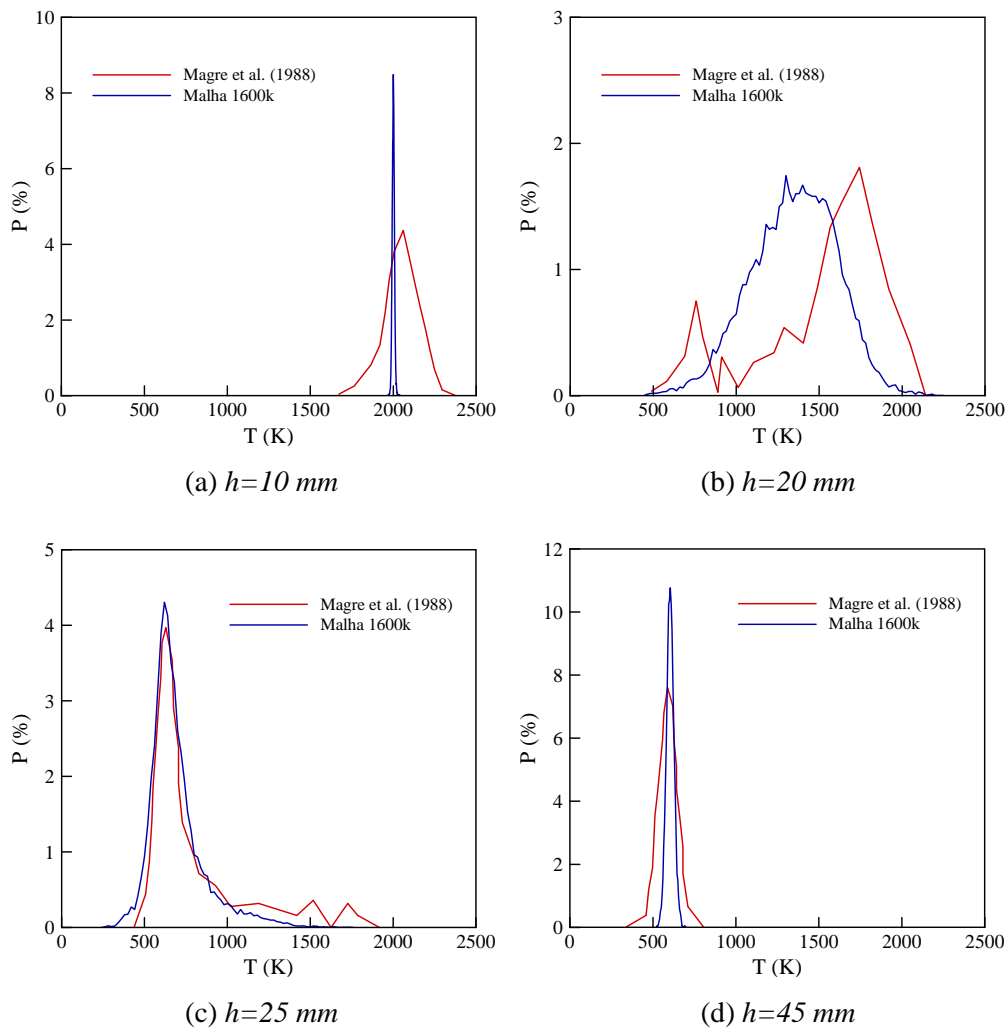


Figura 5.31 Comparações das PDFs da temperatura calculadas em relação as medidas, obtidas mediante o emprego da malha 1600k e das condições de contorno  $C2$ , para o plano central ao canal, na coordenada  $x = 42 \text{ mm}$ , e para alturas iguais a: (a) 10 mm, (b) 20 mm, (c) 25 mm, e (d) 45 mm.

Na posição  $h = 20 \text{ mm}$ , região esta influenciada pela camada de mistura, a PDF calculada apresenta uma distribuição aproximadamente gaussiana, com probabilidade máxima de ocorrência de temperaturas entre 1300 e 1500 K. A PDF medida apresenta uma tendência bimodal com probabilidades máximas de temperaturas em torno de 700 e 1700 K.

Na posição  $h = 25 \text{ mm}$ , há uma boa concordância entre as PDFs calculada e medida experimentalmente. Nota-se que, com a utilização das condições de contorno de entrada C2, a influência da camada de mistura é bem representada nesta posição, sendo que as temperaturas possíveis de ocorrer variam de 450 a 1500 K, com probabilidade máxima de cerca de 4% de se obter gases frescos a temperatura de 600 K. Na posição  $h = 45 \text{ mm}$ , ambas as PDFs, calculada e medida no experimento, são monomodais, com predominância dos gases frescos a temperatura de 600K.

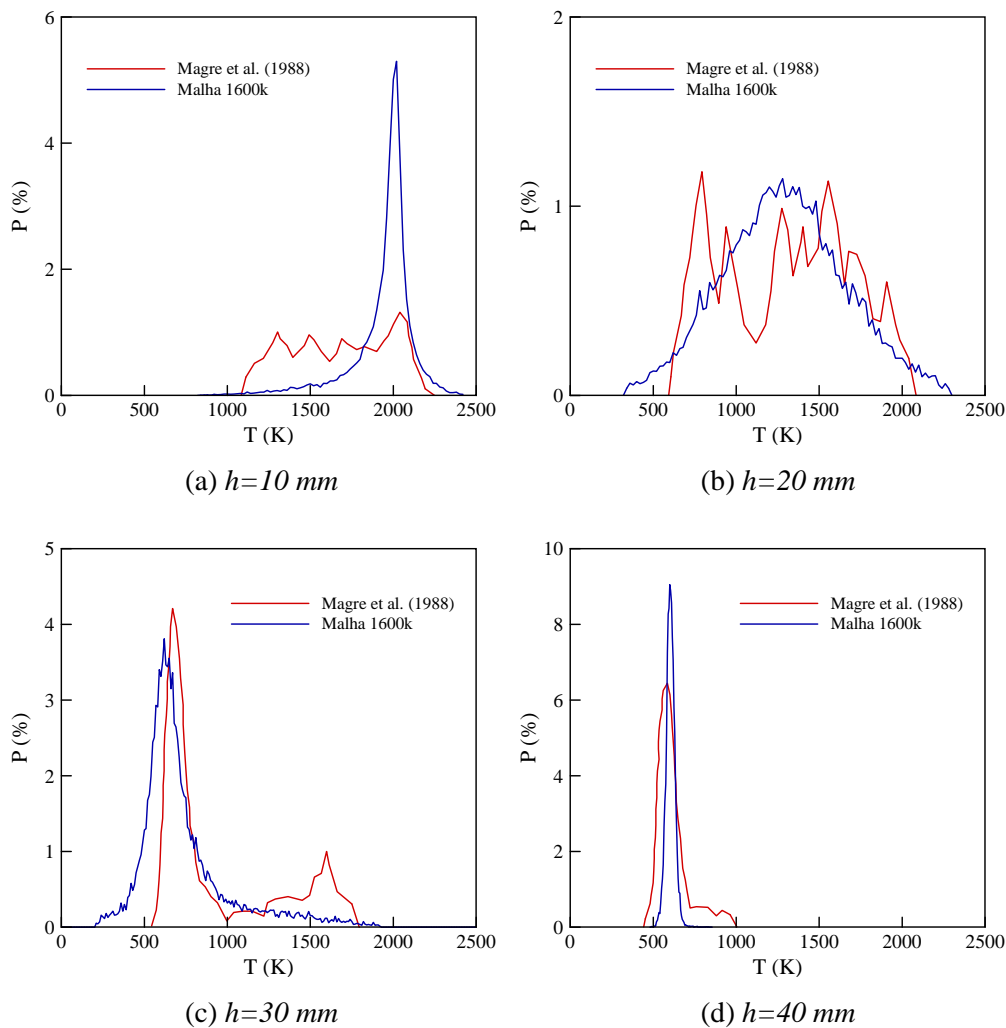


Figura 5.32 Comparações das PDFs da temperatura calculadas em relação as medidas, obtidas mediante o emprego da malha 1600k e das condições de contorno C2, para o plano central ao canal, na coordenada  $x = 122 \text{ mm}$ , e para alturas de: (a) 10 mm, (b) 20 mm, (c) 30 mm, e (d) 40 mm.

As Figuras 5.32(a) a (d) ilustram as PDFs da temperatura, obtidas na linha de centro do canal, na coordenada  $x = 122 \text{ mm}$ , e para as alturas  $h = 10, 20, 30$

e 40 mm, respectivamente. Na posição  $h = 10$  mm, os cálculos mostram que temperaturas de 1000 a 2350 K podem ser encontradas, com a probabilidade máxima de ocorrência de temperaturas na ordem de 2000 K. Os dados experimentais sugerem probabilidades aproximadamente uniformes de encontrar temperaturas entre 1200 e 2100 K.

Na posição  $h = 20$  mm, a PDF calculada tende a uma distribuição gaussiana, com probabilidade máxima de ocorrência de temperatura em torno de 1250 K. A PDF medida apresenta uma forma aproximadamente bimodal, com probabilidades máximas de ocorrência de temperaturas em torno de 700 e 1500 K.

Na posição  $h = 30$  mm, há uma concordância razoável entre as PDFs calculada e medida, com exceção da faixa de temperatura em torno de 1600 K, onde o experimento mostra probabilidades mais elevadas. Ambos os casos sugerem a predominância de temperaturas de cerca de 600 K. Na posição  $h = 40$  mm, os cálculos e as medições também sugerem a predominância de gases a 600 K.

Por fim, é importante ressaltar que as disparidades encontradas nas comparações das PDFs calculadas em relação as medidas no experimento, obtidas com ambas condições de contorno de entrada  $C1$  e  $C2$ , podem estar relacionadas a uma baixa estimativa do transporte da temperatura devido aos movimentos turbulentos. Portanto, acredita-se que a implementação das duas modificações sugeridas anteriormente, referentes à utilização de métodos mais sofisticados de geração de condições de contorno de entrada turbulentas e ao emprego de um modelo dinâmico para o cálculo da viscosidade sub-malha, também resultaria em uma maior precisão nas comparações das PDFs da temperatura.

#### **5.4. Simulações de Casos Reativos**

Uma vez concluídas as simulações dos casos quimicamente inertes, as simulações dos casos reativos são realizadas utilizando-se a malha e as condições de contorno de entrada que resultaram na melhor avaliação da estrutura do escoamento inerte e nas melhores comparações com os dados experimentais sem a presença das reações químicas. Em particular, esta escolha é realizada com base nos resultados obtidos em termos do comportamento das propriedades da turbulência, uma vez que a estrutura das chamas turbulentas pré-misturadas e a caracte-

rização de suas propriedades globais dependem principalmente da interação existente entre os movimentos turbulentos e as reações químicas.

Como visto nas seções 5.3.3 e 5.3.4, de uma maneira geral, os resultados obtidos com as condições de contorno de entrada  $C1$  e  $C2$  são equivalentes. No entanto, as condições de contorno  $C2$  fornecem evoluções transversais da intensidade turbulenta, obtidas na primeira metade do canal, que apresentam uma concordância ligeiramente melhor com os dados experimentais. Por este motivo, estas são empregadas nas simulações dos casos reativos e, como consequência, a malha 1600k é utilizada. Em termos do método de Monte Carlo, convém lembrar que este utiliza 100 partículas inicialmente distribuídas por volume de controle.

O número de Reynolds do canal é determinado de maneira semelhante ao mostrado na seção 5.3.3.2 e é igual a  $Re_{ch} = 94.540$ . O passo de tempo utilizado é de  $\Delta t = 10 \mu s$ , sendo que o critério CFL não ultrapassa o valor de 0,7. O tempo total de simulação é de  $t = 250 ms$ , o qual equivale a 25.000 iterações numéricas.

Analogamente às simulações dos casos inertes, os resultados obtidos para os casos reativos são primeiramente analisados em termos da estrutura do escoamento reativo e em termos das propriedades das chamas turbulentas, sendo em seguida avaliados qualitativamente mediante comparações com dados experimentais.

#### 5.4.1.

#### **Análise da Estrutura das Chamas e do Escoamento Reativo**

Nas simulações dos casos reativos, os gases frescos são compostos pela mistura de metano e ar, caracterizada por uma riqueza  $\varphi = 0,8$ , sendo que as reações químicas são iniciadas na região inicial do canal, pelo contato entre os gases queimados e a mistura reativa, e se desenvolvem a medida que o escoamento evolui de montante a jusante. A taxa de reação química é determinada de acordo com a lei empírica de Arrhenius, Eq. (3-34), utilizando-se os valores da temperatura de ativação,  $T_a = 10000 K$ , temperatura dos gases frescos,  $T_u = 600 K$ , e temperatura dos gases queimados,  $T_b = 2000 K$ . Com estes valores, a taxa de reação química adimensional é dada pela expressão,

$$\hat{S}(c) = 10^3(1 - c) \exp\left(\frac{10000}{600 + 1400c}\right), \quad (5-14)$$

onde o primeiro termo do lado direito desta equação é escolhido de modo a fornecer um valor máximo de  $\hat{S}(c)$  unitário.

A taxa de reação química é determinada pela expressão,

$$S(c) = \rho A_{\tau} \hat{S}(c) , \quad (5-14)$$

onde  $\rho$  é a densidade e  $A_{\tau}$  é conhecida como constante pré-exponencial, a qual é inversamente proporcional ao tempo característico das reações químicas.

Neste trabalho, um valor de  $A_{\tau}$  igual a 4000 é utilizado para a estabilização das chamas, o que resulta em um tempo característico das reações químicas nas simulações na ordem de  $\tau_{\Delta c} = 250 \mu s$ . Como visto na seção 5.3.4, os valores mínimos e máximos das flutuações turbulentas, obtidos nas simulações dos casos inertes, são da ordem de 5 a 20 m/s, respectivamente. Dados os espaçamentos característicos entre os volumes de controle usados pela malha 1600k, entre 1 e 2,5 mm, o tempo característico dos movimentos turbulentos nas simulações,  $\tau_{\Delta t}$ , pode variar entre 50 e 500  $\mu s$ . Como conseqüência, o número de Damköhler das simulações,  $Da_{\Delta} = \tau_{\Delta t} / \tau_{\Delta c}$ , pode variar entre 0,2 e 2. No trabalho de Magre et al. (1988), o tempo característico das reações químicas informado gira em torno de  $\tau_c = 1 ms$  e o tempo característico dos movimentos turbulentos é da ordem de  $\tau_t = 10 \mu s$ , resultando em um número de Damköhler,  $Da = \tau_t / \tau_c$ , na ordem de 0,01. Considerando as ordens de grandeza do número de Damköhler das simulações e do experimento, e dados os valores dos números de Karlovitz mostrados na Tabela 5.1,  $Ka = 12,7$  e  $Ka_{\delta} = 0,127$ , é esperado que o movimento turbulento interaja fortemente com as reações químicas, resultando em um aumento da espessura e da velocidade de propagação das chamas.

De fato, uma visualização instantânea da frente de chama, mostrada na Figura 5.33, obtida mediante filmagem com velocidade de 4000 imagens por segundo, mostra que a turbulência atua sobre as estruturas das chamas, produzindo dobramento e estiramento intensos, e distribuindo as reações químicas sobre uma vasta região do canal. Nesta figura, as chamas são representadas pelas estruturas mais escuras que se dispõem obliquamente ao longo do comprimento do canal, as quais apresentam uma espessura considerável, aparentando se encontrar no regime de chamas espessas. De acordo com Magre et al. (1988), a espessura instantânea das chamas pode variar entre 2 a 10 cm. Convém notar que esta imagem mostra



uma visão integrada na profundidade, representada na direção  $y$ , e é limitada entre as coordenadas na direção longitudinal em torno de  $x = 100$  e  $350$  mm.

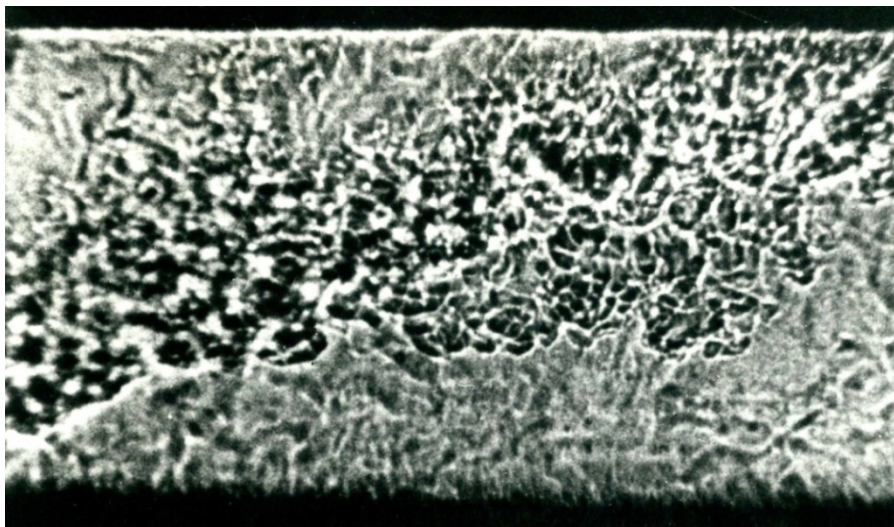


Figura 5.33 Visualização instantânea da chama turbulenta pré-misturada, integrada na profundidade, obtida por filmagem com velocidade de 4000 imagens por segundo (Magre et al., 1988).

A Figura 5.34 mostra a taxa de reação química única, global e irreversível, calculada pelo método LES-PDF, a qual representa uma imagem instantânea da frente de chama obtida entre as coordenadas  $x = 0$  e  $400$  mm e no instante de tempo  $t = 250$  ms. É importante ressaltar que, diferentemente da imagem obtida no experimento, a qual representa uma visão integrada das chamas na profundidade, esta figura corresponde a uma seção longitudinal da frente de chama, situada na linha de centro do canal. Por este motivo, a comparação com a imagem obtida no experimento permite somente uma análise qualitativa dos efeitos da turbulência sobre as reações químicas. É possível notar que os movimentos turbulentos exercem fortes influências nas estruturas das chamas, resultando em valores instantâneos da espessura em torno de 5 e 10 cm, dependendo da posição desta no canal. Em particular, observa-se que os elementos de chama são dobrados em algumas regiões e estirados em outras. Além disto, notam-se descontinuidades destes elementos em algumas regiões, o que pode ser uma indicação da ocorrência de pontos de extinção locais. Em algumas regiões também é possível observar porções isoladas de gases em processo de reação, os quais foram deslocados no espaço pela ação do movimento turbulento.

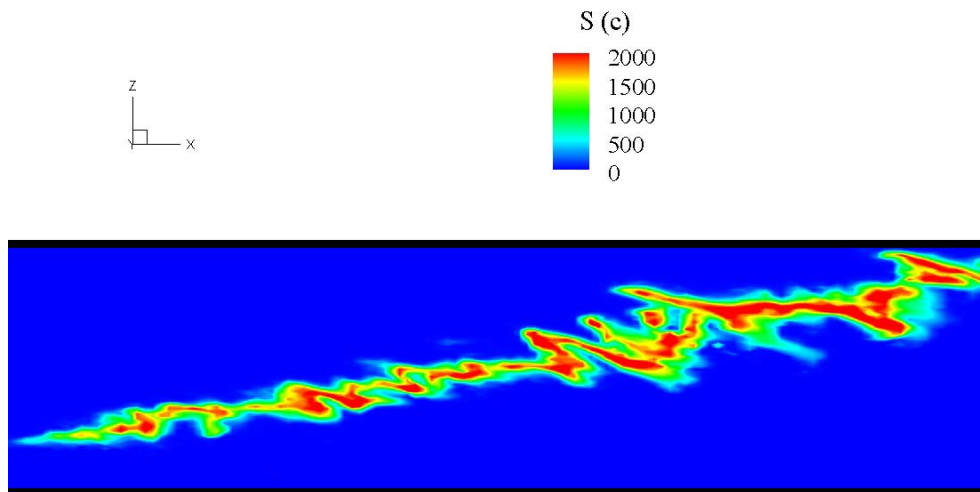


Figura 5.34 Taxa de reação química instantânea em  $kgm^{-3}s^{-1}$ , para  $t = 250 ms$ , e para um plano central ao canal, entre as coordenadas  $x = 0$  e  $400 mm$ .

Estes resultados sugerem que o método LES-PDF é capaz de representar a interação dos movimentos turbulentos com as reações químicas, para o regime de combustão de zona de reação fina, encontrado neste trabalho, a qual é descrita pelo acoplamento existente entre o termo de micro-mistura e o termo de taxa de reação química presentes no modelo da PDF transportada. Aparentemente, a frequência de mistura turbulenta, fornecida por LES e utilizada pelas partículas no modelo de micro-mistura, fornece resultados razoáveis em termos da representação da influência dos movimentos turbulentos sobre a frente de chama.

A Figura 5.35 mostra a taxa de reação química média, a qual é correspondente a espessura de chama turbulenta,  $\delta_T$ , obtida entre as coordenadas  $x = 0$  e  $400 mm$  e para uma seção longitudinal central ao canal. No presente trabalho, a espessura de chama turbulenta é definida como a média das frentes de chama instantâneas, as quais são obtidas entre os intervalos de tempo  $t = 50 ms$  e  $250 ms$ , ou seja, mediante o uso de 20.000 amostras. O trabalho de Magre et al. (1988) menciona que a espessura de chama turbulenta,  $\delta_T$ , é de aproximadamente 10 cm, medida na direção paralela ao eixo longitudinal do canal. Nos cálculos é possível observar uma espessura na mesma ordem de grandeza, de modo que  $\delta_T \approx 10 cm$  na região próxima a meia altura do canal. Na metade inferior do canal, os valores encontrados são menores, decrescendo até a região próxima do início da chama, e na metade superior os valores encontrados aumentam na direção da parede superior.

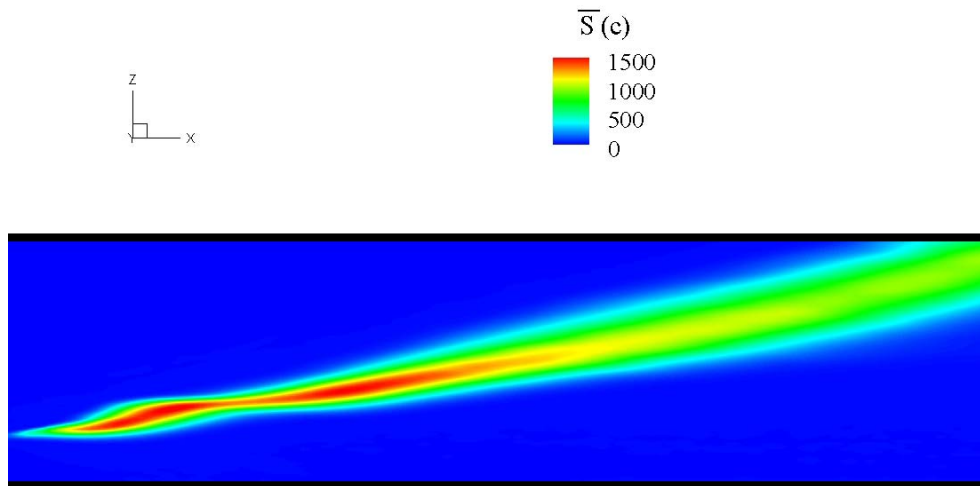


Figura 5.35 Taxa de reação química média em  $kgm^{-3}s^{-1}$ , correspondente a espessura da chama turbulenta,  $\delta_T$ , para uma seção longitudinal situada no centro do canal, entre as coordenadas  $x = 0$  e  $400$  mm.

Uma característica observada das chamas é que estas se posicionam fora da região de influência da camada de mistura, apresentando uma inclinação em relação a direção preferencial do escoamento. O trabalho de Magre et al. (1988) informa que esta inclinação aumenta de acordo com o aumento da riqueza da mistura. Para uma riqueza de mistura de 0,8, a chama se ignita pelo contato entre os gases frescos e os gases queimados no início do canal, se desenvolve longitudinalmente a jusante, e se ancora na parede superior do canal na coordenada  $x \approx 350$  mm, ao redor da qual apresenta flutuações de posição ao longo do tempo.

Neste trabalho, as simulações dos casos reativos são iniciadas com a riqueza de mistura em torno de 0,5, sendo que ao longo do tempo esta é incrementada até chegar ao valor desejado de 0,8. Assim, é possível observar o comportamento transiente das chamas até o momento da estabilização destas na região da parede superior. Os efeitos da variação da riqueza de mistura são obtidos alterando-se a constante pré-exponencial da lei empírica de Arrhenius, Eq.(5.14). Uma vez que esta constante é inversamente proporcional ao tempo característico das reações químicas, quanto maior é o seu valor, maior é a velocidade de propagação das chamas, a qual está relacionada ao valor da riqueza da mistura de acordo com a Figura 5.2. Para o valor da constante pré-exponencial de 4000, o tempo característico das reações químicas é igual a  $250 \mu s$ . A espessura de chama laminar pré-misturada de metano e ar é de cerca de 0,25 mm, o que resulta em uma velocidade

de propagação da chama laminar de metano e ar na ordem de 100 cm/s. De acordo com a Figura 5.2, a riqueza de mistura correspondente a esta velocidade de propagação é da ordem de 0,8. Sendo assim, neste trabalho a constante pré-exponencial é iniciada com o valor de 2000 ( $\varphi \approx 0,5$ ), aumentando linearmente a partir de  $t = 35 \text{ ms}$ , até atingir o valor de 4000 ( $\varphi \approx 0,8$ ), em  $t = 50 \text{ ms}$ , se mantendo constante a partir deste ponto até o final das simulações.

As Figuras 5.36(a) a (g) mostram o posicionamento das frentes de chamas, mediante a visualização da taxa de reação química, para uma seção longitudinal situada no centro do canal, ao longo do tempo e em função da riqueza da mistura. Nas Figuras 5.36(a) e (b), nota-se que a posição das chamas coincide com aquela da camada de mistura, onde os valores da intensidade do movimento turbulento são máximos, chegando a 20 m/s, como mostrado na seção 5.3.4.2. Percebe-se, claramente, que estes altos níveis de turbulência interagem com as reações químicas, resultando em chamas instantâneas com espessuras que alcançam valores da ordem de 15 a 20 cm. Adicionalmente, estas chamas são fortemente dobradas e estiradas pelo movimento turbulento, sendo que, na Figura 5.36(b), é possível observar descontinuidades que sugerem a existência de extinções locais das chamas, possivelmente causadas por estiramentos maiores do que o valor crítico de extinção.

Com o aumento da constante pré-exponencial, a velocidade das reações químicas aumenta e a frente de chama tende a consumir mais rapidamente a mistura de gases frescos. Na Figura 5.36(c), nota-se que a frente de chama se desloca em direção a mistura fresca, avançando primeiramente na região próxima da parede superior, onde os valores de velocidade do escoamento são menores. Neste movimento de curvatura e deslocamento da frente de chama, a turbulência atua espalhando porções de gases em processo de reação a jusante, ao longo do comprimento do canal. Observa-se, também, que a chama começa a se inclinar e sair da região de influência da camada de mistura.

Na Figura 5.36(d) a chama continua avançando em direção a mistura fresca, se encontrando com uma maior inclinação, e totalmente fora da região de influência da camada de mistura. Uma vez que nesta região os níveis de intensidade de turbulência são menores, nota-se uma redução significativa na espessura das chamas quando comparada àquelas das figuras anteriores. Entretanto, os efeitos de

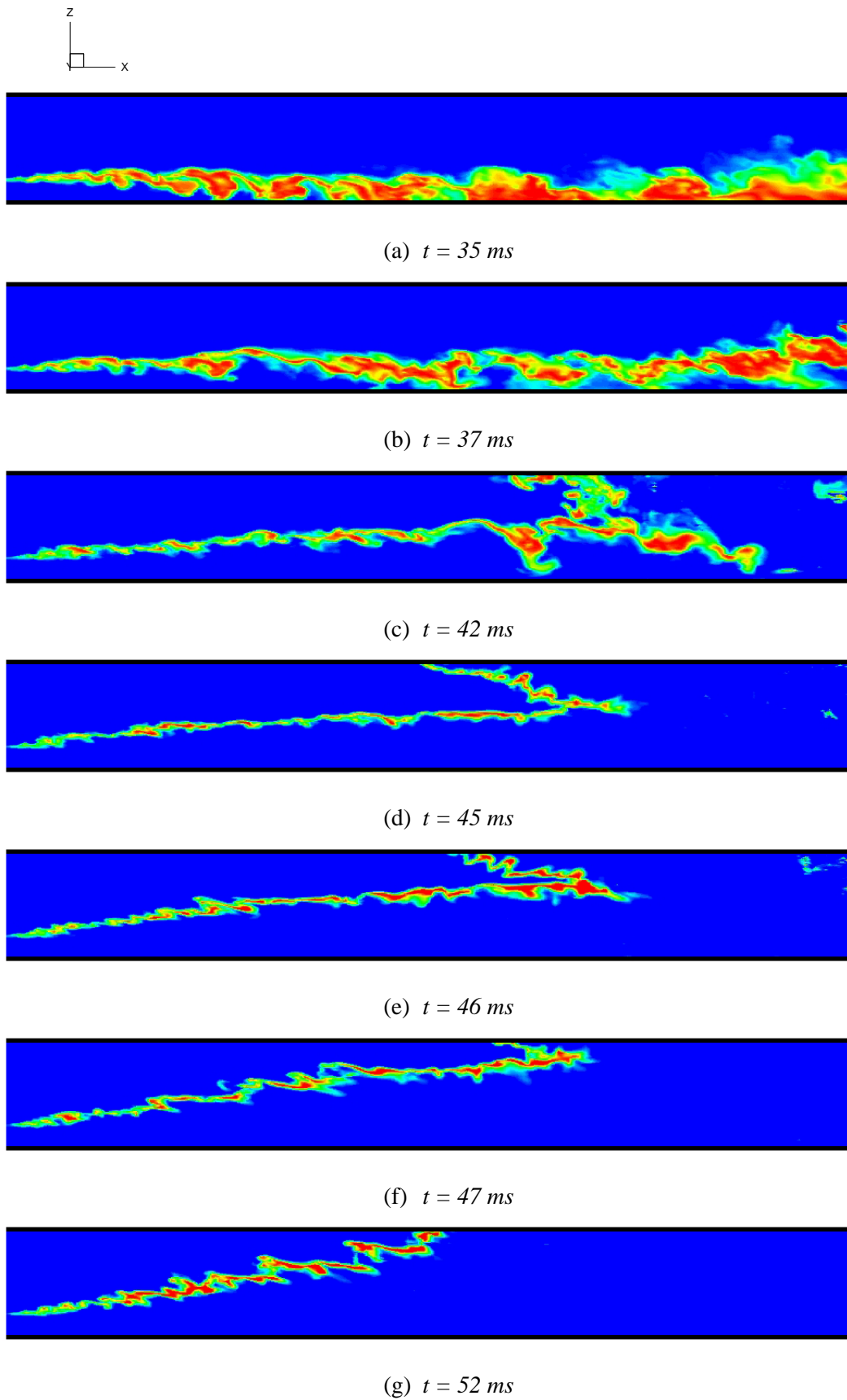


Figura 5.36 Evolução da taxa de reação química ao longo do tempo, para uma seção longitudinal central ao canal, em função do valor da riqueza da mistura.

dobramento e de estiramento continuam evidentes. É possível perceber, também, a existência de um ponto de ancoramento na parede superior do canal.

As Figuras 5.36(e) e (f) sugerem que a inclinação da chama aumenta a medida que a constante pré-exponencial é incrementada, e a Figura 5.36(g) mostra a inclinação final estabelecida com o valor da constante pré-exponencial de 4000, e indica que o ponto de ancoramento na parede superior gira em torno das coordenadas  $x = 300$  a  $400$  mm. Cabe ressaltar que esta figura mostra uma imagem instantânea, sendo que, ao longo do tempo, a posição da chama oscila em torno desta situação.

No regime de chamas espessas da combustão turbulenta pré-misturada é esperado que haja influências recíprocas entre os movimentos turbulentos e a combustão. Assim, a influência da combustão sobre o escoamento é decorrente da liberação de energia oriunda das reações químicas, processo este que resulta em um acréscimo dos valores de temperatura, o qual normalmente está associado a mudanças da densidade e da viscosidade do fluido (Pope, 1987). Em geral, a variação brusca da densidade através da frente de chama pode acarretar em influências no comportamento das propriedades médias e flutuantes do campo de velocidade, ao passo que a variação extrema da viscosidade pode estar relacionada a relaminarizações locais do escoamento. Uma vez que, no presente trabalho, a viscosidade do fluido é mantida constante, somente os fenômenos provenientes da variação da densidade do fluido são aqui investigados.

As Figuras 5.37(a) a (d) mostram a distribuição de temperatura para quatro regiões diferentes da frente de chama mostrada na Figura 5.34, obtida para uma seção longitudinal situada no centro do canal, no instante de tempo  $t = 250$  ms. Nestas figuras, as linhas pretas representam isolinhas da taxa de reação química no valor de  $S(c) = 500 \text{ kgm}^{-3}\text{s}^{-1}$ , as quais delimitam a espessura instantânea da chama. A mistura reativa fresca, que se aproxima da frente de chama com uma temperatura na ordem de 600 K, é representada pela cor azul escuro, e os gases queimados, que se distanciam da frente de chama com temperatura de cerca de 2000 K, são representados pela cor vermelho escuro.

Nota-se que, na região da metade inferior da frente de chama, representada pelas Figuras 5.37(a) e (b), o gradiente de temperatura ocorre ao longo de uma espessura da ordem de 5 cm, sendo que em (b) é possível notar um dobramento intenso da chama. Na região da metade superior da frente de chama, mostrada nas

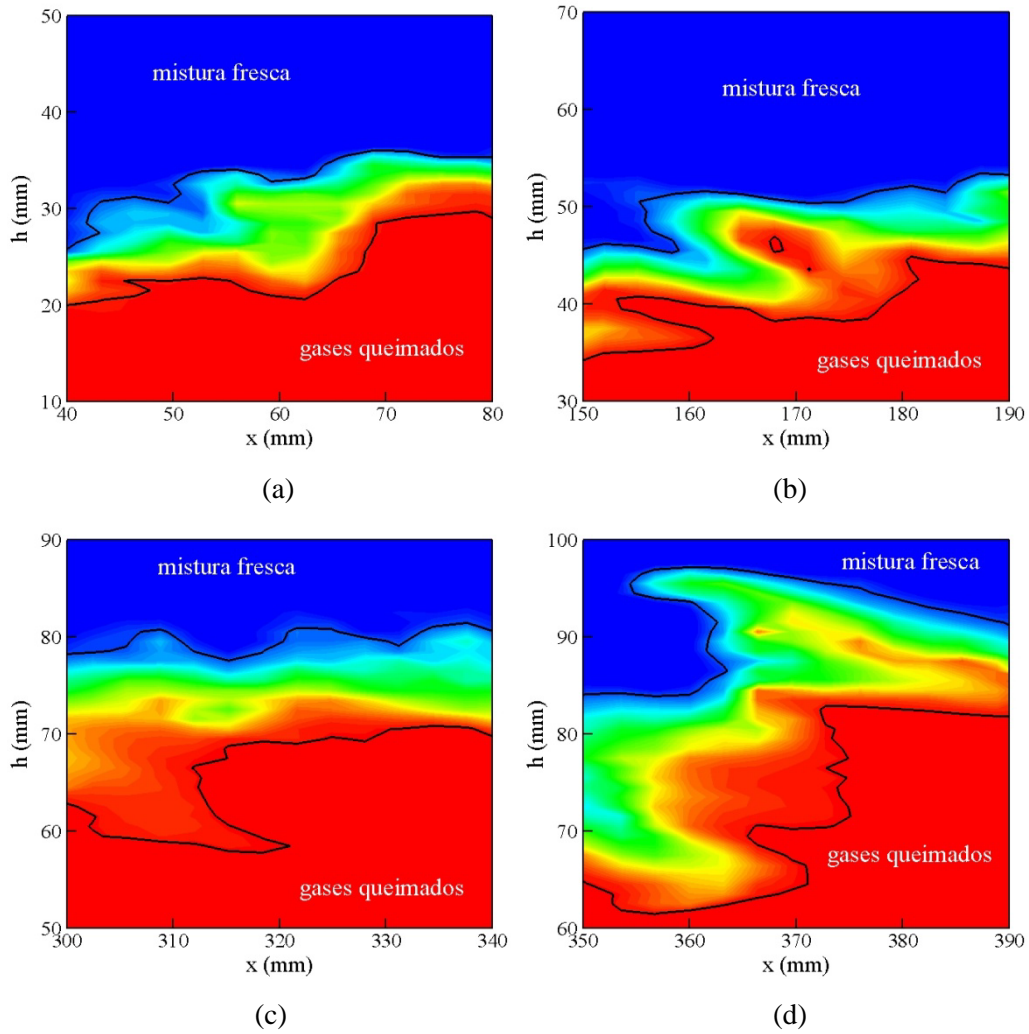


Figura 5.37 Distribuição de temperatura através de diferentes regiões da frente de chama, para um plano longitudinal no centro do canal, em  $t = 250 \text{ ms}$ . As linhas escuras representam os limites da frente de chama, os gases frescos se encontram a temperatura de  $600 \text{ K}$ , e os gases queimados a temperatura de  $2000 \text{ K}$ .

Figuras 5.37(c) e (d), a variação de temperatura ocorre através de uma espessura maior, a qual gira em torno de  $10 \text{ cm}$ . Observa-se que a distribuição da temperatura é menos homogênea nesta região, possivelmente devido ao aumento da difusividade do calor, decorrente da interação das reações químicas com o movimento turbulento.

A variação da temperatura através da frente de chama resulta em uma expansão volumétrica dos gases nesta região e na conseqüente diminuição da densidade do fluido. Este fenômeno pode ser observado nas Figuras 5.38(a) a (d), as quais ilustram a distribuição da densidade, para uma seção longitudinal central ao canal e no instante de tempo  $t = 250 \text{ ms}$ , para as mesmas posições da chama

mostradas na Figura 5.37. Nota-se que os gases frescos se aproximam da frente de chama, representada pelas linhas pretas, com densidade em torno de  $0,6 \text{ kg/m}^3$ . A expansão volumétrica ocorre na região da espessura da chama, onde se localizam os gradientes de temperatura, de modo que os gases queimados se distanciam da chama com uma densidade em torno de  $0,2 \text{ kg/m}^3$ . Neste caso, a razão de variação da densidade é da ordem de 3.

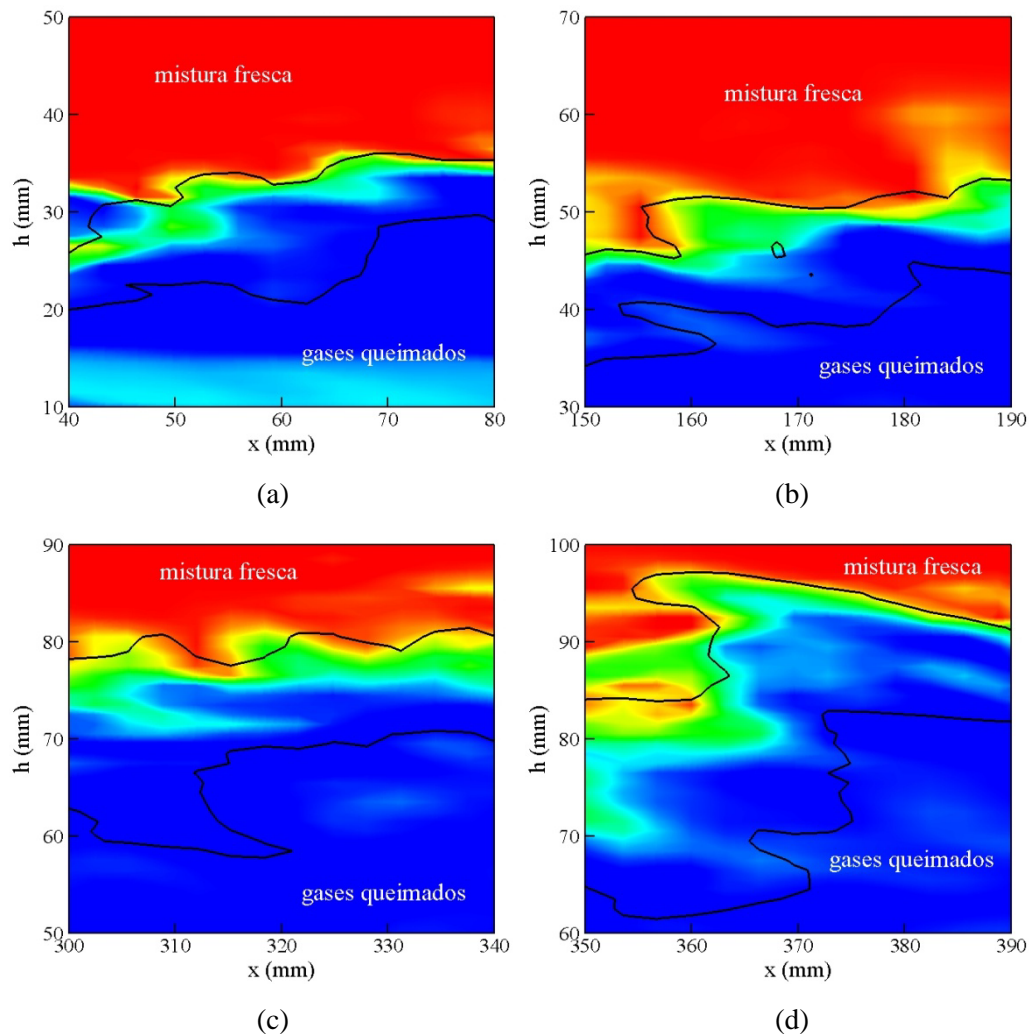


Figura 5.38 Distribuição de densidade através de diferentes regiões da frente de chama, para um plano longitudinal no centro do canal, em  $t = 250 \text{ ms}$ . As linhas escuras representam os limites da frente de chama, os gases frescos possuem densidade em torno de  $0,6 \text{ kg/m}^3$ , e os gases queimados na ordem de  $0,2 \text{ kg/m}^3$ .

A variação obtida da densidade, entre os gases frescos e queimados, pode modificar significativamente o campo médio e flutuante de velocidade, e, dependendo do regime de combustão, contribuir para a ocorrência de fenômenos de ge-



ração de turbulência pela combustão e/ou de transporte turbulento contra-gradiente do campo escalar (Peters, 2000).

Sendo assim, a distribuição da componente longitudinal da velocidade média é apresentada na Figura 5.39, a qual é obtida para uma seção longitudinal no centro do canal, entre as coordenadas  $x = 0$  e  $500 \text{ mm}$ . As linhas pretas representam a espessura média de chama turbulenta,  $\delta_T$ , correspondente da taxa de reação química média no valor de  $\bar{S}(c) = 500 \text{ kgm}^{-3}\text{s}^{-1}$ . Esta figura sugere a existência de uma aceleração do fluido que atravessa a região de posicionamento das frentes de chama, a qual pode ser decorrente da expansão volumétrica oriunda das reações químicas, de maneira a produzir um aumento no campo da velocidade média nos gases queimados. Em particular, este aumento é evidente na região que engloba o início até aproximadamente 95% do comprimento da chama turbulenta média. Na região final da chama, a influência da liberação de calor das reações químicas sobre o escoamento parece ser menor, diminuindo na medida em que a chama se aproxima da parede superior do canal.

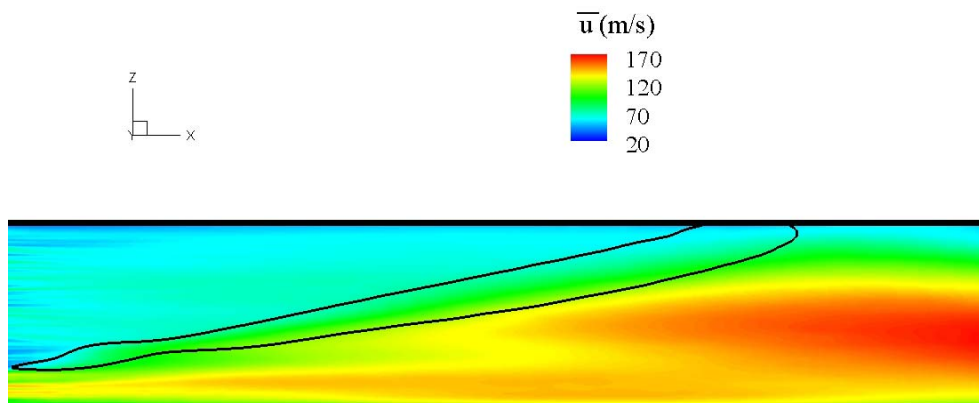


Figura 5.39 Distribuição da componente longitudinal da velocidade média, na região da chama turbulenta média, para uma seção transversal central ao canal, entre as coordenadas  $x = 0$  e  $500 \text{ mm}$ .

A distribuição da componente  $R_{11}$  do tensor de Reynolds é apresentada na Figura 5.40, para uma seção longitudinal localizada no centro do canal, entre as coordenadas  $x = 0$  e  $500 \text{ mm}$ . Este tensor de Reynolds foi obtido a partir da componente resolvida da velocidade, considerando-se a média de 10.000 passos de tempo, tomadas uma vez que o estado estatisticamente estacionário foi atingido. Nota-se que a combustão influencia fortemente a distribuição desta componente, sendo que as influências mais evidentes são encontradas na região interna e

a jusante da posição da chama turbulenta média. A ocorrência de altos valores de  $R_{11}$  nestas regiões, em particular, na metade superior do canal, pode estar associada à aceleração do escoamento através da frente de chama, e ao conseqüente aumento dos valores da componente longitudinal da velocidade flutuante, indicando uma produção de turbulência nestas regiões. Também observa-se que a combustão exerce influências sobre o comportamento da componente  $R_{11}$  na região imediatamente a montante da posição da chama turbulenta média, de modo que estas influências parecem diminuir gradativamente na direção da entrada do canal. Uma análise mais aprofundada destes efeitos será realizada na seção a seguir, a qual envolve comparações dos resultados calculados e medidos experimentalmente.

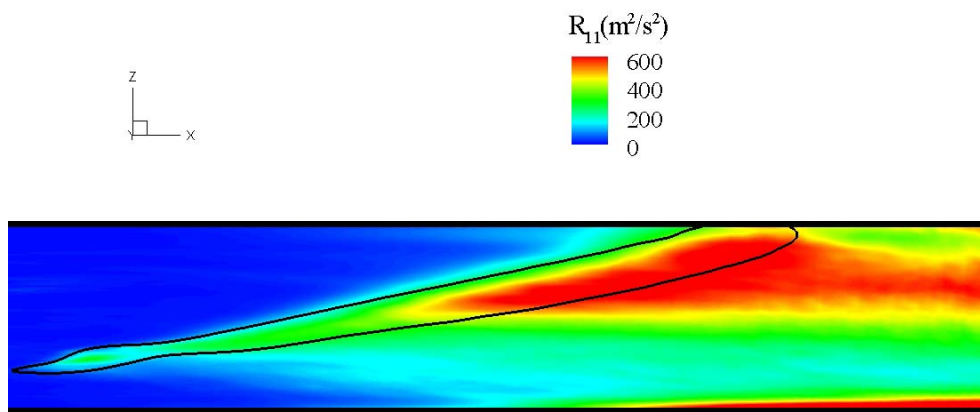
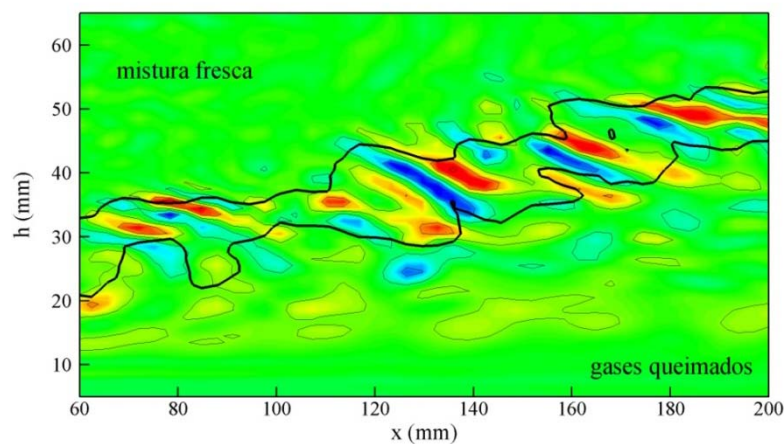


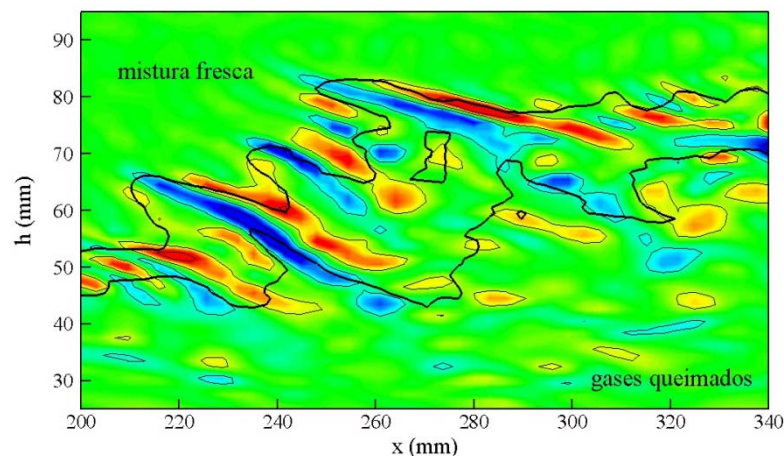
Figura 5.40 Distribuição da componente  $R_{11}$  do tensor de Reynolds, na região da chama turbulenta média, para uma seção transversal localizada no centro do canal, entre as coordenadas  $x = 0$  e  $500 \text{ mm}$ .

Cabe mencionar, também, que de acordo com Magre et al. (1988) os altos gradientes transversais da componente longitudinal da velocidade, encontrados através da frente de chama, resultam em elevados valores da componente  $R_{13}$  do tensor de Reynolds. Isto leva a crer que a maioria da intensidade turbulenta produzida nesta região é decorrente de efeitos de cisalhamento, e que a produção de turbulência pela combustão devida à interação entre a flutuação do campo de densidade e de pressão esteja atuando em níveis menos intensos. No trabalho de Magre et al. (1988) menciona-se a possibilidade deste último mecanismo de geração de turbulência estar atuando de maneira mais significativa na região a montante da frente de chama.

O fenômeno conhecido como FGV (*flame generated vorticity*), revisado na seção 2.1.2, é investigado mediante a visualização da distribuição da componente  $z$  da vorticidade nas Figuras 5.41(a) e (b), as quais mostram as regiões inferiores e superiores da chama obtida no instante de tempo  $t = 250 \text{ ms}$ , respectivamente. A frente de chama é representada pelas linhas pretas, as quais correspondem a taxa de reação química instantânea no valor de  $S(c) = 500 \text{ kgm}^{-3}\text{s}^{-1}$ . A vorticidade positiva é associada à rotação dos vórtices no sentido anti-horário, em relação ao plano longitudinal, e aparece em vermelho, com uma frequência de rotação característica na ordem de  $25000 \text{ s}^{-1}$ . A vorticidade negativa é associada a rotação dos vórtices no sentido horário, e aparece em azul, com uma frequência de rotação característica na ordem de  $-25000 \text{ s}^{-1}$ .



(a) região inferior da frente de chama



(b) região superior da frente de chama

Figura 5.41 Campo da componente  $z$  da vorticidade, obtido na região inferior (a) e superior (b) da frente de chama, para o instante de tempo  $t = 250 \text{ ms}$ . As linhas pretas espessas representam a chama, a vorticidade positiva é caracterizada pela rotação dos vórtices no sentido anti-horário, em vermelho ( $25000 \text{ s}^{-1}$ ), e a negativa pela rotação dos vórtices no sentido horário, em azul ( $-25000 \text{ s}^{-1}$ ).

Ambas as figuras sugerem a presença mais intensa de vórtices na região da frente de chama, o que pode ser decorrente da expansão volumétrica das reações químicas e da conseqüente aceleração brusca dos gases nesta região.

Também há indicações de influências recíprocas dos vórtices sobre a configuração da frente de chama. Na superposição das linhas que delimitam a frente de chama com o campo de vorticidade, observa-se que os vórtices com maiores intensidades de rotação no sentido anti-horário se alinham no sentido de estirar a frente de chama na direção dos gases queimados. Por outro lado, os vórtices com maiores intensidades de rotação no sentido horário parecem tender a estirar a frente de chama na direção dos gases frescos. Assim, é possível que a combinação destes efeitos contribua nos processos de dobramento, estiramento e distribuição das chamas.

Entretanto, é importante ressaltar que a argumentação acima não pode ser considerada conclusiva, uma vez que a Figura 5.41 ilustra o campo de vorticidade e a frente de chama obtida para um único instante de tempo. Uma avaliação mais aprofundada dos efeitos dos vórtices sobre as reações químicas e vice-versa requer o emprego de um histórico de imagens registrado em seqüência, o que possibilitaria a identificação da chegada dos vórtices à frente e chama, da passagem destes através da chama e os fenômenos resultantes da interação. Este tipo de análise está fora do escopo do presente trabalho.

Em relação à possibilidade de ocorrência do fenômeno de transporte difusivo contra-gradiente do campo escalar, representado pela variável de progresso da reação química, uma estimativa é realizada mediante a determinação do número de Bray, Eq. (3-31). A taxa de liberação de calor das reações químicas,  $\tau_{LB}$ , é obtida mediante o uso da relação,  $\rho_b = \rho_u / (1 + \tau_{LB})$ , onde  $\rho_b$  é a densidade dos gases queimados e  $\rho_u$  é a densidade dos gases frescos, resultando em  $\tau_{LB} = 2$ . A velocidade de propagação de uma chama laminar de metano e ar é  $S_L = 1,2 \text{ m/s}$ , e a intensidade turbulenta é da ordem de  $u' = 10 \text{ m/s}$ , resultando em  $N_B \approx 0,24$ . Este valor indica que não haveria a ocorrência de transporte turbulento contra-gradiente da variável de progresso. De fato, nota-se que a ocorrência deste fenômeno é mais comum nos casos de altos números de Damköhler, nos quais as reações químicas acontecem em frentes de chama extremamente finas, de modo a dominar a dinâmica do escoamento nestas áreas.

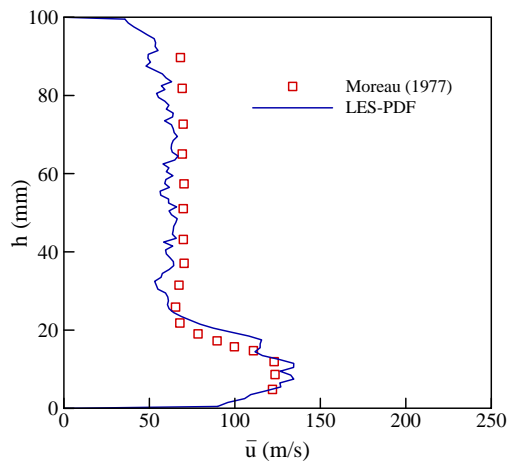
### 5.4.2. Comparação com dados Experimentais

Os resultados mostrados na seção anterior evidenciam a ocorrência de influências mútuas entre a combustão e a turbulência, isto é, a existência de uma forte interação entre estes dois fenômenos. Nesta seção, estes resultados são analisados de maneira quantitativa, mediante comparações com os dados experimentais obtidos por Moreau e Boutier (1977) e Magre et al. (1988). Em particular, são apresentadas evoluções transversais da componente longitudinal da velocidade média, evoluções transversais do rms da componente longitudinal da velocidade flutuante, evoluções transversais da temperatura média e da variância da temperatura, e PDFs da temperatura.

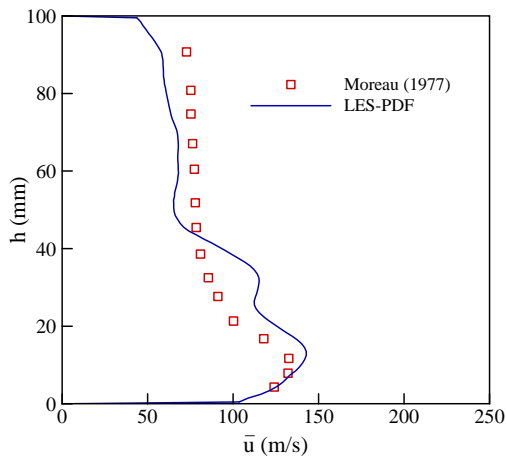
As Figuras 5.42(a) a (f) ilustram a evolução transversal da componente longitudinal da velocidade média, obtidas no plano central do canal, nas coordenadas  $x = 39, 151, 251, 351, 438$  e  $500$  mm. Nota-se que, em  $x = 39$  mm, os valores da velocidade média obtidos pelos cálculos são da mesma ordem de grandeza daqueles alcançados nos casos quimicamente inertes (Figura 5.28), em torno de 65 m/s para os gases frescos e 130 m/s para os gases queimados. As maiores diferenças observadas se encontram na região relativa à entrada dos gases frescos, na qual uma evolução mais uniforme é verificada no caso reativo. Cabe notar que os resultados calculados e medidos apresentam uma boa concordância nesta seção.

Na seção situada em  $x = 151$  mm, nota-se a existência de um acréscimo da velocidade média em relação a seção localizada a montante, em particular na região inferior a  $h \approx 40$  mm, onde é possível perceber a influência da aceleração dos gases ocorrida na região da frente de chama média. O valor máximo da velocidade média nesta seção é de aproximadamente 140 m/s. Na região da metade superior do canal, os valores da velocidade giram em torno de 70 m/s, sendo que os valores calculados são cerca de 5% mais baixos do que os experimentais.

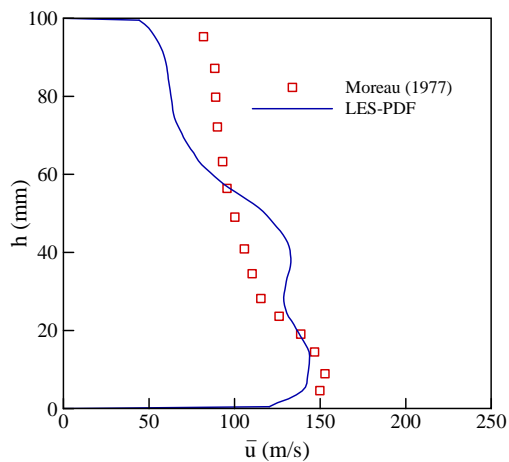
Na medida em que as seções transversais se deslocam a jusante, ficam mais evidentes os efeitos da aceleração do escoamento pela frente de chama. Na seção situada em  $x = 251$  mm, o valor máximo da velocidade é da ordem de 150 m/s, em torno de  $h = 15$  mm, sendo que há uma razoável concordância entre os resultados calculados e medidos nesta região. Na região da metade superior do canal, os valores medidos de velocidade giram em torno de 100 m/s, sendo que é possí-



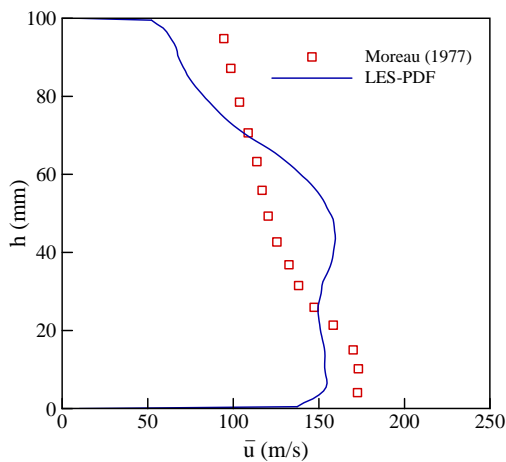
(a)  $x=39\text{ mm}$



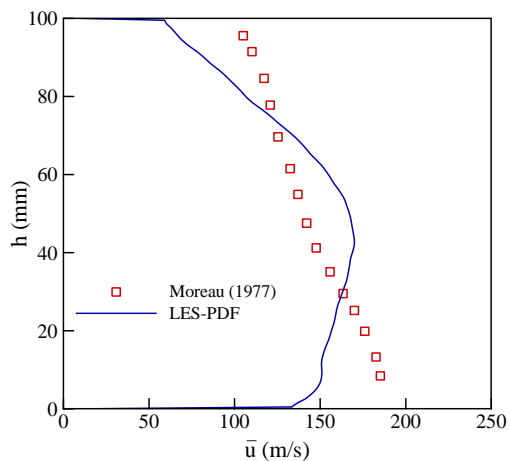
(b)  $x=151\text{ mm}$



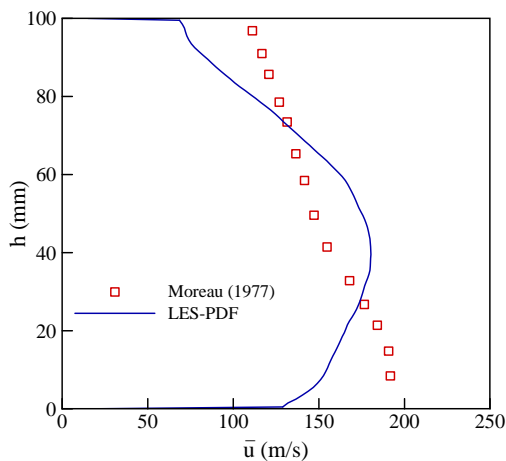
(c)  $x=251\text{ mm}$



(d)  $x=351\text{ mm}$



(e)  $x=438\text{ mm}$



(f)  $x=500\text{ mm}$

Figura 5.42 Evoluções transversais da componente longitudinal da velocidade média, obtidas na linha de centro do canal, para o caso reativo, e para as coordenadas  $x$  iguais a: (a)  $39\text{ mm}$ , (b)  $151\text{ mm}$ , (c)  $251\text{ mm}$ , (d)  $351\text{ mm}$ , (e)  $438\text{ mm}$  e (f)  $500\text{ mm}$ .

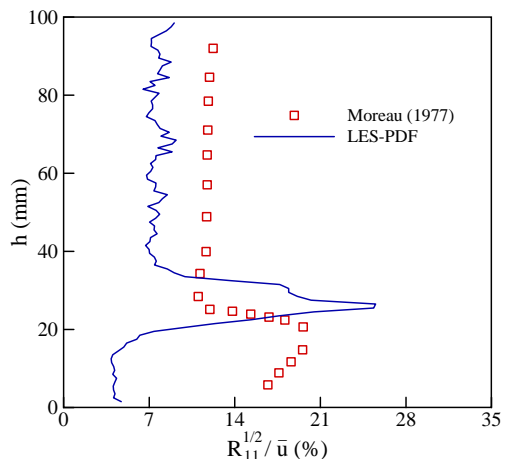
vel perceber um bom acordo com os cálculos até  $h \approx 60 \text{ mm}$ . Acima desta altura, os cálculos fornecem valores cerca de 10% inferiores aos experimentais.

Na seção situada em  $x = 351 \text{ mm}$ , os maiores valores da velocidade média calculada e medida giram em torno de 170 m/s. As medições mostram que os efeitos da aceleração do escoamento pela combustão são distribuídos de maneira razoavelmente uniforme ao longo da seção transversal. O resultado obtido sugere que estes efeitos são sentidos com mais intensidade na região da meia altura do canal. É possível notar que em  $h \approx 50 \text{ mm}$  o cálculo fornece valores máximos de velocidade em torno de 170 m/s, enquanto os valores do experimento são de aproximadamente 120 m/s. Na região acima de  $h \approx 70 \text{ mm}$ , os valores calculados são da ordem de 10 % mais baixos do que os medidos, mantendo o mesmo comportamento apresentado pela seção localizada imediatamente a montante, para região próxima a parede superior do canal.

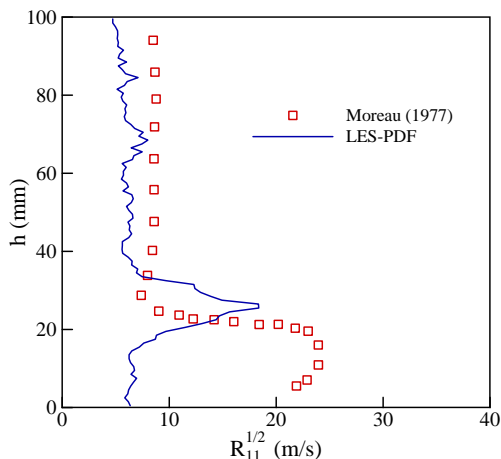
Nas seções transversais situadas em  $x = 438$  e  $500 \text{ mm}$ , há indicações que os valores da componente longitudinal da velocidade ainda refletem as influências da expansão volumétrica das reações químicas. No cálculo um aumento da velocidade é evidente na região da meia altura do canal, ao passo que no experimento os maiores valores são encontrados na região inferior do canal. Na seção mais a jusante destas, os valores máximos medidos giram em torno de 200 m/s e os calculados em torno de 190 m/s. Também é possível verificar que os cálculos subestimam em cerca de 10% os valores medidos nas regiões da parede superior e inferior do canal. Nestas duas seções, as discrepâncias observadas são conseqüências da evolução do escoamento de montante a jusante.

As evoluções do rms da componente longitudinal da velocidade flutuante e da taxa de turbulência média correspondente, para seções transversais localizadas no plano central do canal e nas coordenadas  $x = 39, 438$  e  $650 \text{ mm}$ , são mostradas nas Figuras 5.43(a) a (f).

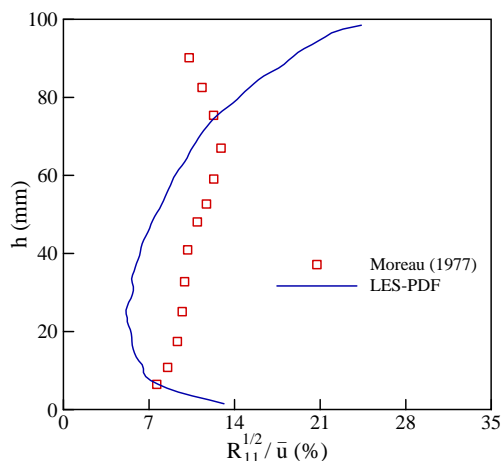
Na Figura 5.43(a), nota-se que a intensidade turbulenta calculada na região de entrada da mistura fresca é de cerca de 9%, enquanto os dados experimentais mostram valores na ordem de 12%. Na região de entrada dos gases queimados, os valores máximos calculados são da ordem de 25%, ao passo que o experimento mostra valores em torno de 20%. A Figura 5.43(b) mostra que o rms da componente longitudinal da velocidade flutuante, na região de entrada da mistura fresca,



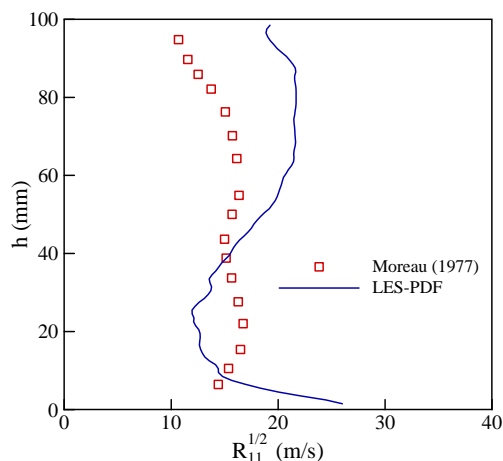
(a)  $x=39\text{ mm}$



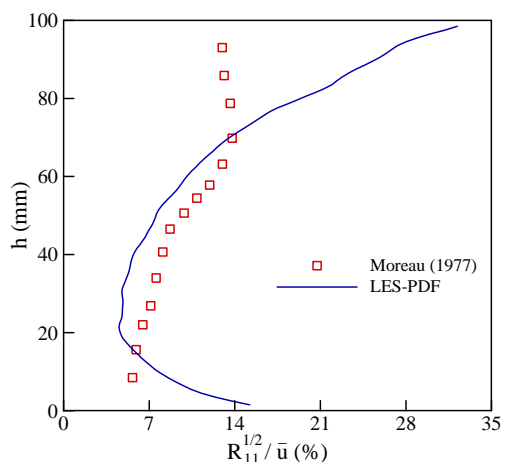
(b)  $x=39\text{ mm}$



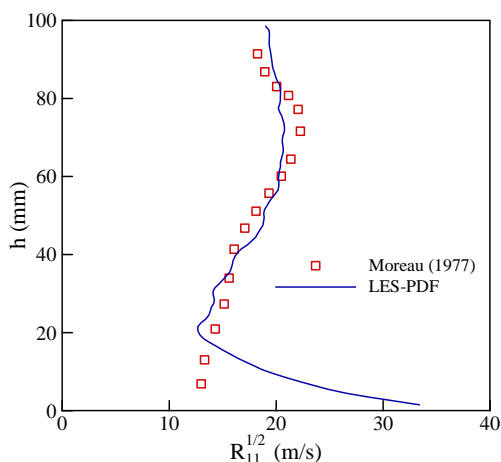
(c)  $x=438\text{ mm}$



(d)  $x=438\text{ mm}$



(e)  $x=650\text{ mm}$



(f)  $x=650\text{ mm}$

Figura 5.43 Evoluções transversais da intensidade turbulenta e do rms da componente longitudinal da velocidade flutuante, obtidas na linha central do canal, para o caso reativo, e para as coordenadas  $x = 39, 438$  e  $650\text{ mm}$ .



é de cerca de 7 m/s, enquanto os dados experimentais mostram valores na ordem de 9 m/s. Na região de entrada dos gases queimados, os valores máximos calculados são da ordem de 18 m/s, sendo que o experimento mostra valores em torno de 24 m/s.

Comparando-se estes valores com aqueles obtidos nos casos quimicamente inertes (Figuras 5.29(a) e (b)), observa-se um aumento significativo das flutuações turbulentas na entrada do domínio de cálculo. Isto indica que as reações químicas também exercem influências sobre o comportamento da turbulência na região a montante da frente de chama, a qual se estende até a entrada do canal. Estas influências podem estar relacionadas às flutuações da densidade, ocasionadas pela intermitência dos gases frescos e gases queimados em determinadas regiões da frente de chama, as quais resultam em flutuações de pressão que induzem ao aumento do movimento turbulento. Mecanismos desta natureza são discutidos de maneira aprofundada em estudos como o de Robin et al. (2008), o qual utiliza equações de transporte da energia cinética turbulenta e do fluxo turbulento da variável de progresso para identificar o acoplamento entre os efeitos da flutuação da densidade, pressão e velocidade. O presente trabalho se limita a indicar a possibilidade de ocorrência destes fenômenos. Cabe ressaltar que, devido a turbulência gerada a montante da frente e chama pela combustão, os problemas relacionados as condições de contorno de entrada turbulentas, discutidos nas seções envolvendo as simulações dos casos quimicamente inertes, são atenuados.

Na Figura 5.43(c), as medições experimentais mostram que a intensidade turbulenta imediatamente a jusante da região da frente de chama é aproximadamente uniforme e gira em torno de 10%. O cálculo sugere uma concordância relativamente boa com estas medidas, até a altura do canal de cerca de 70 mm, a partir da qual existem diferenças consideráveis. Cabe mencionar que estas discrepâncias podem estar relacionadas com a baixa estimativa da velocidade média na região da parede superior do canal, mostrada na Figura 5.42(e). Na Figura 5.43(d), nota-se que os resultados obtidos seguem a tendência da evolução transversal dos dados medidos, na metade superior do canal, sendo os valores calculados da ordem de 22 m/s e os do experimento ao redor de 15 m/s. Na metade inferior do canal, o cálculo apresenta valores em torno de 12 m/s, enquanto o experimento mostra a mesma distribuição aproximadamente uniforme da metade superior do canal, com valores em torno de 15 m/s.

De um modo geral, na seção transversal mais a jusante da frente de chama, em  $x = 650 \text{ mm}$ , há um razoável acordo entre cálculo e experimento. A Figura 5.43(e) mostra que a intensidade turbulenta nesta seção é mais elevada na região da metade superior do canal e gira em torno de 28%, sendo encontradas maiores discrepâncias entre cálculo e medições na região a partir de  $h \approx 80 \text{ mm}$ . Como mencionado, estas diferenças parecem estar relacionadas com a baixa estimativa da velocidade média nesta região. Na Figura 5.43(f) observa-se um bom acordo do cálculo com o experimento a partir de  $h \approx 20 \text{ mm}$ . Em ambos os casos, os valores do rms da componente longitudinal da velocidade flutuante na região superior do canal giram em torno de 20 m/s, porém, na metade inferior do canal, o cálculo mostra valores máximos de 30 m/s, enquanto o experimento sugere valores da ordem de 15 m/s. Esta boa concordância coloca em evidência a capacidade da metodologia de prever a intensificação da agitação turbulenta promovida pela chama, o que possivelmente não seria alcançado com a utilização de modelos baseados em média de Reynolds.

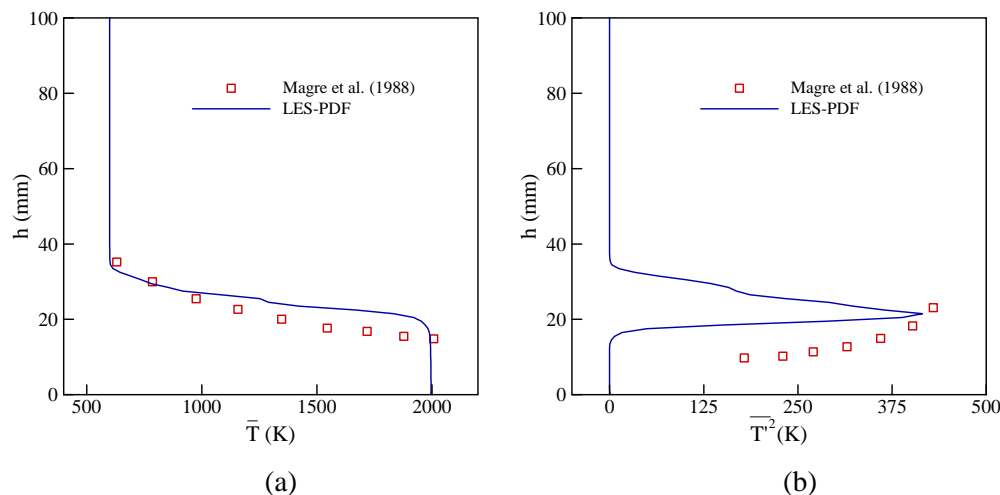


Figura 5.44 Evolução transversal da (a) temperatura média e (b) variância da temperatura, em uma seção transversal situada 42 mm a jusante da entrada do canal, para o caso reativo.

A evolução transversal da temperatura média, para uma seção central ao canal e na coordenada  $x = 42 \text{ mm}$ , é mostrada na Figura 5.44(a). Nota-se que, de um modo geral, os resultados calculados apresentam boa concordância com os dados medidos, em particular, na região superior a  $h \approx 25 \text{ mm}$ . Na região inferior a esta posição, percebem-se discrepâncias que aumentam gradualmente na dire-

ção da parede inferior. No cálculo, a temperatura de 2000 K é obtida para uma altura em torno de 20 mm, enquanto no experimento esta temperatura é obtida para a altura em torno de 17 mm. Estas diferenças podem estar relacionadas ao ângulo de inclinação da frente de chama média em relação ao eixo longitudinal do canal. Neste caso, o cálculo parece fornecer uma inclinação ligeiramente superior do que aquela fornecida pelo experimento.

A Figura 5.44(b) mostra a evolução da variação da temperatura para mesma seção transversal. O valor extremo calculado é ligeiramente menor do que aquele medido, sendo que o primeiro gira em torno de 400 K e o segundo de 425 K. Na região inferior a  $h = 20 \text{ mm}$ , os cálculos mostram valores mais baixos do que os medidos, indicando que a condição de entrada do escalar relativo no domínio de cálculo deveria incluir uma descrição da flutuação dos gases frescos e queimados.

As Figuras 5.45(a) a (d) ilustram as PDFs da temperatura, obtidas na linha de centro do canal, na coordenada  $x = 42 \text{ mm}$  e para as alturas  $h = 10, 20, 25$  e  $45 \text{ mm}$ , respectivamente. Na posição  $h = 10 \text{ mm}$ , o cálculo sugere a ocorrência predominante de temperaturas de cerca de 2000 K, com probabilidade máxima de 6%. As medições mostram que temperaturas de 1700 a 2300 K podem ocorrer, com a maior probabilidade girando em torno de 4% para 2000 K. Nesta posição, ambos os casos sugerem PDFs monomodais. O maior espalhamento da PDF experimental indica que é necessário implementar uma condição de entrada do escalar que descreva a distribuição observada.

Para a posição  $h = 20 \text{ mm}$ , os dados medidos sugerem uma PDF bimodal, levando a crer que nesta região há uma intermitência de gases frescos e queimados, com maiores probabilidades de ocorrência em torno de 1% para temperaturas de 600 e 1600 K, respectivamente. O cálculo mostra uma probabilidade máxima de cerca de 1% da ocorrência de gases queimados, a temperatura em torno de 1600 K, nesta posição. Estes resultados sugerem uma pequena diferença no ângulo de inclinação da frente de chama turbulenta média, entre o cálculo e as medições, em relação ao eixo longitudinal do canal. No cálculo, a frente de chama média estaria um pouco mais inclinada, o que explicaria a predominância de gases queimados a 1600 K. Nas medições, as frentes de chama estariam oscilando intensamente ao redor de uma inclinação um pouco menos acentuada, o que explicaria a intermitência entre gases frescos e queimados, representada pela PDF bimodal da temperatura.

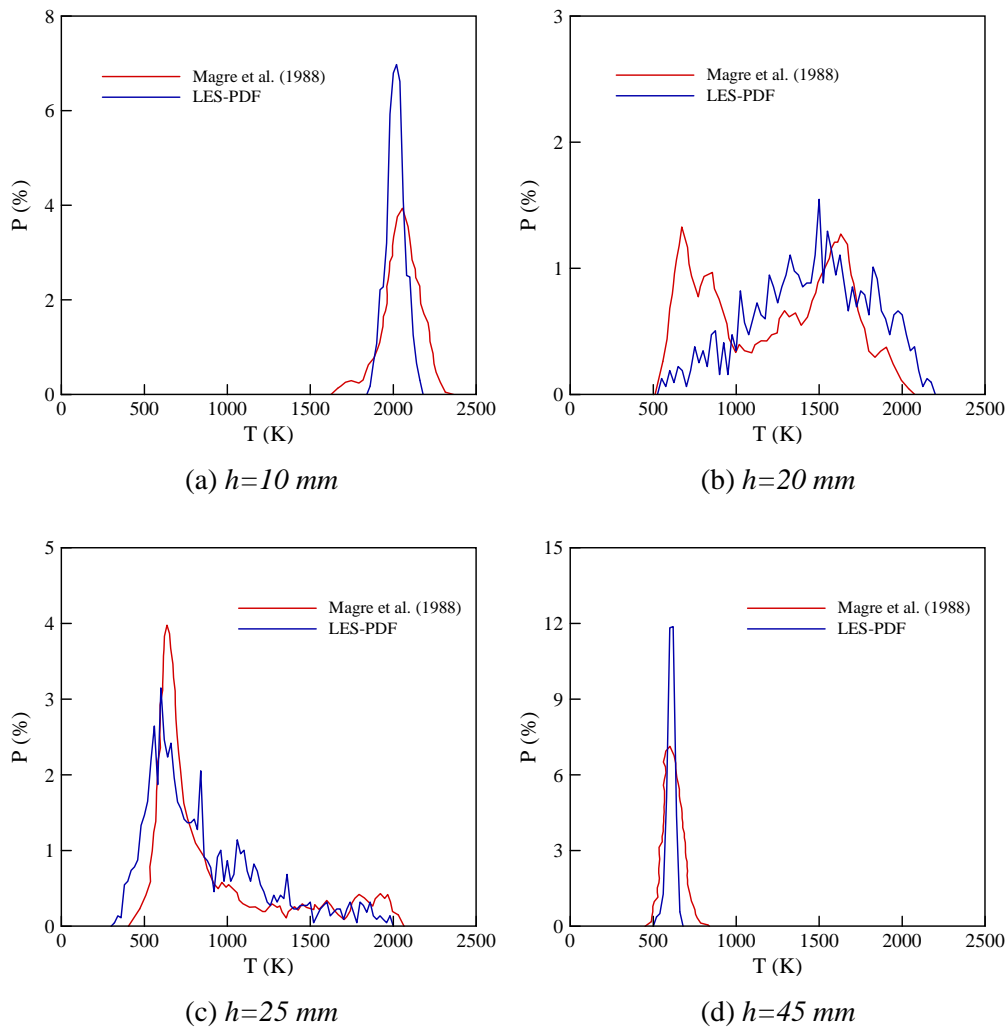


Figura 5.45 Comparações das PDFs da temperatura calculadas em relação às medidas, para o caso reativo e para um plano longitudinal central ao canal, na coordenada  $x = 42\text{ mm}$ , e para alturas iguais a: (a)  $10\text{ mm}$ , (b)  $20\text{ mm}$ , (c)  $25\text{ mm}$ , e (d)  $45\text{ mm}$ .

Na posição  $h = 25\text{ mm}$ , observa-se uma boa concordância entre as formas das PDFs calculada e medida, de modo que ambas sugerem a predominância de gases frescos a temperatura de  $600\text{ K}$ . Os resultados obtidos e as medições indicam probabilidades máximas de  $3\%$  e  $4\%$  da ocorrência desta temperatura, respectivamente. Ambos também sugerem probabilidades de se obter temperaturas superiores, entre  $1000$  e  $2000\text{ K}$ , indicando que esta região ainda é influenciada pela camada de mistura. As PDFs obtidas na posição  $h = 45\text{ mm}$  mostram que esta região sofre pouca influência da camada de mistura, com a predominância dos gases frescos a temperaturas de  $600\text{ K}$ . O cálculo sugere uma probabilidade

máxima de ocorrência de 11% desta temperatura, enquanto as medições indicam o valor máximo de 7%.

Cabe notar que a maior dispersão dos resultados experimentais em torno da média, em particular, para as seções localizadas em  $h = 10$  e  $45 \text{ mm}$ , sugere que também seria interessante implementar condições de entrada flutuantes para a variável de progresso da reação química, as quais representassem o comportamento da mistura fresca pré-aquecida e dos gases queimados, oriundos do duto principal e do queimador auxiliar, respectivamente.

As Figuras 5.46(a) a (f) ilustram as PDFs da temperatura, obtidas na linha de centro do canal, na coordenada  $x = 122 \text{ mm}$ , e para as alturas  $h = 15, 20, 25, 30, 40$  e  $50 \text{ mm}$ , respectivamente. Na posição  $h = 15 \text{ mm}$ , as PDFs calculada e medida experimentalmente apresentam uma boa concordância entre si. Ambos os casos sugerem uma forma monomodal, com predominância de gases queimados a temperaturas que variam de 1500 a 2400 K. A probabilidade de ocorrência máxima é de 3% para temperaturas em torno de 2000 K.

Na posição  $h = 20 \text{ mm}$ , a medição indica a ocorrência máxima de cerca de 2,5% de gases queimados a temperatura em torno de 2000 K e o cálculo indica uma probabilidade máxima de cerca de 2 % da ocorrência de gases a esta mesma temperatura. A PDF medida indica também uma ocorrência de aproximadamente 0,25% de gases a temperatura entre 500 e 1000 K, sendo que este comportamento não é verificado nos resultados calculados.

Em  $h = 25 \text{ mm}$  é evidente, no experimento, o acréscimo da ocorrência de temperaturas entre 500 e 1000 K, chegando à ordem de 0,75%, indicando uma tendência de bimodalidade da PDF. No entanto, a ocorrência de gases a temperatura de 2000 K é predominante, com uma probabilidade máxima em torno de 2%. Nota-se, nos resultados calculados, a ausência de temperaturas abaixo de 1000 K e a probabilidade máxima de ocorrência de 2% de gases a 2000 K.

Na posição  $h = 30 \text{ mm}$  as medições ilustram uma PDF bimodal, sugerindo um comportamento intermitente entre os gases frescos e queimados. O cálculo apresenta uma PDF mais uniforme, com probabilidades máximas de ocorrência de temperaturas de 1700 e 2000 K. Como mencionado anteriormente, esta disparidade pode estar associada ao ângulo de inclinação da frente de chama turbulenta média, o qual parece ser ligeiramente menor nas medições do que no cálculo.

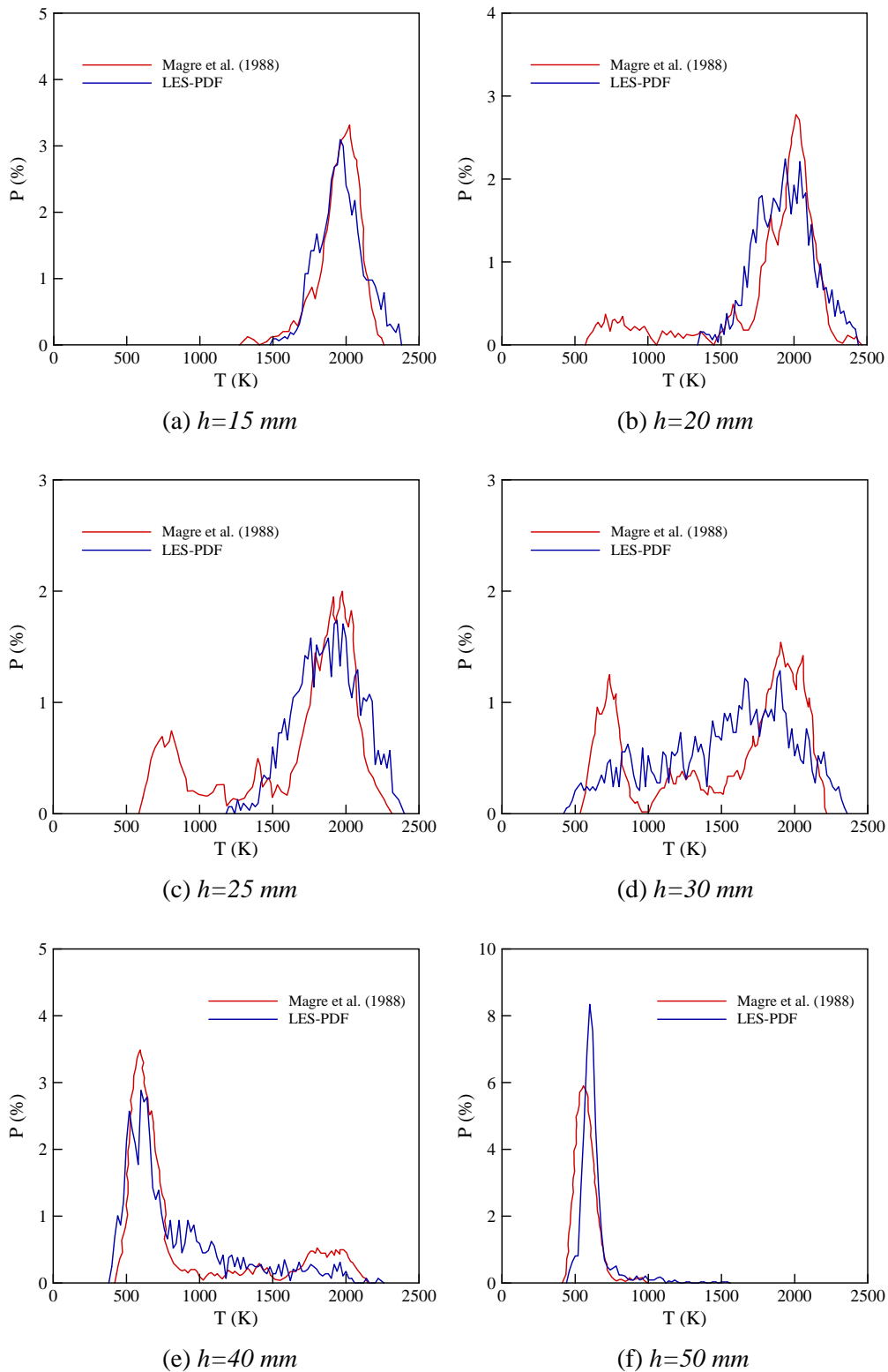


Figura 5.46 Comparações das PDFs da temperatura calculadas em relação as medidas, para o caso reativo e para um plano longitudinal central ao canal, na coordenada  $x = 122$  mm, e para alturas iguais a: (a) 15 mm, (b) 20 mm, (c) 25 mm, (d) 30 mm, (e) 40 mm e (f) 50 mm.

Porém, ao contrário do que se esperava inicialmente, é possível que o modelo de micro-mistura IEM, utilizado no presente trabalho, também contribua para uma distribuição mais uniforme da PDF nesta posição. Tal modelo assume uma relaxação do escalar em torno de seu valor médio, com uma velocidade proporcional a frequência de mistura turbulenta das partículas estocásticas utilizadas no método de Monte Carlo. Uma vez que, neste trabalho, um valor idêntico da frequência turbulenta calculada por LES é transferido para as partículas contidas no mesmo volume de controle, os valores escalares associados a estas partículas tendem ao valor médio com a mesma velocidade, o que pode resultar em distribuições mais uniformes do escalar em regiões nas quais o processo de micro-mistura é predominante. Uma vez que a frequência turbulenta de cada partícula pode ser influenciada pela passagem da chama, efeito este claramente ausente na modelagem IEM, a utilização de um modelo que leve em consideração uma equação de transporte para a frequência de mistura turbulenta de cada partícula, tal como o EIEM (*Extended Interaction with the Mean*) utilizado em Orbegoso e Figueira da Silva, (2009), talvez pudesse fornecer uma descrição mais precisa do processo de micro-mistura.

Na posição  $h = 40 \text{ mm}$  há um bom acordo entre as PDFs calculada e medida, de modo que ambas mostram a probabilidade máxima de cerca de 3% de ocorrência de gases frescos a temperatura de 600 K. Nesta posição ainda é possível se encontrar gases com temperatura de até 2000 K, entretanto, as PDFs são predominantemente monomodais. Na posição  $h = 50 \text{ mm}$ , também há uma boa concordância entre os resultados calculados e medidos, de modo que as probabilidades máximas de ocorrência de gases a temperatura de 600 K são de 6% e 8%, respectivamente.