



**André Reinaldo Novgorodcev Junior**

**Estudo numérico e experimental da combustão  
turbulenta não pré-misturada de um jato de  
hidrogênio no ar.**

**Dissertação de Mestrado**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Mecânica da PUC-Rio como requisito parcial para obtenção do grau de Mestre em Engenharia Mecânica.

Orientador: Prof. Luís Fernando Figueira da Silva

Rio de Janeiro  
Maio 2012



**André Reinaldo Novgorodcev Junior**

**Estudo numérico e experimental da combustão  
turbulenta não pré-misturada de um jato de  
hidrogênio no ar.**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Mecânica da PUC-Rio como requisito parcial para obtenção do grau de Mestre em Engenharia Mecânica. Aprovada pela Comissão Examinadora abaixo assinada.

**Prof. Luís Fernando Figueira da Silva**

Orientador

Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro

**Prof. Armando de Azevedo Caldeira Pires**

Universidade de Brasília

**Dr. Ricardo Serfaty**

Petrobras

**Prof. Marcos Sebastião de Paula Gomes**

Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro

**Prof. José Eugênio Leal**

Coordenador Técnico Científico — PUC-Rio

Rio de Janeiro, 23 de maio de 2012

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

### **André Reinaldo Novgorodcev Junior**

Graduado em engenharia mecânica na Universidade de Brasília - UnB em 2003. Adentrou a Petrobras em 2005 onde trabalha até o presente momento como engenheiro de equipamentos mecânicos pleno da gerência de gás, energia e gás química do Centro de Pesquisas e Desenvolvimento Leopoldo Américo Miguez de Mello (CENPES).

#### Ficha Catalográfica

Novgorodcev Jr, André Reinaldo

Estudo numérico e experimental da combustão turbulenta não pré-misturada de um jato de hidrogênio no ar. / André Reinaldo Novgorodcev Junior; orientador: Prof. Luís Fernando Figueira da Silva. — Rio de Janeiro : PUC–Rio, Departamento de Engenharia Mecânica, 2012.

v., 194 f: il. ; 29,7 cm

1. Dissertação (mestrado) - Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Departamento de Engenharia Mecânica.

Inclui referências bibliográficas.

1. Engenharia Mecânica – Dissertação. 2. Modelagem da Combustão;. 3. Corpo Rombudo;. 4. Simulação Numérica;. 5. PLIF;. 6. PIV;. 7. Combustão do hidrogênio.. I. Figueira da Silva, Luís Fernando. II. Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro. Departamento de Engenharia Mecânica. III. Título.

CDD: 000

Ao meu filho Pedro.

## Agradecimentos

Aos meus pais e às minhas avós que me transmitiram os seus valores e me guiaram no caminho que me trouxe até aqui. À minha esposa Mariana que sempre me apoiou nos momentos que tinha que conciliar o trabalho, os estudos e os cuidados com nosso filho. Ao meu filho Pedro que, mesmo me deixando noites sem dormir, é a minha grande fonte de inspiração e motivação para buscar sempre o meu melhor e para finalizar este trabalho.

A todos que me ajudaram a completar este trabalho, em especial aos meus companheiros de aulas de combustão Nattan, que me ajudou muito no laboratório, Américo que me ajudou com o LaTeX e Elder que me ajudou com a parte de cinética química.

Agradeço também à PETROBRAS por ter me apoiado no mestrado e aos meus colegas de trabalho que receberam uma carga maior de atividades durante a execução deste trabalho, destacando o Castellões, o Newton, a Patrícia Oliva, o Cleber e o Frederico.

E por fim, ao orientador, Professor Doutor Luís Fernando Figueira da Silva pelo apoio prestado, pela confiança depositada, incentivo e incansável dedicação durante todo o tempo investido para a realização deste trabalho. E aos membros da banca, Armando Caldeira e Ricardo Serfaty que com suas contribuições aumentaram enormemente a qualidade do trabalho.

## Resumo

Novgorodcev Jr, André Reinaldo; Figueira da Silva, Luís Fernando. **Estudo numérico e experimental da combustão turbulenta não pré-misturada de um jato de hidrogênio no ar.** Rio de Janeiro, 2012. 194p. Dissertação de Mestrado — Departamento de Engenharia Mecânica, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro.

O presente trabalho tem por objetivo a realização de experimentos e simulações numéricas para estudar a interação da turbulência e da combustão em uma chama não pré-misturada de hidrogênio no ar estabilizada a jusante de um corpo rombudo. Para tanto, são utilizadas, simultaneamente, as técnicas de PIV, para a determinação de dois componentes da velocidade, e a técnica de PLIF para a determinação da intensidade de fluorescência do radical químico OH, que é um bom indicador da localização da frente de chama. São avaliados os métodos de pós processamento dos resultados do PIV com o intuito de maximizar a resolução espacial da técnica e ao mesmo tempo remover o maior número de vetores espúrios dos campos de velocidade instantâneos. Paralelamente, o queimador é modelado no *software* ANSYS/FLUENT e os resultados de simulação validados por comparação com os resultados experimentais. Modelos baseados nas médias de Reynolds são empregados para a caracterização da turbulência e o modelo de elementos de chama é adotado para a descrever a combustão. Os resultados experimentais indicam que, para as vazões de ar e hidrogênio adotadas, a combustão ocorre no regime de elementos de chama, onde a frente de chama apresenta algumas dobras, mas sem descontinuidades. Os resultados das simulações com combustão não obtiveram boa concordância com os resultados experimentais, indicando que a malha de cálculo precisa ser aprimorada.

## Palavras-chave

Modelagem da Combustão; Corpo Rombudo; Simulação Numérica; PLIF; PIV; Combustão do hidrogênio.

## Abstract

Novgorodcev Jr, André Reinaldo; Figueira da Silva, Luís Fernando (Advisor). **Numerical and experimental study of the turbulent non-premixed combustion of a hydrogen jet in air**. Rio de Janeiro, 2012. 194p. MSc. Dissertation — Departamento de Engenharia Mecânica, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro.

The aim of this work is to carry out experiments and numerical simulations to study the turbulence-combustion interaction in a non-premixed hydrogen-air flame stabilized in a bluff body wake. For this purpose, are used a PIV technique for the determination of two velocity components and a PLIF technique to determine the fluorescence intensity of the chemical species OH, which is a good indicator of the flame front location. PIV post-processing methods are evaluated in order to maximize the spatial resolution of the technique and to remove spurious instantaneous velocity vectors. In addition, the burner is modeled in ANSYS / FLUENT and the simulation results are validated by comparisons with the experimental results. Models based in the Reynolds averages are used to characterize the turbulence and a flamelet model is adopted to describe combustion. The experimental results indicates that, for the flow rates of air and hydrogen adopted, combustion occurs in the flamelet regime, where the flame front is wrinkled, but without discontinuities. The reactive cases simulations did not agree with the experimental results, indicating that the computational mesh needs to be improved.

## Keywords

Combustion Modelling; Bluffy body; Numerical Simulation; PLIF; PIV; Hydrogen Combustion.

## Sumário

1	Introdução	<b>23</b>
1.1	Aspectos Históricos e Econômicos	23
1.2	Produção	25
1.3	Transporte e Estocagem	26
1.4	Conversão	28
1.5	Objetivos deste Trabalho	32
1.6	Organização do Manuscrito	32
2	Revisão Bibliográfica	<b>34</b>
2.1	Estudos Experimentais	34
2.2	Estudos Numéricos	43
2.3	Considerações Finais	55
3	Metodologia Experimental	<b>57</b>
3.1	Montagem Experimental	57
3.2	Diagnósticos a Laser	60
3.3	Concentração de Espécies Químicas	61
3.4	Campo de Velocidade	68
3.5	Análise de Incerteza de Medição	83
3.6	Comentários Finais	95
4	Metodologia Numérica	<b>97</b>
4.1	Modelagem da Turbulência	97
4.2	Modelagem da Combustão	109
4.3	Malha Computacional	115
4.4	Condições de Contorno	119
5	Resultados e Discussões	<b>124</b>
5.1	Estudo dos Parâmetros de Processamento dos Resultados Experimentais	125
5.2	Estudo de Malha Computacional	135
5.3	Seleção do Modelo de Turbulência	145
5.4	Casos com combustão	162
6	Conclusões e Sugestões	<b>180</b>
6.1	Conclusões e Contribuições	180
6.2	Sugestão de Trabalhos Futuros	182
	Referências Bibliográficas	<b>184</b>
A	Mecanismo de Reação do Hidrogênio	<b>193</b>

## Lista de Figuras

1.1	Matriz energética mundial (adaptado de (BP, 2010)).	23
1.2	Principais eventos que influenciaram o preço do petróleo nos EUA (adaptado de (Williams, 2011)).	24
1.3	Densidade energética do hidrogênio comprimido (GH2) e líquido (LH2) em comparação com metas, gasolina e baterias (adaptado de (Verhelst <i>et al.</i> , 2009)).	27
1.4	Esquema de funcionamento de uma célula a combustível (Eletrocell, 2011).	29
1.5	Esquemático de funcionamento de turbinas a gás (adaptado de (FAA, 2004)).	30
1.6	Esquemático de funcionamento de motores de combustão interna (Da Silveira, 2011).	30
2.1	Aparato experimental da Universidade de Sydney (adaptado de (Sydney, 2011)).	35
2.2	Médias e rms da fração de mistura nas chamas HM1 (quadrados), HM2 (triângulos) e HM3 (círculos) (Dally <i>et al.</i> , 1998).	37
2.3	Conjuntos de três imagens instantâneas de fração de mistura, temperatura e fração mássica de <i>OH</i> (de cima para baixo), em faixas de 8mm centradas a 22, 34, 46 e 62 mm da superfície do corpo rombudo (da esquerda para a direita) obtidas para a condição BB2. O sentido do escoamento é do fundo para o topo. As linhas brancas marcadas sobre o campo de mistura indicam os limites de inflamabilidade da mistura ar combustível (Masri <i>et al.</i> , 1998).	38
2.4	Queimador de Sandia (adaptado de (Namazian <i>et al.</i> , 1989)).	39
2.5	Combustor aberto utilizado por Huang e Lin (adaptado de (Huang e Lin, 1994)). Dimensões $D_j = 3,4mm$ , $D_k = 20mm$ e $D_a = 30mm$ .	40
2.6	Classificação das chamas com base nas velocidades do jato e do ar anular proposta por Huang e Lin (adaptado de (Huang e Lin, 1994)).	41
2.7	Comparação dos diferentes filtros aplicados sobre uma imagem instantânea da intensidade de fluorescência ( <i>I</i> ) de <i>OH</i> em função da posição axial ( <i>x</i> ) em uma chama turbulenta não pré-misturada (Huapaya, 2008).	42
2.8	Concentrações de <i>OH</i> obtidas com a médias de 1000 imagens PLIF em três diferentes regimes de combustão (Huapaya, 2008).	43
2.9	Nomenclatura dos domínios computacionais.	43
2.10	Regimes de combustão para hidrogênio e metano no ar (Caetano <i>et al.</i> , 2009).	44
2.11	Comparação da evolução da velocidade média longitudinal ( <i>U</i> ) ao longo da direção longitudinal (Alvarez Aquino, 2006).	45
2.12	Chanfro para melhorar qualidade da malha (Huapaya, 2008).	46
2.13	(a) Comparação entre intensidade de fluorescência de <i>OH</i> medida experimentalmente e (b) fração mássica de <i>OH</i> calculada experimentalmente (adaptado de (Huapaya, 2008)).	46

2.14	Perfis de média de Favre da fração mássica de $CO_2$ : HM1 (experimental, $\circ$ ; numérico, linha sólida), HM2 (experimental, $\diamond$ ; numérico, linha tracejada) e HM3 (experimental, $+$ ; numérico, linha traço ponto) (Liu <i>et al.</i> , 2005).	48
2.15	Perfis médios e flutuação rms da temperatura para a chama HM2 (Merci <i>et al.</i> , 2006)	49
2.16	Comparação de perfis de Fração Mássica de NO entre os modelos e mecanismos adotados e os dados experimentais em três diferentes posições axiais (Odedra e Malalasekera, 2007).	50
2.17	Campos instantaneos de velocidade axial (esquerda), temperatura (centro) e fração de mistura (direita) (Raman e Pitsch, 2005).	52
2.18	Comparação de perfis de fração de mistura para diferentes malhas ( <i>coarse</i> ( $0,45 \cdot 10^6$ nós), <i>medium</i> ( $1,8 \cdot 10^6$ ), <i>unmerged</i> (igual <i>medium</i> , porém sem fusão de elementos no centro) e <i>fine</i> ( $3,6 \cdot 10^6$ ))(Kempf <i>et al.</i> , 2006).	53
2.19	Jato com chama piloto simulado por Boersma (adaptado de (Boersma, 1999)).	53
2.20	Comparação da concentração de combustível (esquerda) e reagentes (direita) obtidas com média de Favre e de Reynolds em quatro diferentes localizações (Favre indicado por símbolos). $z = 5D$ : $+$ , $-$ ; $z = 15D$ : $x$ , $-$ ; $z = 25D$ : $*$ , $-$ ; $z = 35D$ : $\square$ , ... (Boersma, 1999).	54
3.1	Vista em corte do queimador da PUC-Rio	58
3.2	Foto do laboratório de combustão e turbulência da PUC-Rio.	59
3.3	Painel de controle do experimento.	60
3.4	Intensidade em função do comprimentos de onda de absorção (curva da esquerda) e emissão (curva da direita) de luz por uma molécula de OH ((LaVision, 2008)).	62
3.5	Configuração básica de um experimento utilizando a técnica PLIF (adaptado de (LaVision, 2009b)).	63
3.6	Sistema de Geração de Plano Laser Sintonizado (adaptado de (LaVision, 2008)).	65
3.7	Curva de sintonia de lasers de corante. Comprimentos de onda abaixo de 540 nm são obtidas com bombeio pelo terceiro harmônico de lasers Nd:YAG, enquanto os demais com o segundo harmônico (Eckbreth, 1996).	66
3.8	Configuração do sistema óptico de plano adotado para o sistema PLIF (adaptado de (Raffel <i>et al.</i> , 2007)).	67
3.9	Sistema de Captura da Imagem (adaptado de (LaVision, 2008)).	68
3.10	Esquema do funcionamento do sistema PIV (adaptado de (LaVision, 2007a)).	69
3.11	Imagem da separação do escoamento no bordo de fuga de uma asa obtida em uma replica do túnel de água de Ludwig Prandtl (Raffel <i>et al.</i> , 2007).	70
3.12	Determinação do campo vetorial utilizando-se correlação cruzada (adaptado de (LaVision, 2007a)).	71

3.13	Exemplo de janelas de correlação com 50% de sobreposição, com indicação da origem dos vetores gerados (adaptado de (LaVision, 2007a)).	73
3.14	Correlação adaptativa multi-passo com tamanho de janela constante (adaptado de (LaVision, 2007a)).	73
3.15	Imagem instantânea das partículas, em um escoamento com combustão, obtida com PIV para frequência do soprador 60 Hz e vazão de hidrogênio $2,16 Nm^3/h$ (caso H2).	76
3.16	Simulações da probabilidade de detecção válida em função dos parâmetros $N_i$ , $F_o$ , $F_i$ e do tamanho da janela de interrogação (adaptado de (Raffel <i>et al.</i> , 2007)).	76
3.17	Esquema de montagem do Leito fluidizado, ciclone e de suas válvulas de controle.	77
3.18	Leito fluidizado (a) e ciclone (b) projetados para operar com hidrogênio.	78
3.19	Histogramas de diâmetro das partículas de $TiO_2$ no anular (esquerda) e no jato central (direita) de Nitrogênio.	80
3.20	Configuração do sistema óptico de plano adotado para o sistema PIV (LaVision, 2008).	82
3.21	Imagem produzida pelo ruído de fundo da matriz CCD (esquerda) e; Imagem do feixe de luz laser obtida por espalhamento Rayleigh (direita) (Caetano, 2012).	86
3.22	Simulações da influência do tamanho visível da partícula sobre a incerteza de medição (adaptado de (Raffel <i>et al.</i> , 2007)).	90
3.23	Simulações da incerteza de medição provocada pelo ruído de fundo em função do deslocamento da imagem da partícula (adaptado de (Raffel <i>et al.</i> , 2007)).	92
3.24	Simulações da incerteza de medição provocada pelo gradiente de deslocamento das partículas no interior da janela de interrogação (adaptado de (Raffel <i>et al.</i> , 2007)).	93
3.25	Perfil da componente longitudinal da velocidade nas proximidades do jato e uma distância $D/6$ do corpo rombudo para o caso H1. Em vermelho está marcada a maior diferença de velocidade possível dentro de uma janela de 32x32 pixels	93
3.26	Simulações da incerteza de medição provocada pelo tamanho da partícula ser muito pequeno para o estimador subpixel (adaptado de (Raffel <i>et al.</i> , 2007)).	94
4.1	Chama laminar difusiva em contra corrente (adaptado de (ANSYS, 2010a)).	113
4.2	Domínio Computacional.	116
4.3	Chanfro empregado para melhoria da malha.	117
4.4	Malha de cálculo 1.	118
4.5	Malha de cálculo 2.	118
4.6	Malha de cálculo 3.	119
4.7	Condições de Contorno.	119
5.1	Representação das janelas de interrogação com dimensões 64x64 <i>pixels</i> na saída do jato.	126

- 5.2 Campo vetorial obtido com PIV para frequência do soprador 60 Hz e vazão de hidrogênio  $2,16 Nm^3/h$  (caso H2). 127
- 5.3 Linhas base onde foram traçados os perfis para avaliação dos parâmetros de pós processamento. 128
- 5.4 Perfis de velocidade na direção principal do escoamento ( $U_y$ ) para o caso H1.  $\_ y = D/6$  (64x64),  $\_ \_ y = D/6$  (32x32),  $\dots y = D/6$  (32x32p),  $\square y = D$  (64x64),  $\triangle y = D$  (32x32),  $\circ y = D$  (32x32p). 129
- 5.5 Perfis de velocidade na direção transversal do escoamento ( $U_x$ ) para o caso H1.  $\_ y = D/6$  (64x64),  $\_ \_ y = D/6$  (32x32),  $\dots y = D/6$  (32x32p),  $\square y = D$  (64x64),  $\triangle y = D$  (32x32),  $\circ y = D$  (32x32p). 130
- 5.6 Perfis do componente  $yy$  do tensor de Reynolds para o caso H1.  $\_ y = D/6$  (64x64),  $\_ \_ y = D/6$  (32x32),  $\dots y = D/6$  (32x32p),  $\square y = D$  (64x64),  $\triangle y = D$  (32x32),  $\circ y = D$  (32x32p). 131
- 5.7 Perfis do componente  $xx$  do tensor de Reynolds para o caso H1.  $\_ y = D/6$  (64x64),  $\_ \_ y = D/6$  (32x32),  $\dots y = D/6$  (32x32p),  $\square y = D$  (64x64),  $\triangle y = D$  (32x32),  $\circ y = D$  (32x32p). 132
- 5.8 Perfis do componente  $xy$  do tensor de Reynolds para o caso H1.  $\_ y = D/6$  (64x64),  $\_ \_ y = D/6$  (32x32),  $\dots y = D/6$  (32x32p),  $\square y = D$  (64x64),  $\triangle y = D$  (32x32),  $\circ y = D$  (32x32p). 132
- 5.9 Perfis de velocidade na direção longitudinal do escoamento ( $U_y$ ) para o caso H2.  $\_ y = D/6$  (64x64),  $\_ \_ y = D/6$  (32x32),  $\dots y = D/6$  (32x32p),  $\square y = D$  (64x64),  $\triangle y = D$  (32x32),  $\circ y = D$  (32x32p). 133
- 5.10 Perfis de velocidade na direção transversal do escoamento ( $U_x$ ) para o caso H2.  $\_ y = D/6$  (64x64),  $\_ \_ y = D/6$  (32x32),  $\dots y = D/6$  (32x32p),  $\square y = D$  (64x64),  $\triangle y = D$  (32x32),  $\circ y = D$  (32x32p). 133
- 5.11 Perfis do componente  $yy$  do tensor de Reynolds para o caso H2.  $\_ y = D/6$  (64x64),  $\_ \_ y = D/6$  (32x32),  $\dots y = D/6$  (32x32p),  $\square y = D$  (64x64),  $\triangle y = D$  (32x32),  $\circ y = D$  (32x32p). 134
- 5.12 Perfis do componente  $xx$  do tensor de Reynolds para o caso H2.  $\_ y = D/6$  (64x64),  $\_ \_ y = D/6$  (32x32),  $\dots y = D/6$  (32x32p),  $\square y = D$  (64x64),  $\triangle y = D$  (32x32),  $\circ y = D$  (32x32p). 134
- 5.13 Perfis do componente  $xy$  do tensor de Reynolds para o caso H2.  $\_ y = D/6$  (64x64),  $\_ \_ y = D/6$  (32x32),  $\dots y = D/6$  (32x32p),  $\square y = D$  (64x64),  $\triangle y = D$  (32x32),  $\circ y = D$  (32x32p). 135
- 5.14 Linhas base para traçar os perfis de velocidade e componentes do tensor de Reynolds na presente seção. 136
- 5.15 Perfis de velocidade na direção  $y$  para o caso V1 em  $y = D/3$  e  $y = 2D/3$ .  $\_ malha 1$ ,  $\_ \_ malha 2$ ,  $\dots malha 3$ ,  $\square$  experimental (Caetano, 2012). 137
- 5.16 Perfis de velocidade na direção  $y$  para o caso V1 em  $y = D$  e  $y = 4D/3$ .  $\_ malha 1$ ,  $\_ \_ malha 2$ ,  $\dots malha 3$ ,  $\square$  experimental (Caetano, 2012). 137
- 5.17 Evolução da velocidade na direção  $y$  ao longo da linha de centro para o caso V1.  $\_ malha 1$ ,  $\_ \_ malha 2$ ,  $\dots malha 3$ ,  $\square$  experimental (Caetano, 2012). 138

- 5.18 Perfis de velocidade na direção  $x$  para o caso V1 em  $y = D/3$  e  $y = 2D/3$ . — malha 1, — — malha 2, ... malha 3, □ experimental (Caetano, 2012). 139
- 5.19 Perfis de velocidade na direção  $x$  para o caso V1 em  $y = D$  e  $y = 4D/3$ . — malha 1, — — malha 2, ... malha 3, □ experimental (Caetano, 2012). 139
- 5.20 Perfis do componente  $yy$  do tensor de Reynolds para o caso V1 em  $y = D/3$  e  $y = 2D/3$ . — malha 1, — — malha 2, ... malha 3, □ experimental (Caetano, 2012). 140
- 5.21 Perfis do componente  $yy$  do tensor de Reynolds para o caso V1 em  $y = D$  e  $y = 4D/3$ . — malha 1, — — malha 2, ... malha 3, □ experimental (Caetano, 2012). 141
- 5.22 Evolução do componente  $yy$  do tensor de Reynolds ao longo da linha de centro para o caso V1. — malha 1, — — malha 2, ... malha 3, □ experimental (Caetano, 2012). 141
- 5.23 Perfis do componente  $xx$  do tensor de Reynolds para o caso V1 em  $y = D/3$  e  $y = 2D/3$ . — malha 1, — — malha 2, ... malha 3, □ experimental (Caetano, 2012). 142
- 5.24 Perfis do componente  $xx$  do tensor de Reynolds para o caso V1 em  $y = D$  e  $y = 4D/3$ . — malha 1, — — malha 2, ... malha 3, □ experimental (Caetano, 2012). 142
- 5.25 Evolução do componente  $xx$  do tensor de Reynolds ao longo da linha de centro para o caso V1. — malha 1, — — malha 2, ... malha 3, □ experimental (Caetano, 2012). 143
- 5.26 Perfis do componente  $xy$  do tensor de Reynolds para o caso V1 em  $y = D/3$  e  $y = 2D/3$ . — malha 1, — — malha 2, ... malha 3, □ experimental (Caetano, 2012). 143
- 5.27 Perfis do componente  $xy$  do tensor de Reynolds para o caso V1 em  $y = D$  e  $y = 4D/3$ . — malha 1, — — malha 2, ... malha 3, □ experimental (Caetano, 2012). 144
- 5.28 Evolução do componente  $xy$  do tensor de Reynolds ao longo da linha de centro para o caso V1. — malha 1, — — malha 2, ... malha 3, □ experimental (Caetano, 2012). 144
- 5.29 Perfis de Velocidade na direção  $y$  para o caso V1 em  $y = D/3$  e  $y = 2D/3$ . —  $k - \epsilon$ , — —  $k - \omega$ , — . . . SST  $k - \omega$ , ... RSM, □ Experimental (Caetano, 2012). 146
- 5.30 Perfis de Velocidade na direção  $y$  para o caso V1 em  $y = D$  e  $y = 4D/3$ . —  $k - \epsilon$ , — —  $k - \omega$ , — . . . SST  $k - \omega$ , ... RSM, □ Experimental (Caetano, 2012). 147
- 5.31 Evolução da velocidade na direção  $y$  ao longo da linha de centro para o caso V1. —  $k - \epsilon$ , — —  $k - \omega$ , — . . . SST  $k - \omega$ , ... RSM, □ Experimental (Caetano, 2012). 148
- 5.32 Perfis de velocidade na direção  $x$  para o caso V1 em  $y = D/3$  e  $y = 2D/3$ . —  $k - \epsilon$ , — —  $k - \omega$ , — . . . SST  $k - \omega$ , ... RSM, □ Experimental (Caetano, 2012). 149
- 5.33 Perfis de velocidade na direção  $x$  para o caso V1 em  $y = D$  e  $y = 4D/3$ . —  $k - \epsilon$ , — —  $k - \omega$ , — . . . SST  $k - \omega$ , ... RSM, □ Experimental (Caetano, 2012). 149

- 5.34 Perfis do componente  $yy$  do tensor de Reynolds para o caso V1 em  $y = D/3$  e  $y = 2D/3$ . —  $k - \epsilon$ , —  $k - \omega$ , — . . . SST  $k - \omega$ , . . . RSM,  Experimental (Caetano, 2012). 150
- 5.35 Perfis do componente  $yy$  do tensor de Reynolds para o caso V1 em  $y = D$  e  $y = 4D/3$ . —  $k - \epsilon$ , —  $k - \omega$ , — . . . SST  $k - \omega$ , . . . RSM,  Experimental (Caetano, 2012). 150
- 5.36 Evolução do componente  $yy$  do tensor de Reynolds ao longo da linha de centro para o caso V1. —  $k - \epsilon$ , —  $k - \omega$ , — . . . SST  $k - \omega$ , . . . RSM,  Experimental (Caetano, 2012). 151
- 5.37 Perfis do componente  $xx$  do tensor de Reynolds para o caso V1 em  $y = D/3$  e  $y = 2D/3$ . —  $k - \epsilon$ , —  $k - \omega$ , — . . . SST  $k - \omega$ , . . . RSM,  Experimental (Caetano, 2012). 152
- 5.38 Perfis do componente  $xx$  do tensor de Reynolds para o caso V1 em  $y = D$  e  $y = 4D/3$ . —  $k - \epsilon$ , —  $k - \omega$ , — . . . SST  $k - \omega$ , . . . RSM,  Experimental (Caetano, 2012). 152
- 5.39 Evolução do componente  $xx$  do tensor de Reynolds ao longo da linha de centro para o caso V1. —  $k - \epsilon$ , —  $k - \omega$ , — . . . SST  $k - \omega$ , . . . RSM,  Experimental (Caetano, 2012). 153
- 5.40 Perfis do componente  $xy$  do tensor de Reynolds para o caso V1 em  $y = D/3$  e  $y = 2D/3$ . —  $k - \epsilon$ , —  $k - \omega$ , — . . . SST  $k - \omega$ , . . . RSM,  Experimental (Caetano, 2012). 153
- 5.41 Perfis do componente  $xy$  do tensor de Reynolds para o caso V1 em  $y = D$  e  $y = 4D/3$ . —  $k - \epsilon$ , —  $k - \omega$ , — . . . SST  $k - \omega$ , . . . RSM,  Experimental (Caetano, 2012). 154
- 5.42 Evolução do componente  $xy$  do tensor de Reynolds ao longo da linha de centro para o caso V1. —  $k - \epsilon$ , —  $k - \omega$ , — . . . SST  $k - \omega$ , . . . RSM,  Experimental (Caetano, 2012). 154
- 5.43 Perfis de velocidade na direção  $y$  para o caso V2 em  $y = D/3$  e  $y = 2D/3$ . —  $k - \epsilon$ , — . . . SST  $k - \omega$ , . . . RSM,  Experimental (Caetano, 2012). 156
- 5.44 Perfis de velocidade na direção  $y$  para o caso V2 em  $y = D$  e  $y = 4D/3$ . —  $k - \epsilon$ , — . . . SST  $k - \omega$ , . . . RSM,  Experimental (Caetano, 2012). 156
- 5.45 Perfis de velocidade na direção  $x$  para o caso V2 em  $y = D/3$  e  $y = 2D/3$ . —  $k - \epsilon$ , — . . . SST  $k - \omega$ , . . . RSM,  Experimental (Caetano, 2012). 157
- 5.46 Perfis de velocidade na direção  $x$  para o caso V2 em  $y = D$  e  $y = 4D/3$ . —  $k - \epsilon$ , — . . . SST  $k - \omega$ , . . . RSM,  Experimental (Caetano, 2012). 157
- 5.47 Perfis do componente  $yy$  do tensor de Reynolds para o caso V2 em  $y = D/3$  e  $y = 2D/3$ . —  $k - \epsilon$ , — . . . SST  $k - \omega$ , . . . RSM,  Experimental (Caetano, 2012). 158
- 5.48 Perfis do componente  $yy$  do tensor de Reynolds para o caso V2 em  $y = D$  e  $y = 4D/3$ . —  $k - \epsilon$ , — . . . SST  $k - \omega$ , . . . RSM,  Experimental (Caetano, 2012). 158
- 5.49 Perfis do componente  $xx$  do tensor de Reynolds para o caso V2 em  $y = D/3$  e  $y = 2D/3$ . —  $k - \epsilon$ , — . . . SST  $k - \omega$ , . . . RSM,  Experimental (Caetano, 2012). 159

- 5.50 Perfis do componente  $yy$  do tensor de Reynolds para o caso V2 em  $y = D$  e  $y = 4D/3$ . —  $k - \epsilon$ , — — SST  $k - \omega$ , ... RSM, □ Experimental (Caetano, 2012). 159
- 5.51 Perfis do componente  $xy$  do tensor de Reynolds para o caso V2 em  $y = D/3$  e  $y = 2D/3$ . —  $k - \epsilon$ , — — SST  $k - \omega$ , ... RSM, □ Experimental (Caetano, 2012). 160
- 5.52 Perfis do componente  $xy$  do tensor de Reynolds para o caso V2 em  $y = D$  e  $y = 4D/3$ . —  $k - \epsilon$ , — — SST  $k - \omega$ , ... RSM, □ Experimental (Caetano, 2012). 160
- 5.53 Evolução do componente  $y$  da velocidade e do componentes  $yy$  do tensor de Reynolds ao longo do centro do jato para o caso V2. —  $k - \epsilon$ , — — SST  $k - \omega$ , ... RSM, □ Experimental (Caetano, 2012). 161
- 5.54 Evolução dos componentes  $xx$  e  $xy$  do tensor de Reynolds ao longo do centro do jato para o caso V2. —  $k - \epsilon$ , — — SST  $k - \omega$ , ... RSM, □ Experimental (Caetano, 2012). 161
- 5.55 Níveis de fluorescência de OH normalizada 163
- 5.56 Campo de vetores velocidade e de fluorescência de OH para duas medições instantâneas obtidas para o caso H1. 164
- 5.57 Campo de vetores velocidade e de fluorescência de OH para uma medições instantâneas (a) e linhas de corrente e campo de fluorescência média de OH para o escoamento médio (b), obtidas para o caso H1. 164
- 5.58 Campo de vetores velocidade e de fluorescência de OH para duas medições instantâneas obtidas para o caso H2. 165
- 5.59 Campo de vetores velocidade e de fluorescência de OH para uma medições instantâneas (a) e linhas de corrente e campo de fluorescência média de OH para o escoamento médio (b), obtidas para o caso H2. 166
- 5.60 Perfis médios de velocidade na direção  $y$  para os casos H1 e H2. —  $y = D/3$ , — —  $y = 2D/3$ , — — —  $y = D$ , ...  $y = 4D/3$ . 167
- 5.61 Perfis médios de velocidade na direção  $x$  para os casos H1 e H2. —  $y = D/3$ , — —  $y = 2D/3$ , — — —  $y = D$ , ...  $y = 4D/3$ . 168
- 5.62 Perfis do componente  $yy$  do tensor de Reynolds para os casos H1 e H2. —  $y = D/3$ , — —  $y = 2D/3$ , — — —  $y = D$ , ...  $y = 4D/3$ . 168
- 5.63 Perfis do componente  $xx$  do tensor de Reynolds para os casos H1 e H2. —  $y = D/3$ , — —  $y = 2D/3$ , — — —  $y = D$ , ...  $y = 4D/3$ . 169
- 5.64 Perfis do componente  $xy$  do tensor de Reynolds para os casos H1 e H2. —  $y = D/3$ , — —  $y = 2D/3$ , — — —  $y = D$ , ...  $y = 4D/3$ . 169
- 5.65 Perfis médios da intensidade de luminescência do OH para os casos H1 e H2. —  $y = D/3$ , — —  $y = 2D/3$ , — — —  $y = D$ , ...  $y = 4D/3$ . 170
- 5.66 Comparação dos resultados obtidos para o caso H1. À esquerda, linhas de corrente e campo de fração mássica de OH obtidos numericamente, à direita, linhas de corrente e campo de fluorescência média de OH obtidos experimentalmente. 172
- 5.67 Perfis médios de velocidade na direção  $y$  e  $x$  para o casos H1. Numéricos: —  $y = D/3$ , — —  $y = 2D/3$ , — — —  $y = D$ , ...  $y = 4D/3$ , experimentais □  $y = D/3$ , △  $y = 2D/3$ , ◇  $y = D$ , ○  $y = 4D/3$ . 173

- 5.68 Perfis médios dos componentes  $yy$  e  $xx$  do tensor de Reynolds para o casos H1. Numéricos:  $\_ y = D/3$ ,  $\_ \_ y = 2D/3$ ,  $\_ \_ \_ y = D$ ,  $\_ \_ \_ \_ y = 4D/3$ , experimentais  $\square y = D/3$ ,  $\triangle y = 2D/3$ ,  $\diamond y = D$ ,  $\circ y = 4D/3$ . 173
- 5.69 Perfis médios do componente  $xy$  do tensor de Reynolds para o casos H1. Numéricos:  $\_ y = D/3$ ,  $\_ \_ y = 2D/3$ ,  $\_ \_ \_ y = D$ ,  $\_ \_ \_ \_ y = 4D/3$ , experimentais  $\square y = D/3$ ,  $\triangle y = 2D/3$ ,  $\diamond y = D$ ,  $\circ y = 4D/3$ . 174
- 5.70 Comparação dos resultados obtidos para o caso H2. À esquerda, linhas de corrente e campo de fração mássica de OH obtidos numericamente, à direita, linhas de corrente e campo de fluorescência média de OH obtidos experimentalmente. 175
- 5.71 Perfis médios de velocidade na direção  $y$  e  $x$  para o casos H2. Numéricos:  $\_ y = D/3$ ,  $\_ \_ y = 2D/3$ ,  $\_ \_ \_ y = D$ ,  $\_ \_ \_ \_ y = 4D/3$ , experimentais  $\square y = D/3$ ,  $\triangle y = 2D/3$ ,  $\diamond y = D$ ,  $\circ y = 4D/3$ . 176
- 5.72 Perfis dos componentes  $yy$  e  $xx$  do tensor de Reynolds para o casos H2. Numéricos:  $\_ y = D/3$ ,  $\_ \_ y = 2D/3$ ,  $\_ \_ \_ y = D$ ,  $\_ \_ \_ \_ y = 4D/3$ , experimentais  $\square y = D/3$ ,  $\triangle y = 2D/3$ ,  $\diamond y = D$ ,  $\circ y = 4D/3$ . 176
- 5.73 Perfis médios do componente  $xy$  do tensor de Reynolds para o casos H2. Numéricos:  $\_ y = D/3$ ,  $\_ \_ y = 2D/3$ ,  $\_ \_ \_ y = D$ ,  $\_ \_ \_ \_ y = 4D/3$ , experimentais  $\square y = D/3$ ,  $\triangle y = 2D/3$ ,  $\diamond y = D$ ,  $\circ y = 4D/3$ . 177
- 5.74 Classificação das chamas H1 e H2 de acordo com diagrama proposto por Huang e Lin (1994). 178
- 5.75 Classificação das chamas H1 e H2 de acordo com diagrama proposto por Caetano *et al.* (2009). 179
- A.1 Espécies químicas do modelo Burke *et al.* (2012) para reações  $H_2/O_2$  e suas principais propriedades. 193
- A.2 Reações do modelo Burke *et al.* (2012) para reações  $H_2/O_2$ . 194

## Lista de Tabelas

2.1	Experimentos do laboratório AMME da Universidade de Sydney (Dally <i>et al.</i> , 1998).	36
2.2	Sumário das simulações revisadas.	55
3.1	Diâmetro das partículas de $TiO_2$ calculado para a vazão de $1Nm^3/h$ de nitrogênio passando pelo sistema dispersor de partículas original.	80
3.2	Diâmetro das partículas de $TiO_2$ calculado para a operação do novo sistema de dispersão de partículas operando com hidrogênio.	81
4.1	Principais modelos de combustão não pré-misturada existentes no Fluent.	111
4.2	Sumário dos parâmetros de refino de malha adotados.	117
4.3	Sumário das dimensões das malhas de cálculo.	118
5.1	Sumário das configurações experimentais avaliadas.	124
5.2	Sumário das condições de contorno adotadas para o caso V1.	136
5.3	Sumário das condições de contorno adotadas para o caso V2.	146
5.4	Sumário das condições de contorno adotadas para o caso H1 e H2.	171

## Lista de Símbolos

$x$	Direção perpendicular à saída do jato de combustível
$y$	Direção da saída do jato de combustível
$z$	Direção perpendicular ao escoamento livre
$d$	Diâmetro do duto injetor de combustível
$i$	Comprimento do duto injetor de combustível
$\theta$	Angulo da fatia do domínio computacional
$D$	Diâmetro do corpo rombudo
$Re$	Número de Reynolds
$Re_t$	Número de Reynolds turbulento
$Da$	Número de Damköhler
$C$	Coefficiente de correlação entre imagens
$I_i$	Intensidade da Imagem da janela “i”
fator Q	Fator de correlação de picos
$P_n$	Altura do pico “n”
$N_i$	Número de partículas na janela de interrogação “i”
$F_i$	Perda devido à entrada de partículas no plano
$F_0$	Perda devido à saída de partículas no plano
$U_t$	Velocidade terminal
$d_p$	Diâmetro das partículas
$\rho$	Densidade
$g$	Aceleração gravitacional
$\mu$	Viscosidade dinâmica
$Q$	Vazão
$D_c$	Diâmetro do ciclone
$D_l$	Diâmetro do leito
$U$	Velocidade
$u_{total}$	Incerteza total de medição
$u_{U_j}$	Incerteza relacionada à velocidade do gás no jato
$u_d$	Incerteza relacionada ao diâmetro do orifício do jato de combustível
$u_{\rho_t}$	Incerteza relacionada à densidade do gás
$u_{\mu_t}$	Incerteza relacionada à viscosidade dinâmica
$u_Q$	Incerteza relacionada à vazão
$u_{LB}$	Incerteza relacionada à flutuações da intensidade da luz dos pulsos do laser de bombeio
$u_\lambda$	Incerteza relacionada à comprimento de onda de excitação
$u_{PL}$	Incerteza relacionada à ao ângulo de divergência do feixe e distribuição não-homogênea do plano de luz

$u_{RF}$	Incerteza relacionada ao ruído de fundo da câmera
$u_{RL}$	Incerteza relacionada à atenuação e distorção da luz causada pelo sistema óptico de detecção por reflexos no laboratório
$u_{DC}$	Incerteza relacionada à desativação colisional da fluorescência
$u_{U_t}$	Incerteza relacionada à termoforese
$u_{IR}$	Incerteza relacionada ao gradiente de índice de refração
$u_{EE}$	Incerteza relacionada à emissão espontânea de radiação pela chama e pela fuligem presente pela chama
$u_{DP}$	Incerteza relacionada ao diâmetro das imagens das partículas
$u_{PP}$	Incerteza relacionada ao movimento das partículas fora do plano laser
$u_{\nabla d}$	Incerteza relacionada ao gradiente de deslocamento no interior da janela de interrogação
$u_{SP}$	Incerteza relacionada ao ajuste subpixel
$U_t$	Velocidade de termoforese
$F_t$	Força de Empuxo
$T$	Temperatura
$\nabla\phi$	Gradiente de “ $\phi$ ”
$p$	Pressão
$c$	Correção da lei de Stokes
$\lambda_0$	Caminho livre médio
$n_{tp}$	Índice de refração do ar
$n_s$	Índice de refração do ar relativo ao vácuo nas condições padrão
$\lambda$	Comprimento de onda da luz
$t_s$	Tempo de relaxação
$d_\tau$	Diâmetro das partícula na imagem
$d_{diff}$	Diâmetro mínimo dos anéis de difração
$f_\#$	Razão entre a distância focal e o diâmetro da abertura da lente da câmera
$M$	Magnificação da imagem
$e_0$	Energia total
$k$	Energia cinética turbulenta
$q$	Fluxo de calor
$C_p$	Coefficiente de transferência de calor a pressão constante
$Pr$	Número de Prandtl
$\tau_{ij}$	Tensor de tensões de Reynolds
$S_{ij}^*$	Tensor taxa de deformação sem o seu traço
$\epsilon$	Taxa de dissipação da energia cinética turbulenta
$\sigma_\phi$	Número de Prandtl turbulento para “ $\phi$ ”

$G_\phi$	Termo de geração de “ $\phi$ ”
$S_\phi$	Termo fonte de “ $\phi$ ” introduzido pelo usuário
$\mu_t$	Viscosidade turbulenta
$\Omega_{ij}$	Tensor taxa de rotação visto de um referencial se movendo com velocidade angular $\Omega_k$
$\omega$	Dissipação específica de energia cinética
$\alpha^*$	Coefficiente de amortecimento para baixos números de Reynolds
$Y_\phi$	Termo de dissipação de “ $\phi$ ”
$\Gamma_\phi$	Difusividade de “ $\phi$ ”
$D_\omega$	Difusão cruzada de “ $\omega$ ”
$C_{ij}$	Termo convectivo da equação de transporte do tensor de Reynolds
$D_{T,ij}$	Difusividade turbulenta da equação de transporte do tensor de Reynolds
$D_{L,ij}$	Difusividade molecular da equação de transporte do tensor de Reynolds
$D_{P,ij}$	Produção de Tensão da equação de transporte do tensor de Reynolds
$\phi_{ij}$	Termo pressão deformação da equação de transporte do tensor de Reynolds
$\epsilon_{ij}$	Dissipação da equação de transporte do tensor de Reynolds
$F_{ij}$	Produção devido à rotação do sistema de coordenadas da equação de transporte do tensor de Reynolds
$\tau_m$	Tempo de transporte mecânico
$\tau_c$	Tempo de reação química
$f$	Fração mássica originada da corrente de combustível
$Z_i$	Fração mássica do elemento químico “ $i$ ”
$a_s$	Taxa de estiramento
$v$	Velocidade relativa entre os jatos de combustível
$l$	Distância dos jatos de combustível
$\chi$	Taxa de dissipação escalar
$D_i$	Coefficiente de difusão
$erfc^{-1}$	Inverso da função de erro complementar
$l_t$	Comprimento dos turbilhões
$I$	Intensidade turbulenta.
$d_h$	Diâmetro hidráulico

### Sobrescrito

- $\bar{\phi}$  Média de Reynolds de “ $\phi$ ”  
 $\phi'$  flutuação de “ $\phi$ ” segundo a decomposição de Reynolds  
 $\tilde{\phi}$  Média de Favre de “ $\phi$ ”  
 $\phi''$  flutuação de “ $\phi$ ” segundo a decomposição de Favre

### Subscrito

- $p$  Partículas  
 $g$  Gás  
 $l$  Leito fluidizado  
 $c$  Ciclone  
 $max$  Máxima  
 $min$  Mínima  
 $j$  Jato  
 $0$  Estado de referência  
 $t$  Turbulento  
 $ar$  ar  
 $h_2$  Hidrogênio  
 $comb$  Casos com combustão  
 $in$  Casos inertes  
 $k$  Energia cinética turbulenta  
 $\epsilon$  Dissipação da energia cinética turbulenta  
 $st$  Estequiométrico  
 $\infty$  Corrente de oxidante

### Abreviaturas

- OPEP Organização dos países exploradores de petróleo  
DOE Departamento de energia dos EUA  
CI Motores de combustão interna  
EGR *Exhauste Gas Recirculation*  
AMME Departamento de engenharias aeroespacial, mecânica e mecatrônica da Universidade de Sydney  
LDV Velocimetria doppler a laser  
LIF Fluorescência induzida a laser  
GNC Gás natural comprimido  
PIV Velocimetria de partículas a laser  
PLIF Fluorescência induzida por plano a Laser  
RANS Médias de Reynolds das equações de Navier Stokes  
PDF Função densidade de probabilidade  
RSM Modelo de tensor de tensões de Reynolds  
LES Simulação de grandes escalas

DNS	Simulação numérica direta
CPU	Unidade central de processamento
Nd:YAG	Laser de estado sólido
CCD	Dispositivo de carga acoplada
UV	Ultra violeta
IR	Infra vermelho
HSIRO	Intensificador de imagem de alta velocidade
FFT	Transformada rápida de Fourier
PVC	Cloreto de polivinila
LFR	<i>Laminar finite-rate</i>
EDM	<i>Eddy-dissipation model</i>
EDC	<i>Eddy-dissipation concept</i>
rad.	Direção radial
circ.	Direção circunferencial

# 1 Introdução

No presente capítulo serão discutidas as motivações para o estudo da combustão do hidrogênio bem como para a seleção do regime de combustão a ser estudado.

## 1.1 Aspectos Históricos e Econômicos

No ano de 2009 aproximadamente 88% da matriz energética mundial baseou-se na queima de combustíveis fósseis (BP, 2010), que podem ser gasosos, líquidos ou sólidos (Figura 1.1).

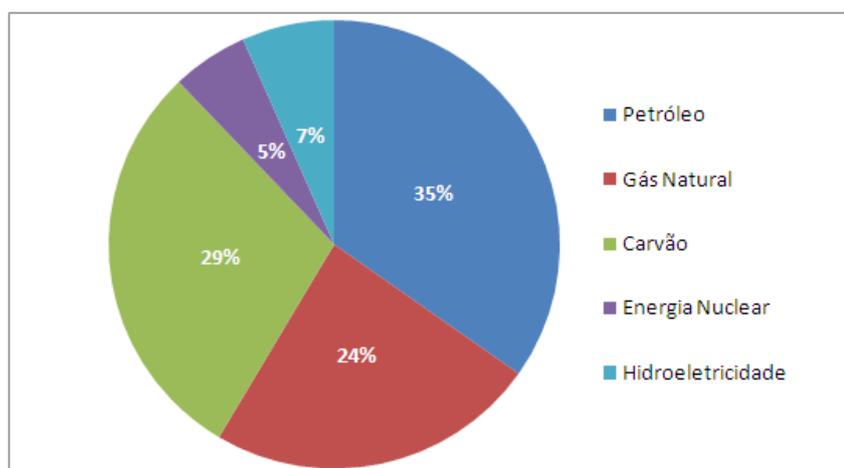


Figura 1.1: Matriz energética mundial (adaptado de (BP, 2010)).

Há indícios de que os poluentes provenientes da queima de combustíveis fósseis levam ao aumento da temperatura global, fenômeno conhecido como efeito estufa (IPCC-WGII, 2007). Este fenômeno poderia provocar severas alterações nos regimes de chuvas, na distribuição de temperaturas no planeta e no nível dos oceanos, aumentando a incidência de inundações, incêndios e prejudicando a produção global de alimentos. A preocupação com estes aspectos ambientais tem levado os governos a tomarem medidas visando a redução do consumo de combustíveis fósseis e o controle de emissões e à assinatura de tratados multinacionais como o protocolo de Kyoto e o acordo de Copenhague. Neste contexto, pode-se observar grandes esforços no sentido de aumentar a eficiência de máquinas térmicas, substituir os combustíveis pesados (carvão e óleo combustível) por combustíveis com maior teor de hidrogênio ou

por combustíveis renováveis e tornar viável a captura de dióxido de carbono ( $CO_2$ ) produzido pela queima de hidrocarbonetos.

Além das preocupações ambientais, há insegurança com relação à garantia do suprimento energético e ao equilíbrio da balança comercial dos países consumidores. Tais preocupações advêm do fato destes combustíveis estarem distribuídos de forma heterogênea pelo planeta e de serem não renováveis, tendendo a sofrer aumentos constantes em seus custos de exploração, produção, refino e transporte. Estas preocupações ganharam corpo durante os chamados choques do petróleo (1973 e 1979), onde houve um aumento muito rápido do preço do petróleo.

O primeiro choque foi decorrente das grandes reduções na produção de óleo nos países membros da Organização dos Países Exploradores de Petróleo (OPEP) como uma represália ao apoio dos EUA à Israel durante a guerra do Yom Kippur. Já o segundo foi fruto da redução na produção do Irã em decorrência da revolução islâmica ocorrida neste país e agravada pela guerra Irã-Iraque. A variação do preço do petróleo na cabeça do poço nos EUA, no período de 1947 à outubro de 2011, e os eventos que mais a afetaram estão representados na Figura 1.2.

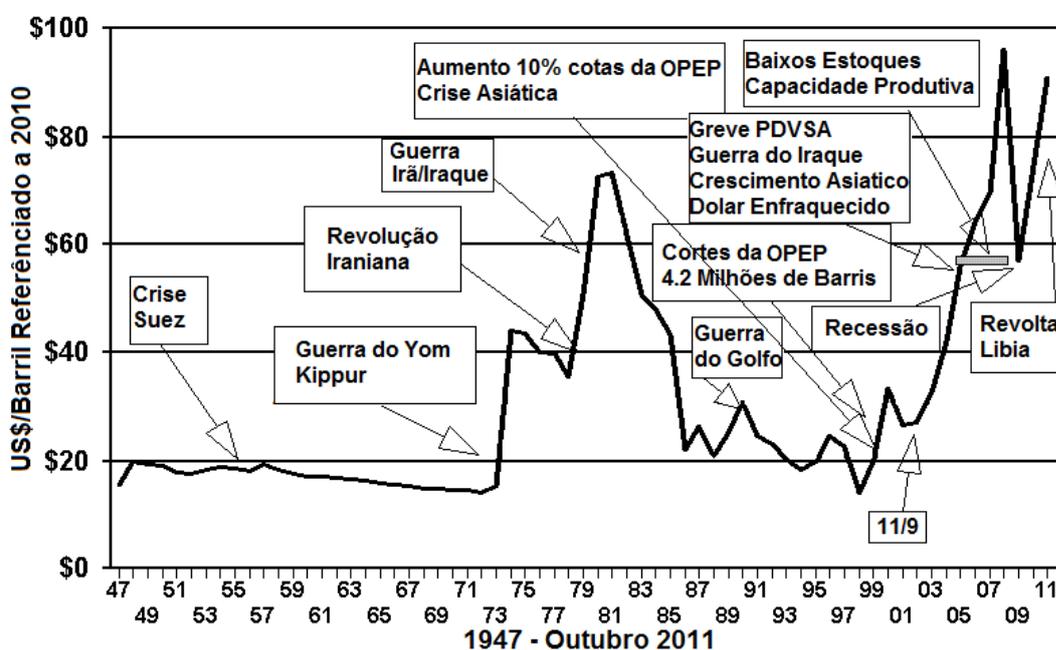


Figura 1.2: Principais eventos que influenciaram o preço do petróleo nos EUA (adaptado de (Williams, 2011)).

Dentre os países que investem pesadamente em pesquisas com o intuito de utilizar o hidrogênio como vetor energético, destaca-se os EUA que através de seu Departamento de Energia (DOE) vem investindo sistematicamente em

pesquisas nesta área. Somente em 2009 o DOE investiu 269 milhões de dólares em pesquisas neste tema (DOE, 2009).

As pesquisas do DOE se iniciaram com uma série de *workshops* que culminaram com a redação de um documento intitulado “*National Hydrogen Energy Roadmap*” (DOE, 2002) contendo o mapeamento dos principais desafios à adoção do hidrogênio como combustível e das estratégias a serem adotadas para superar este fim. Tal documento dividiu os desafios em cinco áreas, produção, distribuição, estocagem, conversão e aplicação. Esta divisão será adotada neste capítulo, sendo que não será abordada a questão da aplicação, por este tópico referir-se ao estudo dos parâmetros que levam o consumidor a migrar para o hidrogênio e nas políticas de incentivo à essa migração, fugindo do escopo deste trabalho.

## 1.2 Produção

O hidrogênio não pode ser considerado uma fonte de energia por não se encontrar livre em grandes concentrações na natureza, mas sim ligado a outras moléculas, demandando energia para a sua produção (EGG, 2004). Assim sendo, o hidrogênio pode ser considerado um transportador ou armazenador de energia e as emissões provenientes de sua utilização devem ser avaliadas levando-se em conta a tecnologia utilizada para a sua produção.

As fontes mais comuns do hidrogênio são a água ( $H_2O$ ) e os hidrocarbonetos, principalmente o metano ( $CH_4$ ), que possui maior relação H/C detre os hidrocarbonetos. O método de produção mais utilizado e eficiente atualmente é a reforma a vapor, onde hidrocarbonetos leves reagem com vapor produzindo hidrogênio e dióxido de carbono que pode ser capturado (Ryden e Lyngfelt, 2006).

Hidrocarbonetos podem também sofrer oxidação parcial em meios porosos (Toledo *et al.*, 2009) ou em gaseificadores, produzindo prioritariamente  $H_2$ ,  $CO$  e hidrocarbonetos de cadeia pequena ( $C_2$ ). Os gaseificadores podem, ainda, ser utilizados para produzir hidrogênio a partir de biomassa, gerando uma grande gama de produtos, com presença de contaminantes como enxofre e compostos orgânicos. O uso de biomassa garante que o carbono liberado seja de origem renovável, mas impõe um grande desafio para a separação eficiente dos produtos e contaminantes.

O hidrogênio também pode ser gerado a partir da eletrólise da água, que pode ser considerado isenta de emissões de gases de efeito estufa caso a energia seja proveniente de fontes renováveis (hidráulica, solar, eólica, geotermal, etc.) ou nuclear. Este modo de geração de hidrogênio é particularmente

interessante ao ser utilizada para estocar a energia excedente produzida por fontes intermitentes, como eólica e solar, nos momentos de maior geração e utilizando o hidrogênio em motores a combustão ou turbinas para a geração nos momentos de pico de consumo. Atualmente pesquisas buscam aumentar a eficiência da eletrólise através do aumento da temperatura do meio ou da adição de catalizadores.

Outra forma de produzir hidrogênio utilizando-se energia elétrica é através da pirólise a plasma que tem como insumo o gás natural e gera, além do hidrogênio, carbono em estado sólido que tem grande valor agregado por servir de insumo para diversas aplicações, como a produção de fibras de carbono, corantes e pneus.

Uma tecnologia que tem se mostrado promissora é a quebra termoquímica da água utilizando calor de alta temperatura gerado em reatores nucleares avançados. Esta rota apresenta elevada eficiência e emissões nulas de gases de efeito estufa (EGG, 2004, DOE, 2009).

### 1.3

#### Transporte e Estocagem

O hidrogênio tem duas características que dificultam o seu transporte e a sua estocagem, o fato de ser a menor molécula, podendo vazar por juntas que são consideradas herméticas para outros fluidos, e o seu baixo poder calorífico em base volumétrica. O primeiro desafio pode ser superado pela adoção de especificações mais restritas e de inspeções mais rigorosas. Já a baixa densidade energética tem sido atacada por diferentes abordagens, descritas abaixo, mas sem atingir níveis comparáveis com combustíveis líquidos, como é mostrado na figura 1.3. Nesta figura são apresentados, ainda, as metas traçadas pelo DOE com intuito de garantir uma autonomia mínima para veículos que utilizem hidrogênio como combustível, permitindo assim que estes sejam aceitos pelos consumidores. A primeira meta traçada deveria ser cumprida em 2010, mas ainda não foi atingida.

O hidrogênio pode ser comprimido e carregado em cilindros como ocorre com o gás natural, no entanto, a sua menor densidade energética implica em maiores pressões que podem chegar a 700 atm. No entanto, o aumento da pressão acarreta na necessidade de cilindros mais espessos ou feitos de materiais mais resistentes, impactando diretamente no custo e na relação peso do cilindro/peso do combustível. Falhas a essas pressões podem gerar grandes danos materiais e riscos à vida de pessoas próximas, o que leva à adoção de critérios mais rígidos de inspeção desses cilindros. Além disso, o maior trabalho de compressão demanda um maior consumo energético, sendo assim,

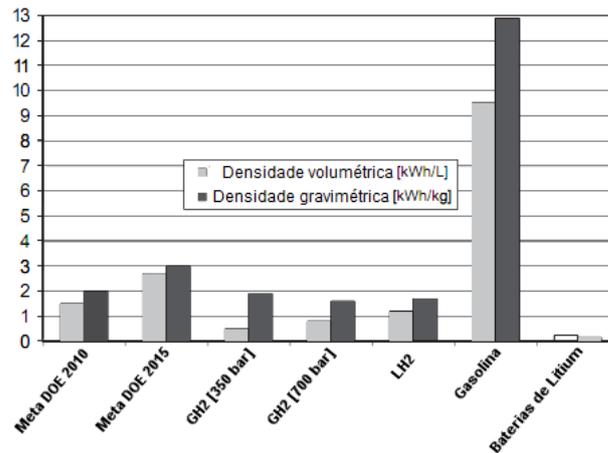


Figura 1.3: Densidade energética do hidrogênio comprimido (GH2) e líquido (LH2) em comparação com metas, gasolina e baterias (adaptado de (Verhelst *et al.*, 2009)).

é indispensável realizar um balanço destes fatores para selecionar a pressão adequada. Raciocínio similar pode ser adotado para o transporte em dutos.

O transporte do hidrogênio na forma líquida permite a redução da espessura das paredes do tanque ou cilindro, no entanto, exige que o mesmo seja construído de material que resista à temperaturas criogênicas e que sejam adotados isolamentos térmicos. O consumo energético no processo de liquefação é elevado e, para manter-se a pressão do reservatório, é importante que o combustível seja liberado para a atmosfera na medida que evapora, gerando perdas que aumentam substancialmente com o tempo de estocagem.

O hidrogênio pode ainda ser estocado adsorvido em estruturas metálicas ou de carbono podendo ser liberado em condições de temperatura e pressões controladas. As desvantagens de tal abordagem são o elevado peso do substrato, bem como as dificuldades relacionadas ao controle da temperatura nos processos de adsorção e dessorção. Pode-se ainda promover uma ligação química entre o hidrogênio e a água gerando estruturas similares ao gelo chamadas de hidratos. Tais estruturas podem ser quebradas em um processo catalítico. Os grandes desafios desta tecnologia estão relacionados ao consumo de energia no processo de geração de hidratos e à necessidade de desenvolvimento de uma infraestrutura logística para o seu transporte.

Vem se estudando a possibilidade de injetar o hidrogênio em estruturas geológicas para o armazenamento de grandes volumes. Os desafios desta tecnologia começam na localização de reservatórios com características geológicas adequadas, próximos dos centros produtores ou consumidores de hidrogênio, passando por questões relativas à contaminação do solo e do lençol freático, vazamentos para a atmosfera e baixa taxa de recuperação. Apesar destes desa-

fos esta parece ser a opção mais barata para a estocagem de grandes volumes de gás.

Com o avanço constante das baterias, pode-se dizer que o hidrogênio vem perdendo espaço para os veículos elétricos, restando a aplicação na geração de energia, com ou sem estocagem, como será discutido na próxima seção.

## 1.4

### Conversão

A conversão do hidrogênio em energia pode ser feita através de conversão eletro-química (célula a combustível) ou de processos convencionais de combustão, prioritariamente em motores de combustão interna ou em turbinas a gás.

A célula a combustível é basicamente uma bateria que converte a energia química disponível no combustível em energia elétrica e térmica. A princípio, estas células poderiam operar com uma grande gama de combustíveis e oxidantes, no entanto o desenvolvimento destes equipamentos tem sido focando nas reações do hidrogênio ou do gás natural com o ar. A conversão ocorre por meio de duas reações químicas parciais em dois eletrodos separados por um eletrólito apropriado, para as células que operam com hidrogênio as reações são:



A reação (1.1) ocorre no ânodo liberando o hidrogênio molecular que atravessa o eletrólito e encontra-se com o oxigênio no cátodo onde ocorre a reação (1.2) liberando-se vapor d'água. Os elétrons liberados do hidrogênio chegam ao cátodo passando pela rede elétrica, onde liberam sua energia para as mais diferentes finalidades. O funcionamento de uma célula a combustível típica está representado esquematicamente na Figura 1.4.

As células combustível têm alta eficiência de conversão e, por não utilizarem processos de combustão, apresentam baixa emissão de gases de efeito estufa e, conseqüentemente, apresentam baixo impacto ambiental. O funcionamento destes equipamentos é muito similar ao de eletrolisadores, sendo que algumas podem operar em ciclo inverso gerando hidrogênio. Existem várias tipos de células, sendo que a classificação mais usual é feita com base no tipo de eletrodo utilizado (EGG, 2004). Segundo esta classificação os principais tipos de células combustíveis são:

- Membrana polimérica hidratada permeável a íons - PEFC;

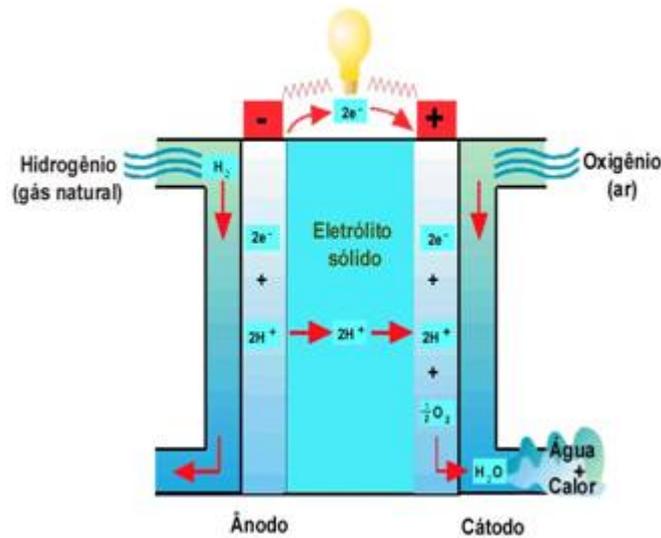


Figura 1.4: Esquema de funcionamento de uma célula a combustível (Eletrocell, 2011).

- Hidróxido de potássio em matriz de amianto - AFC;
- Ácido fosfórico em SiC - PAFC;
- Carbonato fundido em  $LiAlO_2$  - MCFC;
- Perovskitas (Cerâmicas) - SOFC.

Cada tipo de célula trabalha com temperaturas e catalisadores diferentes podendo realizar ou não reforma de hidrocarbonetos e possuindo densidades energéticas diferentes. Estas características levam a uma gama de aplicações, indo desde carga para pequenos aparelhos eletrônicos à centrais de cogeração distribuída. Apesar dos esforços empregados no desenvolvimento das múltiplas tecnologias de células a combustíveis, nenhuma pode ser considerada comercial para as aplicações de geração estacionária e automotiva (EGG, 2004). A exceção encontra-se nas aplicações espaciais, onde as células tem sido empregadas com muito sucesso desde o programa Apollo. Além dos desafios de cunho tecnológico, os custos e a escala das células não permitem que as mesmas compitam com motores a combustão, turbinas e micro-turbinas para geração elétrica, mesmo tendo maior eficiência. Já no campo automotivo, as células enfrentam concorrência direta dos veículos elétricos cuja viabilidade de produção em escala comercial vem sendo alavancada pelo rápido desenvolvimento de baterias. Sendo assim este estudo será focado na geração de energia (elétrica, térmica ou mecânica) por meio da combustão e nos principais desafios relacionados à utilização deste energético em equipamentos que tradicionalmente operam com hidrocarbonetos.

Os principais equipamentos de grande porte que podem ser aplicados para a geração de energia a partir da combustão do hidrogênio são as turbinas e os

motores de combustão interna (CI), cujo esquema de funcionamento encontra-se representado nas Figuras 1.5 e 1.6 respectivamente. Nas turbinas a injeção de combustível ocorre de forma contínua, enquanto nos motores de combustão interna o combustível é injetado de modo intermitente, apenas uma vez por ciclo.

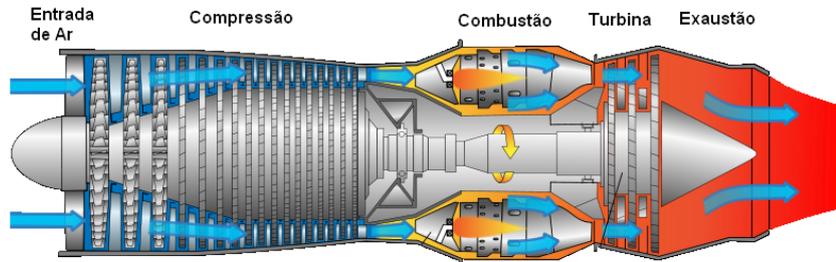


Figura 1.5: Esquemático de funcionamento de turbinas a gás (adaptado de (FAA, 2004)).

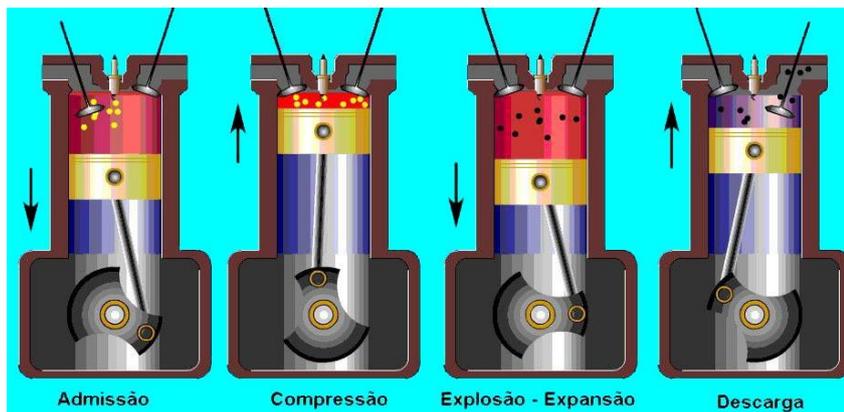


Figura 1.6: Esquemático de funcionamento de motores de combustão interna (Da Silveira, 2011).

Apesar das grandes diferenças entre essas máquinas, ambas tem limitações para a substituição dos combustíveis tradicionais pelo hidrogênio devido à grande difusividade de massa, elevada velocidade de propagação de chama, baixo poder calorífico em base volumétrica, elevada relação ar combustível estequiométrica e elevada temperatura de combustão deste combustível (Perry e Green, 2008, Glassman, 1996, Yaws, 2010). Se os efeitos destas propriedades sobre o processo de combustão não forem tratados de forma adequada, podem ocorrer os seguintes problemas na operação de turbinas a gás (Huang e Yang, 2009, Khajavi e Shariat, 2004, Santoro, 2002):

- Limitação de potência devido à elevada vazão requerida de combustível;
- Superaquecimento dos bicos injetores;

- Aumento das emissões de NO<sub>x</sub>;
- Danos à câmara de combustão devido à formação de pontos quentes;
- Acúmulo de combustível durante o processo de partida, podendo levar à alta temperatura na câmara;
- Instabilidade de chama;
- Danos às palhetas rotoras e estatoras da turbina devido à não homogeneidade da temperatura na saída da câmara de combustão;
- Prolongamento da chama para além da câmara de combustão.

A utilização de hidrogênio de modo inadvertido em motores de combustão interna pode levar aos seguintes problemas (Verhelst *et al.*, 2009):

- Redução da potência devido ao aumento do trabalho de compressão requerido;
- Redução da potência devido à baixa densidade energética do combustível (Ciclo Otto);
- Redução da eficiência devido à maior troca de calor entre os gases no interior do cilindro e o bloco do motor;
- Autoignição da mistura não queimada em motores que utilizam centelha (“batida de pino”);
- Aumento das emissões de NO<sub>x</sub>;

No entanto, a utilização do hidrogênio apresenta vantagens relacionadas ao arrefecimento destes equipamentos uma vez que a chama produzida é pouco radiante e conseqüentemente transfere menos calor para as paredes dos equipamentos. Tal vantagem, por outro lado, se torna um grande desafio ao se utilizar ciclos combinados, uma vez que deve-se aumentar a área de troca térmica das caldeiras de recuperação.

Em motores de combustão interna, a utilização do hidrogênio ainda apresenta as seguintes vantagens quando comparado aos hidrocarbonetos usuais (Verhelst *et al.*, 2009):

- Maior possibilidade de controle da potência pela alteração da riqueza devido à maior faixa de inflamabilidade do hidrogênio;
- Maior tolerância à diluição por excesso de ar ou recirculação dos gases de exausto (*Exhaust Gas Recirculation - EGR*);
- Maior razão de compressão;
- Combustão completa devido à elevada velocidade de propagação da frente de chama;

## 1.5

### Objetivos deste Trabalho

O presente trabalho é composto de uma parcela experimental e uma numérica, cujos objetivos são:

- Determinação experimental simultânea de dois componentes do campo de velocidades e da concentração de espécies químicas características da combustão do hidrogênio ( $OH$ ) ancorada em um corpo rombudo.
- Reprodução numérica do experimento utilizando os modelos mais indicados de turbulência e combustão implementados no software ANSYS/FLUENT.
- Comparação dos resultados das simulações com os experimentais permitindo a validação da metodologia de simulação de chamas não pré-misturadas, que poderá ser empregada para a avaliação e desenvolvimento de equipamentos industriais.
- Combinação dos resultados experimentais e numéricos para o estudo da interação da turbulência e da chama.

Os regimes de combustão não pré-misturados, que são o foco deste trabalho, assemelham-se aos encontrados em combustores de fornos e caldeiras, bem como em motores de combustão por injeção direta e em setores da câmara de combustão de alguns modelos de turbinas a gás, porém, com pressões inferiores. Sendo assim, a compreensão da interação do escoamento com a frente de chama no aparato experimental pode ser de grande valia no desenvolvimento tecnológico de diversos processos de combustão de interesse industrial.

## 1.6

### Organização do Manuscrito

Esta dissertação está dividida em seis capítulos e um apêndice. O segundo capítulo apresenta uma revisão da literatura dos principais trabalhos experimentais e numéricos relacionados à combustão do hidrogênio estabilizada a jusante de corpos rombudos. No capítulo três é descrito o aparato experimental, com ênfase nas alterações realizadas pelo autor, e as técnicas que foram empregadas neste trabalho. Os modelos numéricos adotados, a malha de cálculo e as condições de contorno estão descritas no capítulo quatro. O quinto capítulo apresenta os resultados do estudo de malha e da comparação dos modelos de turbulência com dados obtidos para escoamento inerte por Caetano (2012). No mesmo capítulo é feita a comparação dos resultados numéricos com os resultados experimentais obtidos para combustão do hidrogênio no presente

trabalho, propiciando a validação da metodologia numérica e a avaliação das estruturas turbulentas e dos regimes de combustão obtidos. As conclusões e sugestões para trabalhos futuros são apresentados no capítulo 6. Já o mecanismo de cinética química adotado está transcrito no apêndice A.

## 2

### Revisão Bibliográfica

Neste capítulo serão apresentados os principais trabalhos relacionados à combustão do hidrogênio e de outros combustíveis gasosos estabilizada a jusante de corpos rombudos. Os trabalhos apresentados foram divididos em experimentais e numéricos. Na seção 2.1 será dado enfoque na geometria do queimador, no regime de combustão e no aparato de medição empregado. Já na seção 2.2, serão abordados modelos e malhas adotados, bem como as contribuições de cada publicação.

#### 2.1

##### Estudos Experimentais

Um grupo ativo no estudo da combustão não pré-misturada ancorada em corpos rombudos é o grupo de pesquisas em termo fluidos do departamento de engenharias aeroespacial, mecânica e mecatrônica (AMME) da Universidade de Sydney. Este grupo possui um queimador tipo corpo rombudo com corpo cilíndrico e canal para direcionamento do escoamento anular retangular, conforme mostra a figura 2.1. Neste laboratório estão disponíveis equipamentos para os seguintes tipos de diagnósticos a Laser (Sydney, 2011):

- Velocimetria Doppler a Laser (LDV), para medições simultâneas de dois componentes da velocidade;
- Espalhamento Rayleigh, para medição da fração de mistura em escoamentos não reativos;
- Espalhamento Raman espontâneo para medição de temperatura de modo indireto, com base na variação de densidade (assumindo o gás como ideal);
- Fluorescência Induzida a Laser (LIF) para medição de concentrações de espécies químicas.

Os pesquisadores deste laboratório realizaram diversas medições com escoamentos não reativos e com combustão de hidrogênio ( $H_2$ ), metano ( $CH_4$ ), metanol ( $CH_3OH$ ), monóxido de carbono ( $CO$ ) e misturas entre estes combustíveis. Os campos de velocidade, fração de mistura, temperatura e fração mássica das principais espécies foram disponibilizados na forma de base de dados completa em seu sítio na internet (Sydney, 2011). Estes dados foram

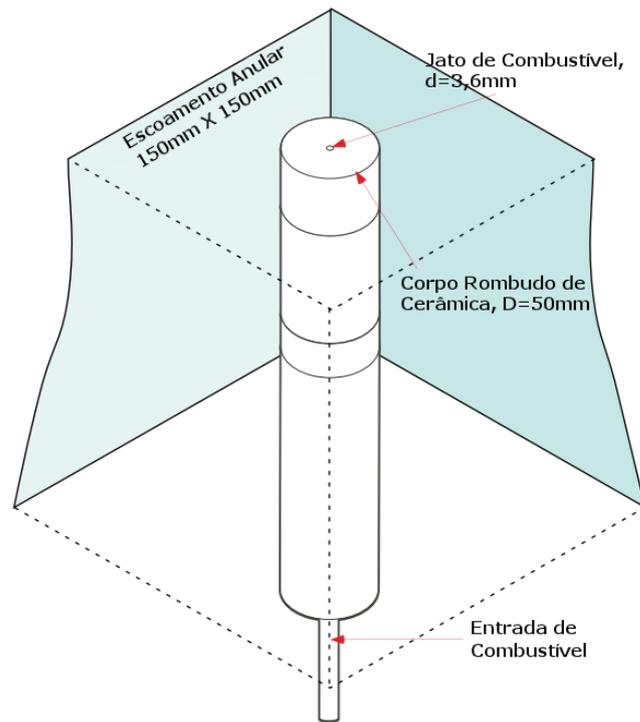


Figura 2.1: Aparato experimental da Universidade de Sydney (adaptado de (Sydney, 2011)).

utilizados como base para a validação de diversos trabalhos numéricos como será visto na próxima seção.

Dally *et al.* (1998) descreveram detalhadamente o aparato experimental utilizado no laboratorial do AMME e os procedimentos empregados para realizar medições simultâneas Raman / Rayleigh / LIF pontuais. São também apresentados os cálculos de incerteza de medição e estudos de resolução espacial para as técnicas apresentadas. As técnicas descritas foram aplicadas na análise da combustão com ar das misturas  $H_2/CO$ ,  $H_2/CH_4$  e metanol gasoso em diversas relações de velocidade do jato ( $U_J$ ) e do anular ( $U_A$ ) com o intuito de avaliar o efeito do número de Damköhler (Relação entre o tempo característico da turbulência -  $\tau_t$  e a escala de tempo da combustão -  $\tau_c$ ) nas emissões, nas extinções localizadas e no comportamento das zonas de recirculação e estreitamento da chama. Os principais parâmetros das chamas avaliadas neste trabalho (Combustível, Nomenclatura da Chama, Relação entre a velocidade do jato e a velocidade do anular -  $U_J/U_A$ , número de Reynolds do Jato -  $Re_J$ , Porcentagem do ponto de apagamento da chama - %BO e temperatura de injeção do combustível -  $T_{IN}(K)$ ) encontram-se na Tabela 2.1.

São reportadas medições de fração de mistura, temperatura e concentração de  $CO$ ,  $OH$ ,  $H_2$ ,  $CO_2$ ,  $NO$ ,  $H_2O$  e  $O_2$  para oito distâncias do corpo rombudo. Um exemplo dos resultados obtidos são os perfis fração de mistura em 4 diferentes alturas para as chamas HM1, HM2 e HM3 apresentados na

Tabela 2.1: Experimentos do laboratório AMME da Universidade de Sydney (Dally *et al.*, 1998).

Combustível	Chama	$U_J/U_A(m/s/m/s)$	$Re_J$	%BO	$T_{IN}(K)$
$CH_3OH$	ML1	80/40	23.700	55	373
	ML2	121/40	35.900	84	
	ML3	134/40	39.700	93	
$H_2/CO$ (2:1)	HC1	134/40	17.500	18	298
	HC2	321/40	41.990	43	
	HC3	536/40	70.120	74	
$H_2/CH_4$ (1:1)	HM1	118/40	15.800	50	373
	HM2	178/40	23.900	75	
	HM3	214/40	28.700	91	

figura 2.2. Com os resultados apresentados é possível identificar três camadas de mistura na zona de recirculação; uma externa entre o vórtice externo e o escoamento anular, uma intermediária entre os vórtices interno e externo e uma interna entre o vórtice interno e o jato. A importância de cada uma dessas camadas varia de acordo com a relação de velocidades do jato e do anular. Quanto maior a velocidade do jato, maior será a importância da camada interna, o que leva a zona de reação a se aproximar do jato.

Segundo os autores, o efeito dessa translação da zona de reação sobre a temperatura e a concentração de  $OH$  são mais sentidos no interior da zona de recirculação. A temperatura e as concentrações das espécies na zona de recirculação se assemelharam às obtidas por simulações que adotam modelos de química rápida, indicando que estes modelos se adequam nesta região.

Masri *et al.* (1998) utilizaram as mesmas técnica e aparatos descritos por Dally *et al.* (1998) com o intuito de estudar a estrutura da zona de recirculação em uma chama turbulenta não pré-misturada ancorada por um corpo rombudo. Foi adotada uma mistura de gás natural comprimido (GNC) e Hidrogênio na proporção 1:1 em volume que foi estudada com velocidade do ar no anular igual a 35 m/s e duas diferentes velocidades no jato, 108 e 194 m/s, chamados de caso BB1 e BB2 respectivamente. A estrutura da zona de recirculação foi mostrada através de imagens instantâneas de campos de fração de mistura ar/combustível, temperatura e fração mássica de  $OH$  como o apresentado na figura 2.3.

Os resultados obtidos mostraram a existência de zonas de combustão duplas no interior da zona de recirculação. A baixas velocidade do jato de combustível a zona de reação é fina e se posiciona nas proximidade da borda externa da região de recirculação. As zonas duplas de combustão se tornam mais frequentes, indicando o deslocamento da reação na direção

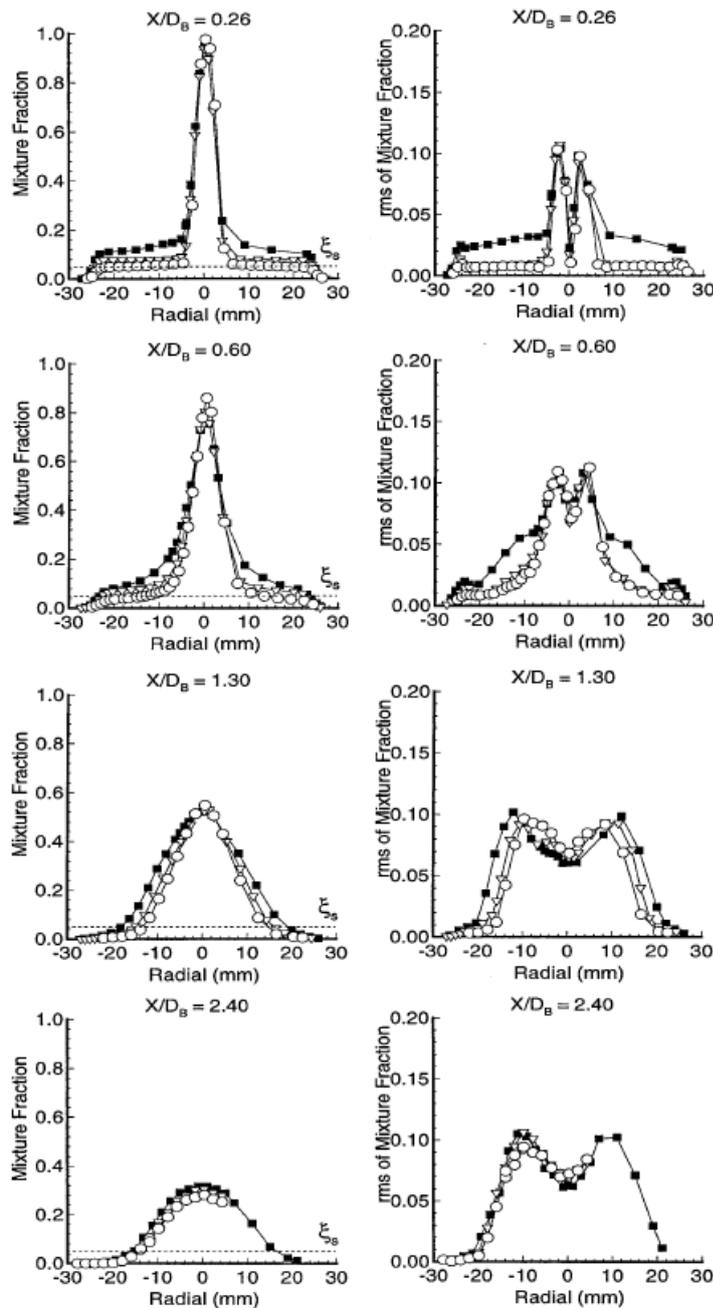


Figura 2.2: Médias e rms da fração de mistura nas chamas HM1 (quadrados), HM2 (triângulos) e HM3 (círculos) (Dally *et al.*, 1998).

do jato, ao se aumentar a velocidade de injeção de combustível. Extições localizadas foram detectadas após a zona de recirculação e apenas para o caso de maior velocidade, que se aproximava da velocidade na qual a chama é apagada. Estruturas coerentes foram detectadas fora da zona de recirculação, no entanto, tais estruturas não influenciam significativamente a mistura entre ar e combustível.

Namazian *et al.* (1989) estudaram a combustão não pré-misturada de  $CH_4$  no ar no aparato representado na (figura 2.4). Foram feitas medidas num

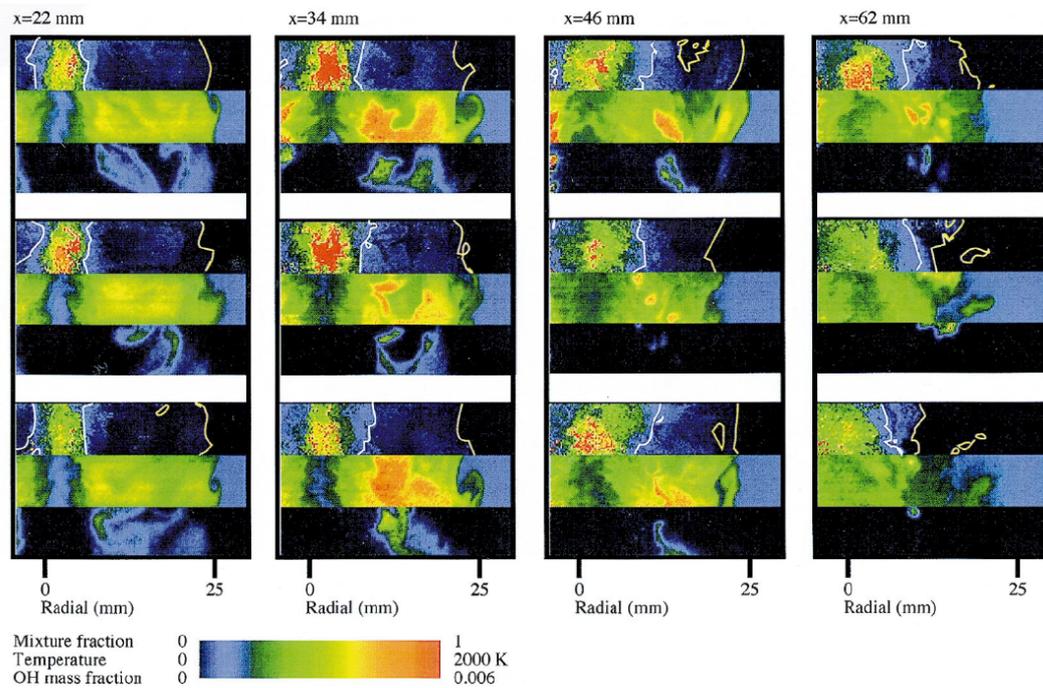


Figura 2.3: Conjuntos de três imagens instantâneas de fração de mistura, temperatura e fração mássica de  $OH$  (de cima para baixo), em faixas de 8mm centradas a 22, 34, 46 e 62 mm da superfície do corpo rombudo (da esquerda para a direita) obtidas para a condição BB2. O sentido do escoamento é do fundo para o topo. As linhas brancas marcadas sobre o campo de mistura indicam os limites de inflamabilidade da mistura ar combustível (Masri *et al.*, 1998).

plano perpendicular ao escoamento passando pelo centro do jato utilizando as técnicas de espalhamento Mie a partir de partículas dispersas no fluido para medições de velocidade, espalhamento Raman para medição de concentração de  $CH_4$  e Raman/LIF para a medidas de concentração de  $CH$ .

Segundo os autores, altas velocidades de ar provocam a formação de um ponto de estagnação no escoamento que se move no sentido do escoamento ao se aumentar a emissão de calor da chama. Tal região de estagnação assume função de zona de ignição de chama. As imagens instantâneas obtidas com interferometria Mie mostraram que o escoamento e a mistura são compostos por estruturas de grande escala não estacionárias, coerentes e não coerentes. As medidas de concentração de  $CH_4$  permitiram comprovar o caráter axissimétrico não estacionário do jato de combustível. Foi mostrado que grandes escalas de turbulência levam à formação de bolsões de ar nas fronteiras do jato, e que a taxa de mistura do combustível com o ar é oito vezes maior nas fronteiras desta estrutura. Ao se aumentar a velocidade do escoamento anular foi possível detectar um regime onde o jato fica estagnado na direção axial e se espalha em direção radial.

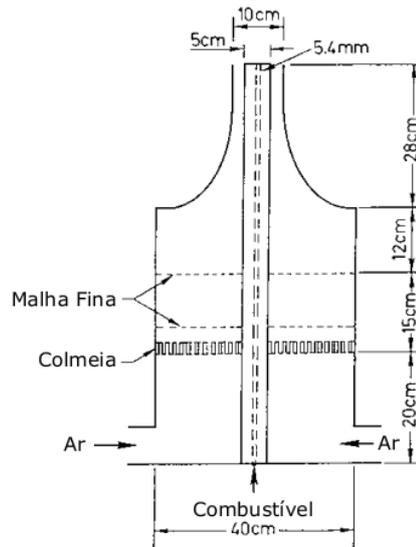


Figura 2.4: Queimador de Sandia (adaptado de (Namazian *et al.*, 1989).

Os resultados mostraram, ainda, que a combustão ocorre em porções isoladas do escoamento, indicando que a aproximação por elementos de chama pode ser válida. No entanto o caráter altamente transiente do escoamento, principalmente na região de mistura, torna difícil a sua modelagem em regime permanente, sendo recomendada a simulação transiente.

Huang e Lin (1994, 2000), estudaram chamas não pré-misturadas ancoradas em um disco com o intuito de classificar os regimes de combustão em função das velocidades do jato ( $U_j$ ) e do ar anular ( $U_a$ ). Para tanto foi utilizado um combustível com a seguinte composição 95%  $C_3H_8$ ; 3,5%  $C_2H_6$  e 1,5%  $C_4H_{10}$  com uma ampla variação das velocidades do jato e do anular. O aparato experimental está descrito na figura 2.5. Foram feitas medições de velocidade com a técnica Velocimetria Laser Doppler (LDV) e o formato da chama com a técnica Schlieren que se baseia em fotografias.

Pela metodologia proposta, foram detectados sete regimes de combustão que foram representados na figura 2.6. As descrições dos regimes propostos por Huang e Lin (1994) encontram-se abaixo, sendo que a relação  $U_j/U_a$  aumenta da chama I para a chama VII:

- I Com recirculação - combustão ocorre em região rica em combustível;
- II Em transição - ocorrem descolamentos intermitentes da chama;
- III Descoladas instáveis - a chama se desloca completamente e a chama se torna instável;
- IV Com anel laminar - o aumento da velocidade relativa do jato promove a reestabilização da chama que volta a se ancorar na base do queimador;

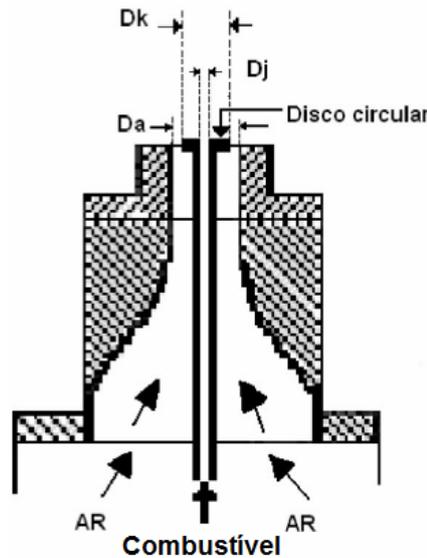


Figura 2.5: Combustor aberto utilizado por Huang e Lin (adaptado de (Huang e Lin, 1994)). Dimensões  $D_j = 3,4\text{mm}$ ,  $D_k = 20\text{mm}$  e  $D_a = 30\text{mm}$ .

- V Desenvolvidas - Surge uma zona de garganta a jusante da zona de recirculação, após a qual a luminosidade aumenta;
- VI Brilho dividido (*split flashing*) - a zona de formação de fuligem desaparece, deixando a chama inteiramente azul, e o comprimento da chama se reduz;
- VII Deslocadas - A chama se descola, a uma distância superior à encontrada na chama II.

A metodologia proposta por Huang e Lin, pode apresentar limitações de aplicação por não considerar a cinética de combustão e a geometria do ancorador de chama. A validade desta classificação para chamas de hidrogênio será avaliada na seção 5.4.3. Uma outra forma de classificar os regimes de combustão, com base nos números de Reynolds e de Damköhler será apresentada na seção 2.2

Alvarez Aquino (2006) e Alvarez Aquino *et al.* (2007), projetaram e montaram os primeiros experimentos do laboratório de combustão e turbulência do departamento de engenharia mecânica da PUC-Rio. Seus objetivos eram determinar experimentalmente os perfis de velocidade na região de recirculação a jusante do queimador com ou sem combustão. Paralelamente aos estudos experimentais foram realizadas simulações que serão descritas na próxima seção. Para estes experimentos o autor utilizou as técnicas de Velocimetria de Partículas a Laser (PIV) e Velocimetria Doppler a Laser (LDV), que permitiram a medição dos componentes transversal e longitudinal de velocidade.

Foram testados diversos sistemas para gerar partículas. Inicialmente usou-se incenso que permitiu a primeira visualização das grandes escalas

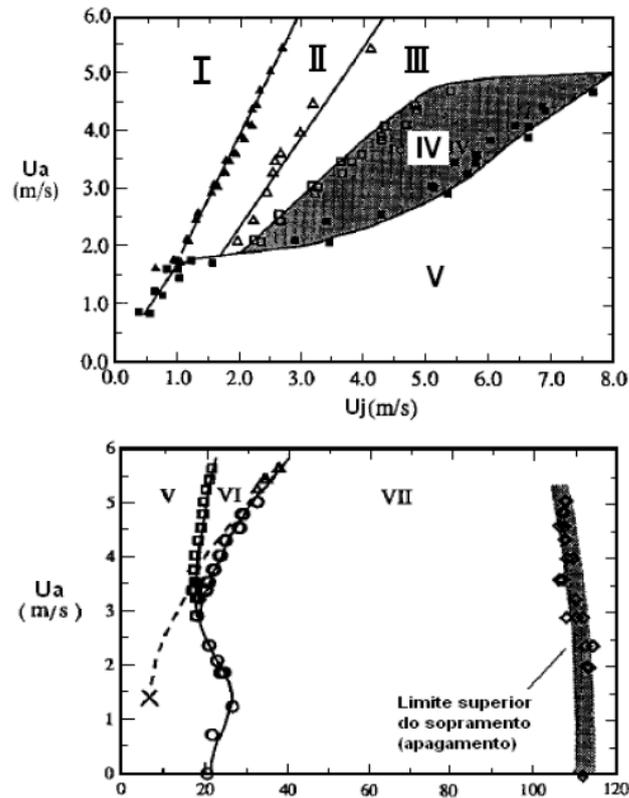


Figura 2.6: Classificação das chamas com base nas velocidades do jato e do ar anular proposta por Huang e Lin (adaptado de (Huang e Lin, 1994)).

passando para um gerador de fumaça a base de glicerina que permitiu utilizar a técnica LDV, mas não PIV. Foi então testado um gerador de partículas de bolhas de óleo, que são adequadas para o escoamento inerte, mas que se evaporam no escoamento reativo. Uma descrição detalhada dos sistemas de geração de partículas traçadoras, bem como dos demais equipamentos do laboratório pode ser encontrada em Alvarez Aquino (2006).

Os métodos experimentais empregados para a medição da velocidade apresentaram resultados similares, sendo que a maior diferença entre os seus valores medidos é da ordem de 5% e encontra-se no interior do jato. Mesmo tendo atingido bons resultados, o autor recomendou uma série de modificações do aparato experimental que foram adotadas em trabalhos posteriores.

Huapaya (2008) e Huapaya *et al.* (2008) realizaram uma caracterização numérico-experimental de chamas turbulentas de gás natural em ar nas instalações da PUC-Rio (vide cap. 2.2 para informações sobre a parte numérica). Para tanto foram feitas as alterações na câmara tranquilizadora, no corpo rombudo e no sistema de alimentação de ar, conforme sugerido por Alvarez Aquino (2006). Neste trabalho foi instalado um sistema de medição de concentração de espécies químicas por fluorescência induzida por plano laser (PLIF) e os esforços se concentraram na caracterização de regimes de combustão através

de medidas do radical hidroxila ( $OH$ ), que supõe-se representar a frente de chama.

O autor comparou o desempenho dos filtros de suavização lineares e os “Gaussianos” na redução dos ruídos do processo de aquisição das imagens do PLIF. A figura 2.7 mostra que a influência dos filtros lineares sobre o valor máximo e sobre a suavização da intensidade é maior que a dos filtros Gaussianos

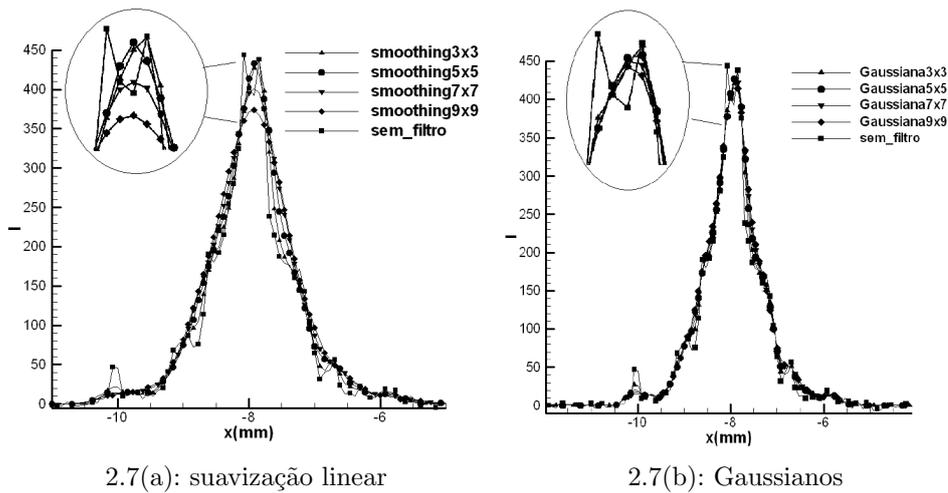


Figura 2.7: Comparação dos diferentes filtros aplicados sobre uma imagem instantânea da intensidade de fluorescência ( $I$ ) de  $OH$  em função da posição axial ( $x$ ) em uma chama turbulenta não pré-misturada (Huapaya, 2008).

Foram obtidos campos de concentração de  $OH$  em onze diferentes combinações de velocidades do jato e do escoamento anulares. Estas imagens permitiram caracterizar três diferentes regimes de combustão, as chamas em tipo V, I e II, segundo classificação de Huang e Lin (1994). As chamas tipo V são caracterizadas pela presença de um vórtice externo, e um interno de menor tamanho e pela localização do ponto de estagnação fora do eixo de simetria. As tipo I ocorrem com o aumento da velocidade do anular que leva a chama a se ancorar na face do queimador, já o tipo II é uma transição entre os dois outros tipos, sendo caracterizadas por instabilidades quanto à sua posição. A figura 2.8, apresenta campos de concentração média de  $OH$  obtidos pelo autor para os três regimes de combustão.

As chamas tipo V se alongam conforme aumenta-se a vazão de gás natural, tornando-se mais dominadas pelo jato central. Segundo o autor a curvatura de chama está relacionada ao aumento de espessura da região onde se encontra o radical  $OH$ , que poderia estar ligada à compressão local. No entanto para se verificar este fenômeno seria necessária medição simultânea

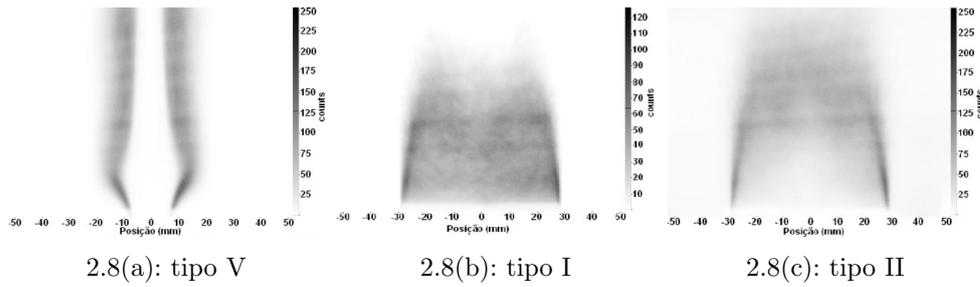


Figura 2.8: Concentrações de  $OH$  obtidas com a médias de 1000 imagens PLIF em três diferentes regimes de combustão (Huapaya, 2008).

da velocidade. Os campos médios destas chamas apresentaram, ainda, grande simetria indicando a validade da hipótese de simetria axial.

As imagens instantâneas das chamas tipo I e II apresentaram grandes variações da estrutura interna e da frente da chama, além de extinções localizadas, invalidando a hipótese de elementos de chamas para a simulação do escoamento instantâneo.

## 2.2 Estudos Numéricos

Para facilitar as comparações entre as geometrias e malhas, será adotada a nomenclatura representada pela figura (2.9) para identificar as principais dimensões do domínio.

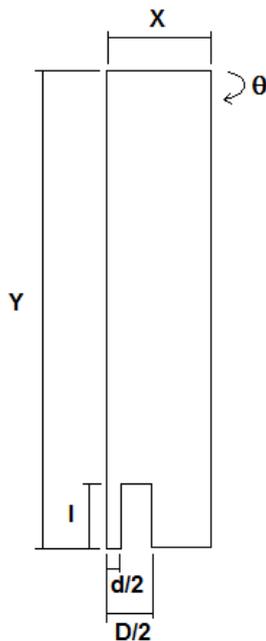


Figura 2.9: Nomenclatura dos domínios computacionais.

Inicialmente serão revisados trabalhos realizados no laboratório de com-

bustão e turbulência do departamento de engenharia mecânica da PUC-Rio e, posteriormente trabalhos que são referências mundiais neste tipo de simulação.

Caetano *et al.* (2009) desenvolveram uma metodologia para caracterização do regime de combustão turbulenta em um diagrama número de Reynolds vs. número de Damköhler. Neste trabalho foram simulados catorze casos de escoamento não reativo com diferentes velocidades do jato e do escoamento anular do corpo rombudo do laboratório da PUC-Rio, de modo a se obter o campo de número de Reynolds Turbulento ( $Re_t$ ) e a frequência dos vórtices turbulentos. Da frequência de turbulência foi calculado o tempo característico da turbulência que foi relacionado ao tempo químico obtido através de bibliotecas de chama geradas com auxílio do software Chemkin-II. O diagrama resultante (figura 2.10) foi utilizado no presente trabalho como base para a seleção das velocidades de jato e do escoamento anular que serão empregadas nos experimentos. A caracterização dos regimes de combustão dos casos estudados no presente trabalho será feita no capítulo de resultados e discussões (cap.5).

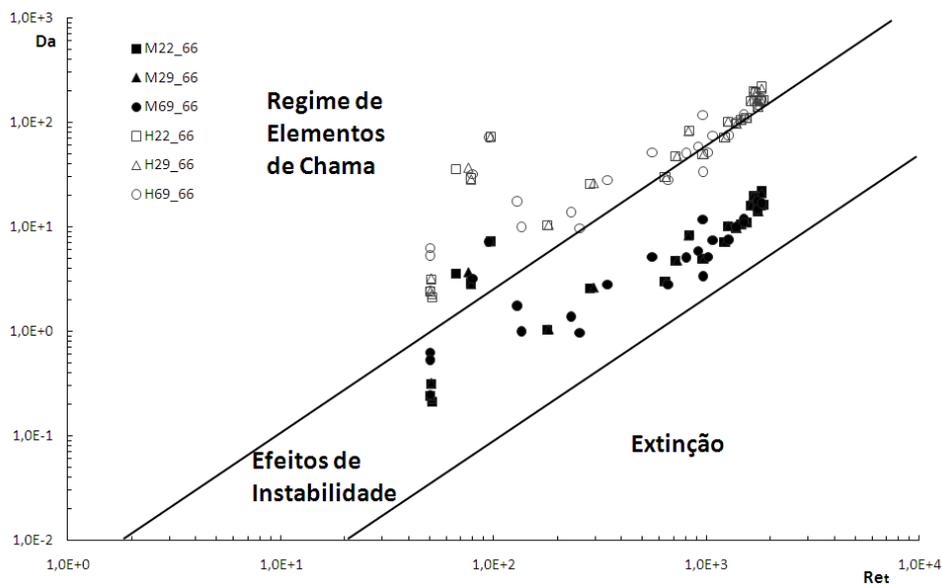


Figura 2.10: Regimes de combustão para hidrogênio e metano no ar (Caetano *et al.*, 2009).

Alvarez Aquino (2006), em seu trabalho numérico-experimental, visou a determinação dos campos de velocidade na região de recirculação do corpo rombudo do laboratório da PUC-Rio (vide cap.2.1 para informações sobre a parte experimental). O autor optou por empregar os modelos de turbulência  $k - \varepsilon$  e  $SST$  que foram validados com dados experimentais de Correa e Gulati(1992), obtidos em uma montagem similar a da PUC-Rio. Nesta etapa Alvarez avaliou apenas o escoamento quimicamente inerte, obtendo melhores resultados para o modelo SST.

A comparação dos resultados numéricos e experimentais obtidos pelo autor mostraram grandes discrepâncias na região de recirculação, tanto na predição das localização de regiões características do escoamento como nos valores de velocidade e intensidade turbulenta na linha de centro do jato, nas proximidades do corpo rombudo. Melhores resultados foram encontrados nas regiões mais afastadas  $x/d > 19$  (onde “ $x$ ” é a distância a partir do corpo rombudo e “ $d$ ” é o diâmetro do orifício de injeção do combustível), como pode ser visto na figura 2.11.

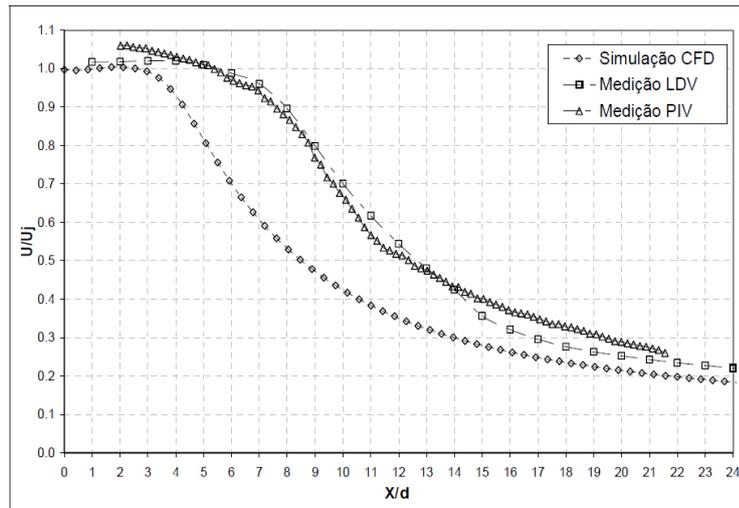


Figura 2.11: Comparação da evolução da velocidade média longitudinal ( $U$ ) ao longo da direção longitudinal (Alvarez Aquino, 2006).

Huapaya (2008) e Huapaya *et al.* (2008) realizaram uma caracterização numérico-experimental de chamas turbulentas de Metano em ar nas instalações da PUC-Rio (vide cap. 2.1 para informações sobre a parte experimental). Na primeira etapa do trabalho o autor utilizou quatro modelos de turbulência ( $k - \varepsilon$ , RNG  $k - \varepsilon$ ,  $k - \omega$  e  $SST$ ), duas formas diferentes de se prescrever as quantidades turbulentas e dois modelos para combustão (EDM e elementos de chama) que foram validados com os dados de Schefer *et al.* (1987). Nesta etapa também foi feito um estudo de sensibilidade dos resultados obtidos em relação à malha. Uma das soluções avaliadas para a melhoria da qualidade da malha foi a adoção de um chanfro na região de intersecção dos dois planos de simetria (injeção do combustível) conforme pode ser visto na figura (2.12). Esta pequena alteração na geometria permitiu uma melhora significativa na razão de aspecto (alongamento) dos elementos da malha nesta região, que se refletiu na melhoria dos resultados obtidos.

Os melhores resultados para o caso de validação foram obtidos com o modelo de turbulência  $k - \varepsilon$ , com as quantidades turbulentas prescritas como no trabalho de Correa e Gulati (1992) e com o modelo de elementos de chama

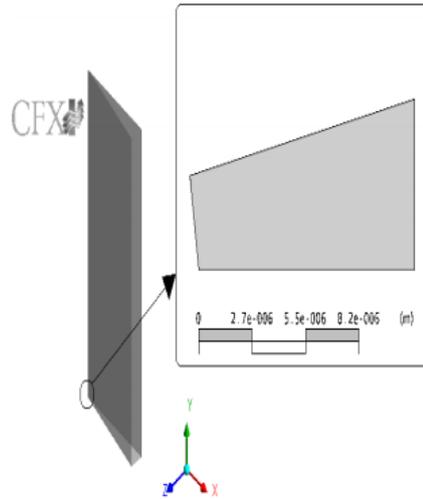


Figura 2.12: Chanfro para melhorar qualidade da malha (Huapaya, 2008).

(*Flamelet*) para a combustão. Com os modelos validados, o autor realizou simulações em condições similares às empregadas na etapa experimental. Como os experimentos mediram apenas intensidade fluorescente do radical OH, não foi possível obter uma validação quantitativa dos resultados. O autor conseguiu obter resultados qualitativamente bons, conseguindo representar corretamente a forma da chama, conforme pode ser visto na figura 2.13.

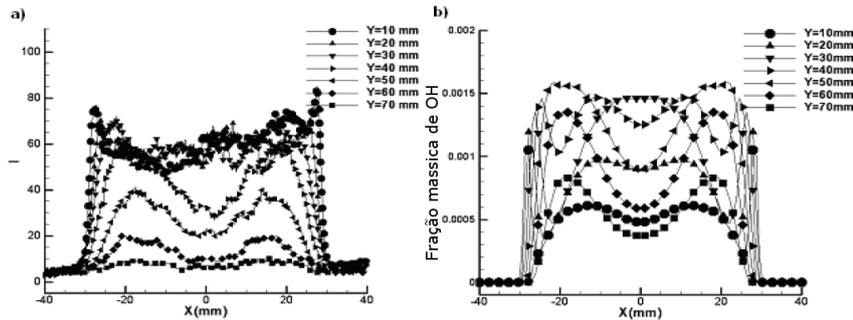


Figura 2.13: (a) Comparação entre intensidade de fluorescência de OH medida experimentalmente e (b) fração mássica de OH calculada experimentalmente (adaptado de (Huapaya, 2008)).

Lemay (2010) simulou o caso de chama HM1 da Universidade de Sydney e os validou por comparação com os resultados de Dally *et al.* (1998). O autor utilizou modelos de turbulência de primeira e segunda ordem ( $k-\varepsilon$ ,  $k-\omega$  e *SST* e LRR, SSG, ARSM e EARSM) e validou uma malha para cada categoria de modelo de turbulência por comparação com resultados obtidos em escoamentos quimicamente inertes. O modelo de combustão empregado nos casos reativos foi o modelo de elemento de chama (*Flamelet*) com biblioteca gerada com o *software* CFX-RIF. Foram ensaiados dois tipos de condição de entrada para

o escoamento anular, impondo o perfis de velocidade e turbulência obtidos experimentalmente ou um perfil médio.

Segundo o autor, os resultados obtidos indicaram que o modelo híbrido  $k - \varepsilon$  EARSM, aplicado conjuntamente com a imposição das condições de contorno experimentais, é o mais indicado para simulação deste caso. O modelo de elementos de chama apresentou resultados satisfatórios na predição da concentração das espécies químicas.

Diversos autores optaram por adotar o transporte da função densidade de probabilidade (*Probability Density Function - PDF*) para descrever a combustão (Muradoglu *et al.*, 2003, Liu *et al.*, 2005, Merci *et al.*, 2006), pois esta técnica permite tratar a convecção e as reações químicas de forma fechada. Isto a torna mais atrativa que os métodos convencionais para a simulação de escoamentos reativos (Pope, 1985).

Muradoglu *et al.* (2003) adotaram um modelo híbrido, onde as equações médias de conservação de massa, quantidade de movimento e energia são derivadas diretamente da equação de transporte PDF conjunta da flutuação de velocidade, frequência turbulenta e composição que são acopladas à equação média de estado. As equações médias de conservação são então resolvidas por um método de volumes finitos para a obtenção dos campos médios de densidade, velocidade e energia interna sensível equivalente e o campo de pressão é enfim determinado pela equação de estado. A combustão foi descrita através de um modelo de elementos de chama/PDF simplificado que não foi descrito em detalhes, pois o trabalho tinha como principal enfoque a descrição do escoamento médio. O autor deu grande atenção ao estudo de sensibilidade dos modelos às variações de suas constantes e validou os resultados por comparação com os resultados do queimador da Universidade de Sidney. Os resultados deste trabalho serviram como base para diversos trabalhos que utilizaram funções densidade de probabilidade dentre eles os trabalhos de Merci *et al.* (2006) e Liu *et al.* (2005) que serão apresentados neste capítulo.

Liu *et al.* (2005) simularam três casos do combustor de Sydney (HM1, HM2 e HM3) utilizando modelo de transporte de função densidade de probabilidade conjunta da velocidade, frequência turbulenta e composição. A combustão do metano foi descrita pelo mecanismo reduzido ARM2, com 19 espécies, e foi implementado usando tabela de elementos de chama adaptativa *in situ* (ISAT). O mecanismo ARM2 foi gerado com base no mecanismo GRI 2.11. O modelo de mistura adotado é um modelo de interação de partículas denominado “Árvore Geradora Mínima Euclidiana” (*“Euclidean minimum spanning tree” - EMST*).

Este trabalho não apresenta bons resultados nas simulações, em parti-

cular no que diz respeito às chamas HM2 e HM3, que possuem mais pontos de extinção localizada, ao serem comparados com os resultados numéricos de Dally *et al.* (1998) e Masri *et al.* (1998), conforme pode ser visto nos dos perfis de média de Favre da fração mássica de  $CO_2$  mostrados na figura 2.14. Tal falha na predição de extinções foi atribuída a imprecisões no cálculo da fração de mistura média na região de recirculação. Foi dada, ainda, grande atenção à sensibilidade dos resultados à variação da constantes de mistura do modelo. Conclui-se que novos modelos de mistura devem ser empregados para se alcançar melhores resultados.

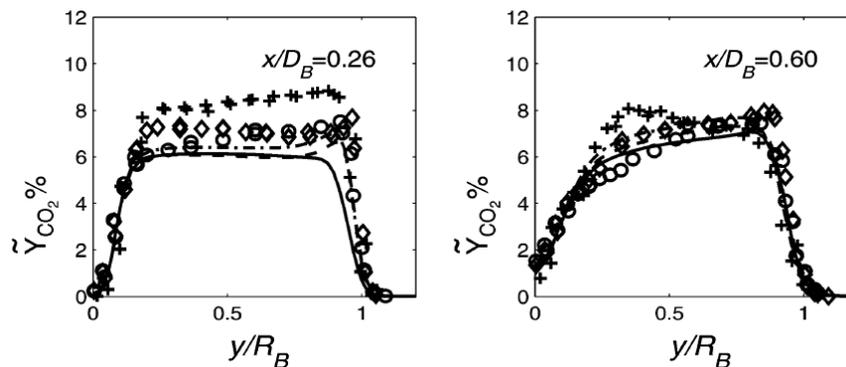


Figura 2.14: Perfis de média de Favre da fração mássica de  $CO_2$ : HM1 (experimental,  $\circ$ ; numérico, linha sólida), HM2 (experimental,  $\diamond$ ; numérico, linha tracejada) e HM3 (experimental,  $+$ ; numérico, linha traço ponto) (Liu *et al.*, 2005).

Merci *et al.* (2006) simularam os mesmos casos que Liu *et al.* (2005), mas optaram por utilizar um modelo de segunda ordem para o fechamento da turbulência (Tensor de Reynolds LRR-IP modificado) e o modelo de transporte escalar da função densidade de probabilidade combinada para descrever a interação entre a turbulência e a combustão. O maior enfoque deste trabalho foi a comparação de dois modelos de micro-mistura, modelo EMST e modelo de dispersão e coalescência de rotacional modificado (*modified Curl coalescence "dispersion model" - CD*), com o intuito de sanar as imprecisões encontradas em trabalhos precedentes no cálculo da mistura média em regiões de recirculação.

Os campos de velocidade apresentaram boa concordância com os dados experimentais disponíveis na comparação com os dados de Dally *et al.* disponíveis no site da Universidade de Sydney (Sydney, 2011), mas ainda há espaço para melhorias nos campos de temperatura, concentração de espécies majoritárias e de CO, principalmente, para os casos HM2 e HM3, como pode ser visto na figura 2.15. A adoção dos diferentes modelos de micro-mistura não provocou grandes alterações nos campos escalares, mas houve um aumento perceptível na quantidade de extinções localizadas. O modelo CD apresentou

melhores resultados na previsão de extinções localizadas, mas foi constatado que o mesmo é mais sensível à variação da escala de tempo de convecção e difusão turbulenta.

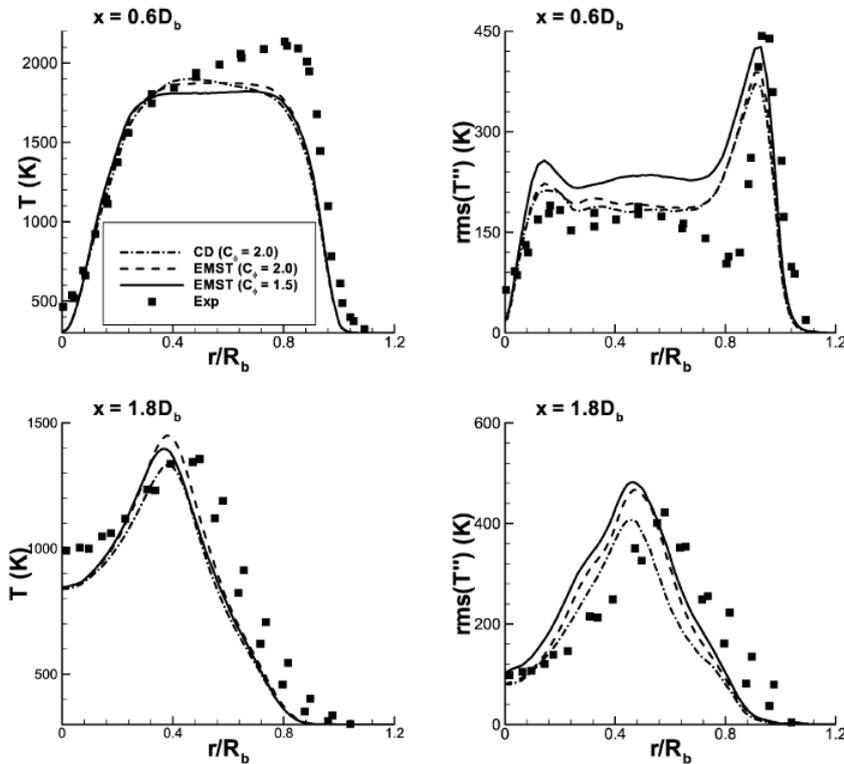


Figura 2.15: Perfis médios e flutuação rms da temperatura para a chama HM2 (Merci *et al.*, 2006)

De modo geral, os autores que utilizaram modelos de transporte de PDF encontraram bons resultados para os campos de velocidade, mas tiveram dificuldades na predição da extinção e da concentração de espécies químicas, indicando que ainda há espaço para melhoria nos modelos e que deve-se utilizar mecanismos de cinética mais completos. Entretanto, a adoção de mecanismos de cinética detalhada aumenta o custo computacional, que já é elevado nos casos estudados. Vale ressaltar que os trabalhos revisados adotaram abordagens bidimensionais para a resolução do problema.

Odedra e Malalasekera (2007), simularam o caso HM1 de Sydney (Dally *et al.*, 1998, Sydney, 2011) utilizando modelos de tensor de tensões de Reynolds (RSM) para modelagem da turbulência e modelos de elementos de chama em regime permanente e transiente para modelagem da combustão. Os efeitos transientes foram considerados em um pós-processamento utilizando um modelo de elemento de chama euleriano (*Eulerian particle flamelet model - EPFM*), onde partículas eulerianas são seguidas para se determinar o histórico da taxa de dissipação escalar condicionada pela fração de mistura estequiométrica.

trica. As bibliotecas de elementos de chama foram geradas com os mecanismos GRI 2.11 e 3.0 e San Diego.

As simulações mostraram que a inclusão dos efeitos transientes não exerceu grande influência sobre a concentração das espécies majoritárias e a estrutura da chama, mas tiveram influência sobre a predição de efeitos mais lentos, tal como a formação de NO. Os mecanismos de combustão empregados levaram a resultados similares para os campos de velocidade e espécies majoritárias, mas diferiram significativamente na predição do NO, onde o modelo GRI 2.11 apresentou os melhores resultados, conforme ilustrado na figura 2.16. Este trabalho mostrou que o modelo EPFM é capaz de prever com razoável acurácia a formação de NO, composto de grande importância do ponto de vista ambiental, mas que não é corretamente previsto pela maioria dos modelos.

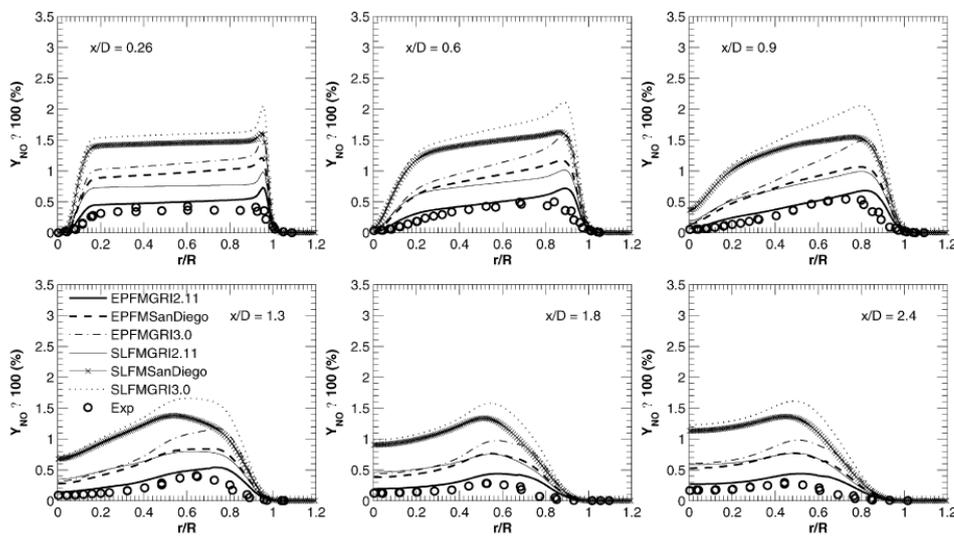


Figura 2.16: Comparação de perfis de Fração Mássica de NO entre os modelos e mecanismos adotados e os dados experimentais em três diferentes posições axiais (Odedra e Malalasekera, 2007).

O aumento da capacidade computacional, aliado ao desenvolvimento de novos *solvers* híbridos e modelos de turbulência e combustão, tem possibilitado a aplicação de metodologias de simulação de grandes escalas (*Large Edge Simulation - LES*) para a simulação de escoamentos turbulentos reativos (Ferziger e Peric, 2002). Dentre os autores que aplicaram esta metodologia para a simulação de combustão em escoamentos ancorados em corpos rombudos pode-se citar Raman e Pitsch (2005) e Kempf *et al.* (2006). Estes autores validaram seus trabalhos com dados experimentais obtidos no queimador da Universidade de Sidney, descrito no Capítulo 2.1.

A adoção de metodologias LES é motivada pelas limitações dos modelos RANS em lidar com escoamentos com estruturas turbulentas de grande escala

organizadas e não estacionárias, forte curvatura das linhas de corrente e transporte não gradiente (DiMare, 2004). Tais estruturas estão presentes em combustores do tipo corpo rombudo, onde há uma região de recirculação altamente transiente que interage com o jato de combustível gerando um padrão complexo de camada de mistura cisalhante na interface. No entanto, apesar da contribuição da metodologia LES para a simulação do escoamento não reativo ser amplamente aceita, o mesmo não pode ser afirmado com relação às reações químicas e à liberação de calor, uma vez que tais fenômenos ocorrem em escalas não resolvidas pelos modelos LES (Kempf *et al.*, 2006). Com isso muitos dos desafios enfrentados nas simulações RANS e LES são análogos, levando à adoção de modelos de combustão similares, com pequenas adaptações.

Raman e Pitsch (2005) estudaram a combustão de uma mistura de metano ( $CH_4$ ) e hidrogênio ( $H_2$ ) (50:50 vol.) em ar a um número de Reynolds de 15.800. Foi adotado um modelo de elementos de chama, com biblioteca obtida a partir do mecanismo GRI-2.11, para o fechamento termoquímico. Para o cálculo da escala de tempo foram adotadas sub-interações do tipo preditivo-corretivo onde a cada interação a equação de transporte escalar é avançada para se obter uma estimativa da densidade, que é então utilizada para adiantar a equação de quantidade de momento. A equação da continuidade é então fechada através de um termo fonte obtido na forma de uma taxa de mudança no erro do balanço de massa. No entanto, não é informado o passo de tempo adotado nas simulações.

Segundo os autores, o escoamento ao redor do corpo rombudo é altamente heterogêneo, levando a falhas na predição da variância do sub-filtro, o que pode ser resolvido com a solução de uma equação de transporte para o sub-filtro. No entanto, o autor avalia que não foram formulados modelos satisfatórios para a dissipação escalar filtrada e propõe a adoção de um procedimento de refino por filtro recursivo (*Recursive filter-refinement procedure - RFRP*) para a otimização da malha computacional empregada. Este modelo avalia a qualidade da malha com base no campo de variância do sub-filtro a cada 100 interações e propõe refinamentos da malha. A medida que a simulação se desenvolve, a parcela de energia não resolvida é reduzida até certo nível de refino, quando se torna praticamente constante. Neste ponto o processo de refino da malha deve ser interrompido. No entanto, o autor optou por utilizar um critério de parada baseado em um valor fixo de parcela resolvida da energia.

Os campos instantâneos de velocidade na direção axial ( $U$ ), temperatura e fração de mistura combustível/ar obtidos pelos autores encontram-se na figura 2.17. Os campos de velocidade, temperatura e concentração de  $CO$ ,  $CO_2$ ,

$H_2O$  obtidos mostraram boa concordância com os resultados experimentais. No entanto, as concentrações do OH são superestimadas, o que se deve à dependência não linear da concentração de tal componente em relação à variância do sub-filtro. A alteração da velocidade do escoamento do ar permitiu determinar a influência da camada cisalhante externa na estrutura da chama.

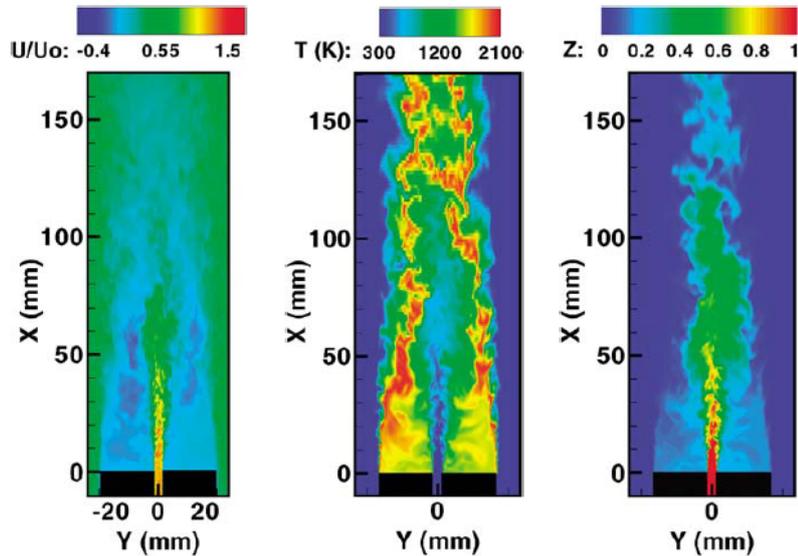


Figura 2.17: Campos instantâneos de velocidade axial (esquerda), temperatura (centro) e fração de mistura (direita) (Raman e Pitsch, 2005).

Kempf *et al.* (2006) simularam as mesmas condições experimentais estudadas por Raman e Pitsch (2005). Este trabalho teve como foco o estudo do escoamento ao redor do combustor, da influência das condições de contorno no campo próximo e dos requisitos de escala de tempo e resolução da malha. Foi adotado um modelo de elementos de chama com biblioteca obtida a partir de um mecanismo de cinética completa com 97 espécies e 629 reações para o fechamento termoquímico da reação de uma mistura de metano ( $CH_4$ ) e hidrogênio ( $H_2$ ) (50:50 vol.) em ar a um número de Reynolds de 15.800. Foi adotado um domínio computacional cilíndrico com diâmetro de 8.8 diâmetros do corpo rombudo (8.8D) e comprimento 5D e malhas de cálculo estruturadas de  $4,51 \times 10^5$  a  $3,643 \times 10^6$  nós.

Os resultados obtidos com a malha refinada mostraram boa concordância tanto para os campos de velocidade e fração de mistura, quanto para a concentração das espécies majoritárias, com exceção do óxido nítrico (NO). No entanto, os resultados para a malha menos refinada apresentaram grande discrepância, conforme pode ser visto na figura 2.18. Segundo os autores, é importante que a resolução da malha seja suficiente para capturar mais de 75% da energia cinética turbulenta. Para obter tal resolução as simulações requerem alto custo computacional, durando até 80 dias para simular 35 ms

de escoamento, nota-se que o passo de tempo e a configuração do cluster utilizado não foram informados. O grande desvio na concentração de NO pode ser devido às inconsistências do mecanismo de cinética, enquanto os desvios na concentração das demais espécies majoritárias podem ser explicados por desvios nos campos de velocidade. Uma avaliação complementar dos campos de fração de mistura apresentados por Kempf *et al.* (2006) mostra que nem todo o combustível foi queimado na saída do domínio, indicando que um domínio mais longo deveria ser adotado, o que aumentaria o tempo de CPU necessário.

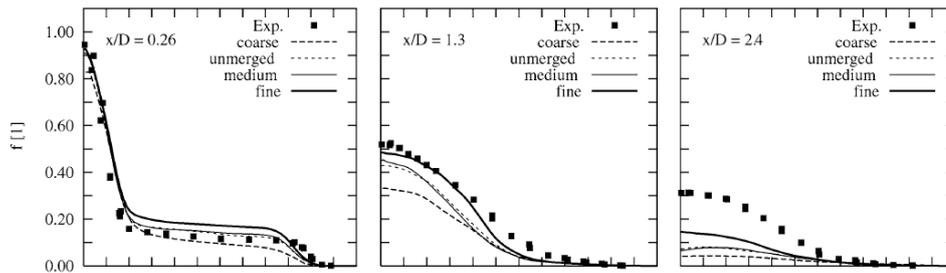


Figura 2.18: Comparação de perfis de fração de mistura para diferentes malhas (*coarse* ( $0,45 \cdot 10^6$  nós), *medium* ( $1,8 \cdot 10^6$ ), *unmerged* (igual *medium*, porém sem fusão de elementos no centro) e *fine* ( $3,6 \cdot 10^6$ ))(Kempf *et al.*, 2006).

Apesar de alguns autores terem conseguido bons resultados com LES ou até mesmo RANS, ainda existem dúvidas quanto à aplicabilidade dos modelos empregados devido às incertezas relacionadas às constantes empíricas e à falta de resultados experimentais de escoamentos com reação química (Boersma, 1999). Tal dificuldade é agravada em escoamentos compressíveis, pois a média de Favre dificulta a comparação numérico-experimental. Para sanar tais dúvidas Boersma (1999) simulou, usando DNS, um jato de combustível queimando ancorado em um corpo rombudo com o auxílio de uma chama piloto conforme a figura(2.19).

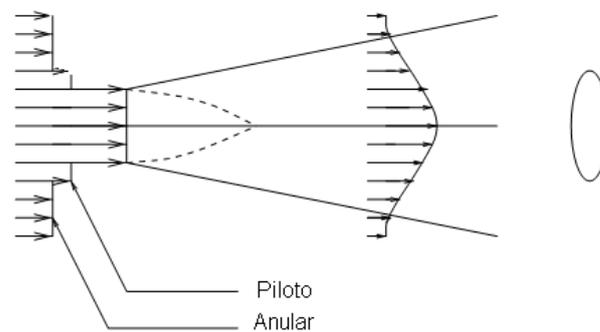


Figura 2.19: Jato com chama piloto simulado por Boersma (adaptado de (Boersma, 1999)).

Para a combustão o autor adotou uma reação binária simples ( $F + O \rightarrow 2P$ ), onde, a taxa de reação depende unicamente da temperatura segundo

a lei de Arrhenius. Este modelo é muito simplificado, mas foi adotado para reduzir o custo computacional. As simulações foram realizadas para um número de Reynolds 4000, calculado com base no diâmetro do orifício do jato. Não são apresentados o passo de tempo adotado, a duração da simulação e nem a configuração do *cluster* utilizado.

Os resultados de Boersma mostraram que a liberação de calor suprimiu a turbulência, atrasando a transição laminar-turbulento. A figura 2.20 mostra que existem diferenças entre as concentrações de combustível e reagente utilizando ou não a média de Favre. Devido a essa diferença, sugere-se que não se utilize a média de Favre ou que as diferenças entre as médias devem ser levados em consideração.

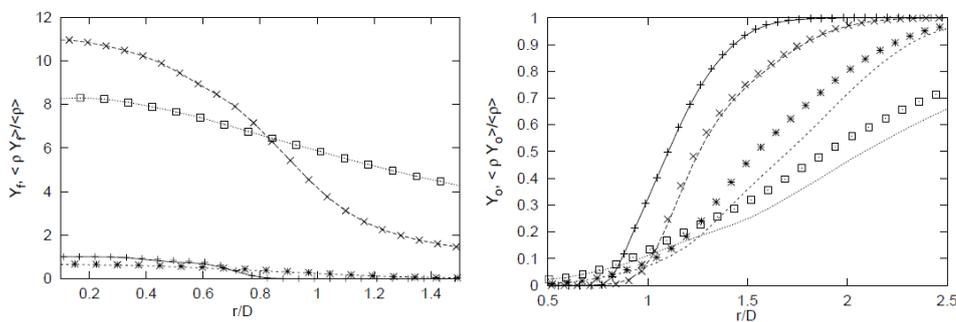


Figura 2.20: Comparação da concentração de combustível (esquerda) e reagentes (direita) obtidas com média de Favre e de Reynolds em quatro diferentes localizações (Favre indicado por símbolos).  $z = 5D$ : +, -;  $z = 15D$ : x, - -;  $z = 25D$ : \*, - -;  $z = 35D$ :  $\square$ , ... (Boersma, 1999).

Um sumário dos principais parâmetros adotados nos trabalhos numéricos avaliados, bem como do tempo necessário para rodar cada caso é apresentado na tabela 2.2. Os valores marcados com “-” nesta tabela não foram fornecidos pelos autores e os ângulos  $\theta$  marcados com \* indicam que a simulação é bidimensional.

Alguns autores realizaram simulações LES, porém as mesmas demandam grande tempo computacional e grande atenção na seleção de modelos e na implementação da malha computacional. Como o presente trabalho não tem como único foco a implementação de modelos de turbulência e de combustão avançados, e devido aos recursos computacionais limitados, optou-se por adotar modelos de média de RANS.

A adoção de modelos de transporte PDF também foi descartada, pois os mesmos apresentam grandes desafios no campo de modelagem que fogem ao escopo do presente trabalho.

Tabela 2.2: Sumário das simulações revisadas.

<b>Autor</b>	<b>Tipo</b>	<b>N° de nós(10<sup>3</sup>)</b>	<b>Domínio (X;Y;<math>\theta</math>)</b>	<b>Injetor (i)</b>	<b>Tempo (h)</b>
Caetano <i>et al.</i> , 2009	RANS	23	1,6D;7,5D;15°	3D	2
Alvarez, 2006	RANS	27	3D;7,2D;15°	0	-
Huapaya, 2008	RANS	231	4D;11D;15°	0	-
Huapaya, 2008	RANS	180	3,3D;18;3D,15°	1D	-
Lemay, 2010	RANS	361	1,5D;8D;15°	2D	-
Lemay, 2010	RANS	1586	1,5D;8D;360°	2D	-
Muradoglu <i>et al.</i> , 2003	RANS	23	-	-	40
Liu <i>et al.</i> , 2005	RANS	6,9	3D;7,2D;*	0	400
Merci <i>et al.</i> , 2006	RANS	9	3D;7,2D;*	0,2D	-
Odedra e Malalasekera, 2007	RANS	44	3D;6D;*	2D	-
Raman e Pitsch, 2005	LES	2590	2,4D;7,4D;360°	2,7d	-
Kempf <i>et al.</i> , 2006	LES	3643	4,4D;5D;360°	0	≈ 1920
Boersma, 1999	DNS	3440	2D;40D;360°	0	-

## 2.3

### Considerações Finais

A revisão bibliográfica permitiu identificar os principais grupos de pesquisa que realizam experimentos com chama estabilizada a jusante de corpos rombudos. O laboratório referência para este tipo de ensaio é o laboratório de pesquisas em termo fluidos do departamento de engenharias aeroespacial, mecânica e mecatrônica (AMME) da Universidade de Sydney, pois, grande parte dos resultados numéricos avaliados utilizaram resultados obtidos por este laboratório para a validação de suas simulações. A configuração experimental adotada neste laboratório e muito similar à do experimento realizado no presente trabalho, com exceção do canal anular quadrado adotado no AMME. Este laboratório também é referência em termos de aparatos de medição laser, com destaque para os trabalhos de Dally *et al.* (1998) e Masri *et al.* (1998) que realizar medições simultâneas Raman/Rayleigh/LIF pontuais em chamas de  $CH_3OH$ ,  $H_2/CO$ ,  $H_2/CH_4$  e  $H_2/GNC$  em ar que se tornaram referências para validação de diversos trabalhos numéricos.

Constatou-se uma tendência à adoção de modelos de transporte escalar da função densidade de probabilidade para descrever a interação entre a turbulência e a combustão (Muradoglu *et al.*, 2003, Liu *et al.*, 2005, Merci *et al.*, 2006). No entanto, os resultados obtidos pelos autores mostram que o emprego de tais modelos não é trivial e que os modelos necessitam de

ajustes para melhor as predições de extinção de chama e de concentração de espécies químicas. Alguns autores (Raman e Pitsch, 2005, Kempf *et al.*, 2006) adotaram técnicas LES em seus trabalhos, mas, em parte devido à limitações de capacidade computacional, não obtiveram resultados significativamente melhores que os obtidos com técnicas RANS. O uso de DNS ainda é muito incipiente, com grandes limitações do número de Reynolds e do modelo de combustão empregado (Boersma, 1999).

### 3

## Metodologia Experimental

Os experimentos foram realizados no laboratório de combustão e turbulência do departamento de engenharia mecânica da PUC-Rio. Este laboratório foi criado em 2006 com o objetivo de suprir a carência brasileira de instalações experimentais capazes de obter resultados para a validação de modelos de combustão. Ao longo dos anos, suas instalações vem sendo alteradas para aumentar a gama de experimentos realizados e melhorar a qualidade dos resultados. O histórico da montagem inicial e das diversas alterações do laboratório pode ser encontrado nas dissertações de mestrado de Alvarez Aquino (2006), Huapaya (2008) e Egúsquiza (2012), além da tese de doutorado de Caetano (2012).

No presente capítulo será apresentada a configuração atual do experimento, com ênfase nas alterações realizadas durante a elaboração da presente dissertação. Também serão abordadas as técnicas empregadas para as medições de velocidade e concentração de espécies químicas, bem como as incertezas associadas a essas medições.

### 3.1

#### Montagem Experimental

Neste laboratório foi instalado um aparato focado no estudo de chamas não pré-misturadas ou parcialmente pré-misturadas de combustíveis gasosos (inicialmente gás natural e hidrogênio) em ar tanto para regimes laminares como turbulentos (Alvarez Aquino, 2006). Para tanto foi instalado um combustor do tipo corpo rombudo (*bluff-body burner*) onde o ar é forçado por um conduto anular tendo em seu centro um cilindro que se encerra de forma abrupta (corpo rombudo), formando assim, uma região de recirculação. Nesta região, também chamada de esteira turbulenta, podem estar presentes gases queimados, com temperatura superior à dos gases frescos, promovendo a ancoragem da chama. O combustível é injetado em um orifício no centro deste corpo rombudo, conforme pode ser visto em corte na figura 3.1. Tal configuração é largamente adotada na comunidade científica (vide cap.2.1) por gerar uma chama axissimétrica estável para diversas vazões de combustível e ar, permitindo obter uma gama de regimes de combustão representativos de escoamentos de interesse industrial. Além disso, sua simetria e condições de contorno simples são particularmente interessantes para o desenvolvimento e validação de modelos computacionais de interação entre a turbulência e a cinética química.

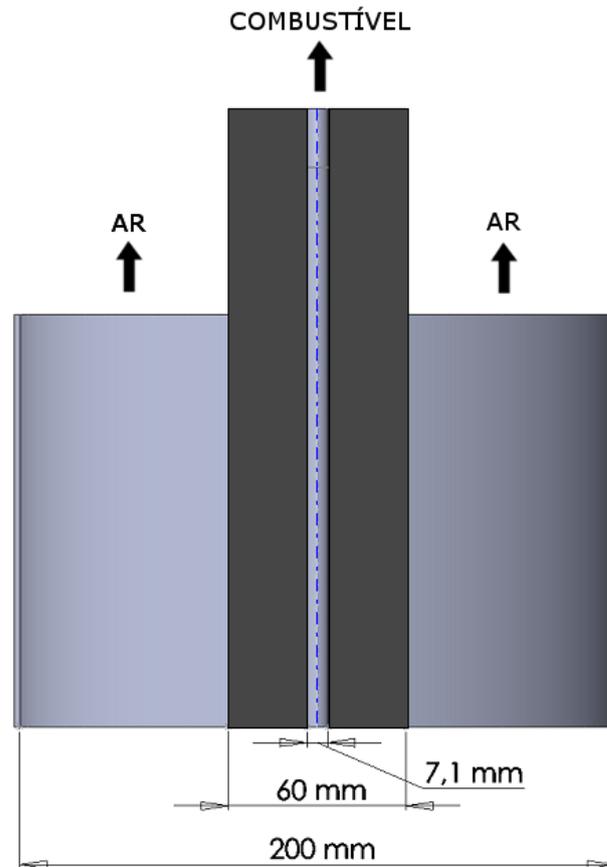


Figura 3.1: Vista em corte do queimador da PUC-Rio

Este queimador apresenta total acesso óptico à região de chama, possibilitando a utilização de técnicas de medição a laser, como pode ser visto na figura 3.2. Os geradores de laser e as câmeras são controlados por meio de um computador, que também é o responsável por coletar os dados provenientes do experimento. Já a operação da bancada é centralizada através de um painel de controle (figura 3.3), onde estão instalados os controladores de vazão, temperatura e pressão dos gases combustíveis, o inversor de frequência do soprador de admissão de ar, o controle do sistema de exaustão e o sistema de intertravamento que bloqueia a entrada de combustível caso o exaustor ou o soprador não estejam operando.

O controle de vazão de combustível é feito por 2 rotâmetros Omel modelos 4T7-0803-X12 e 4T7-0903-X12, calibrados para obter uma vazão máxima de 2,5 e 3,5  $Nm^3/h$  de gás natural ou 7,2 e 10,0  $Nm^3/h$  de hidrogênio respectivamente. Estes foram instalados em paralelo, suportando vazões capazes de gerar chamas com potência de 60kW utilizando gás natural ou 48kW com hidrogênio. No entanto, os dispersores de partículas traçadoras do escoamento foram projetados para operar com a vazão de apenas 1 rotâmetro, sendo que



Figura 3.2: Foto do laboratório de combustão e turbulência da PUC-Rio.

o utilizado nestes experimentos foi o 4T7-0803-X12, limitando a potência em 20kW. Tais rotâmetros apresentam erro de 2% e repetibilidade de 0,5% do fundo de escala, segundo o fabricante. O ar do anular é fornecido por um ventilador centrífugo (Deltra, VC-400) com vazão máxima nominal de  $32,8 \text{ Nm}^3/\text{min}$ .

As garrafas contendo os gases combustíveis ficam do lado de fora do laboratório em um ambiente ventilado e com luzes a prova de explosão, para garantir a segurança operacional. O motor do exaustor, bem como o soprador de ar também ficam posicionados no exterior do laboratório como forma de reduzir o nível de ruído no interior do mesmo.

O sistema de medições da chama turbulenta é constituído por dois equipamentos para geração de laser de estado sólido (Nd:YAG), sendo que um dos feixes pode ser direcionado para um sistema de corante que gera um feixe de laser com comprimento de onda sintonizável. O sistema de captura de imagens é constituído por três câmeras CCD (*charge-coupled device*), sendo que uma está equipada com um intensificador de imagem. Este sistema tem por finalidade a medição simultânea de uma grandeza escalar reativa e de dois componentes de velocidade em um plano. Os princípios de funcionamento destes equipamentos serão detalhados nas seções 3.2, 3.3 e 3.4.

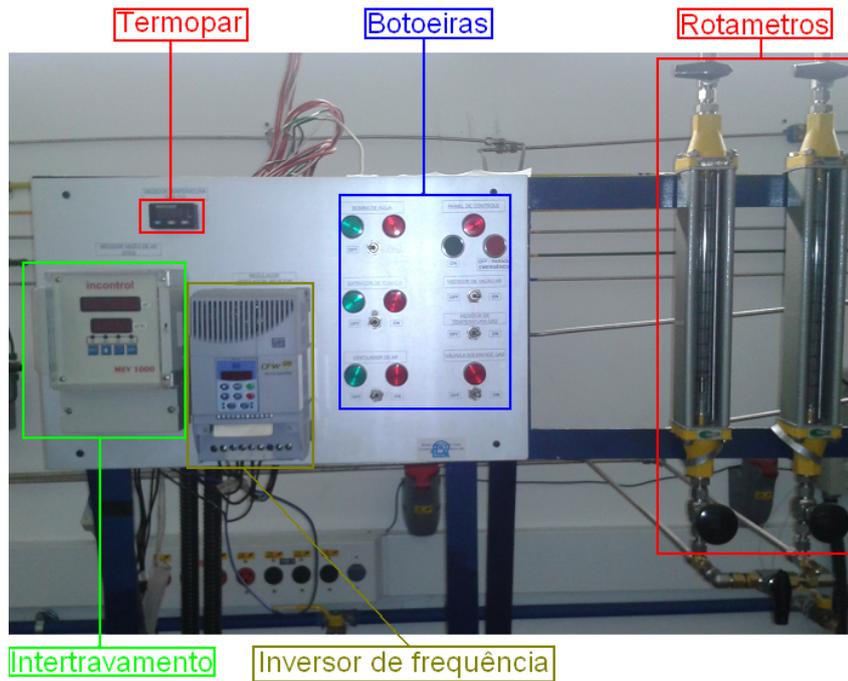


Figura 3.3: Painel de controle do experimento.

### 3.2

#### Diagnósticos a Laser

No presente trabalho serão realizadas medições através de técnicas baseadas na utilização de laser, que têm a capacidade de medir o escoamento de forma não intrusiva. Esta característica é particularmente importante neste caso, uma vez que o escoamento estudado é caracterizado pela ancoragem da chama na região de recirculação de um corpo rombudo, e a introdução de uma sonda geraria uma nova zona de recirculação, alterando sensivelmente o comportamento da chama. Além disso, os sensores tradicionais podem ter as dimensões características da ordem de grandeza do diâmetro do jato de combustível ( $7,1\text{ mm}$ ), sendo incapazes de obter resolução espacial suficiente para caracterizar a chama estudada.

Outras vantagens das técnicas de medição com a utilização de laser são a sua capacidade de propiciar alta resolução espacial (ordem de  $100\ \mu\text{m}$ ), temporal ( $10^{-8}\text{ s}$ ) e sensibilidade (concentrações na faixa de ppm e até sub-ppm) (Eckbreth, 1996).

Serão estudados dois aspectos principais que caracterizam a combustão, campo de concentração do radical OH, que é uma espécie química indicativa do posicionamento da frente de chama, e campo de velocidade do escoamento. A seguir serão abordados os métodos empregados para cada medida e a importância de cada um destes para o estudo da combustão. Também será realizada uma análise da incerteza das medições associadas às técnicas empregadas (se-

ção 3.5).

### 3.3

#### Concentração de Espécies Químicas

A determinação da concentração de espécies químicas é de vital importância no estudo de sistemas reativos uma vez que auxilia a descrição de diversos fenômenos, como a localização da reação, a concentração (fração molar) de reagentes e produtos, os mecanismos envolvidos na formação dos produtos de interesse e a velocidade de reação.

No caso do presente trabalho será medida a concentração do radical Hidroxila (OH), o qual possui papel relevante na quebra da molécula de hidrogênio ( $H_2$ ) e é uma das espécies mantenedoras da combustão, sendo um bom indicador da localização da frente de chama (Wolfrum, 1998). Outra vantagem da utilização do OH como indicador da frente de chama é o seu baixo tempo de vida de fluorescência, 3 ns, o que permite visualizar extinções localizadas de chama (Kohse-Hoinghaus e Jeffries, 2002).

Para realizar estas medições será utilizada a ferramenta PLIF (*Planar Laser Induced Fluorescence*, ou fluorescência induzida por um plano laser), que é a aplicação da técnica LIF (*Laser Induced Fluorescence*) em um plano ao invés de um ponto. Esta técnica, além de permitir a medição da concentração de uma espécie química, também pode ser utilizada para a medição do estado quântico de pequenas moléculas, tipicamente as diatômicas, obtendo assim sua temperatura e densidade. No presente capítulo, será dada ênfase à medição da concentração de espécies químicas, uma vez que a medição de temperatura e densidade não fazem parte do escopo deste trabalho.

#### 3.3.1

##### Embasamento Teórico e Metodologia

Esta ferramenta utiliza-se do princípio da fotoluminescência, que é a propriedade de uma molécula emitir radiação eletromagnética ao retornar ao seu estado fundamental, após ser excitada pela absorção de fótons, elétrons ou moléculas (Kohse-Hoinghaus e Jeffries, 2002). Lasers são, de longe, a maneira mais conveniente de excitar uma molécula por serem capazes de prover resolução espacial, temporal e seletividade de espectro de excitação (Eckbreth, 1996).

A maioria dos radicais e poluentes secundários são excitáveis por radiação ultravioleta (UV) ou visível com comprimento de onda na faixa de 200 a 600 nm. Em um experimento típico, um plano laser sintonizado, isto é, de comprimento de onda definido, é projetado na região a ser avaliada. O laser excita as moléculas de interesse, que por sua vez emitem luz em um

comprimento de onda maior, como mostrado na figura 3.4. Paralelamente ao plano laser é posicionada uma câmera com um filtro que deixa passar apenas luz com comprimento de onda similar ao emitido pelas moléculas de interesse, conforme pode-se ver na figura 3.5.

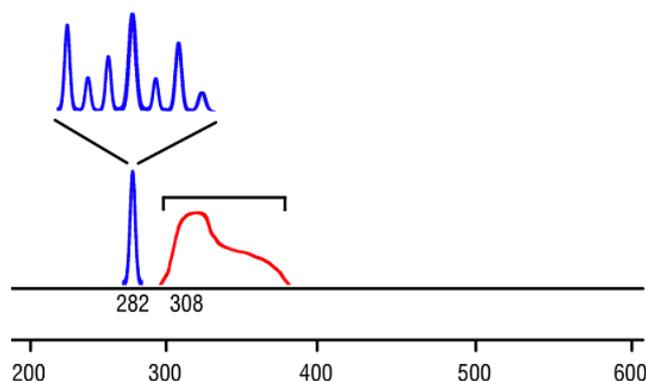


Figura 3.4: Intensidade em função do comprimentos de onda de absorção (curva da esquerda) e emissão (curva da direita) de luz por uma molécula de OH ((LaVision, 2008)).

Esta técnica é particularmente interessante devido à grande intensidade da absorção de energia de processos ressonantes, quanto comparado com processos não ressonantes como o Rayleigh e o Raman (LaVision, 2009a). Devido a esta característica o LIF, ou o PLIF, tem a capacidade de detectar radicais com concentrações na ordem de ppm, ou menores. Além disso, esta técnica pode ser utilizada para a determinação da concentração de mais de um reagente simultaneamente, bastando que se sobreponham dois, ou mais, planos laser com comprimentos de onda diferentes e que a imagem seja captada por câmeras providas de filtros que deixem passar luz com comprimentos de onda adequados.

Moléculas estáveis ( $CO_2$ ,  $CO$ ,  $H_2O$ ) e fuligem emitem grande quantidade de radiação infravermelha (IR) ao serem aquecidas, dificultando o emprego desta técnica para a avaliação de concentração de espécies que, ao serem excitadas, emitem radiação neste comprimento de onda. Tal dificuldade advém do fato de ser impossível distinguir a radiação emitida por estas fontes e pelo radical de interesse. A radiação emitida pelas moléculas estáveis pode, ainda, reduzir a resolução espacial e temporal da técnica por excitar de forma contínua radicais fora do plano laser, induzindo o processo de fluorescência fora da região de interesse.

Outro inconveniente desta técnica é o fato de que nem todas as moléculas possuem a propriedade de fotoluminescência bem definidas. Esta limitação, em alguns casos, pode ser contornada utilizando-se traçadores, que são substâncias que podem seguir a mesma trajetória das moléculas que se deseja localizar,

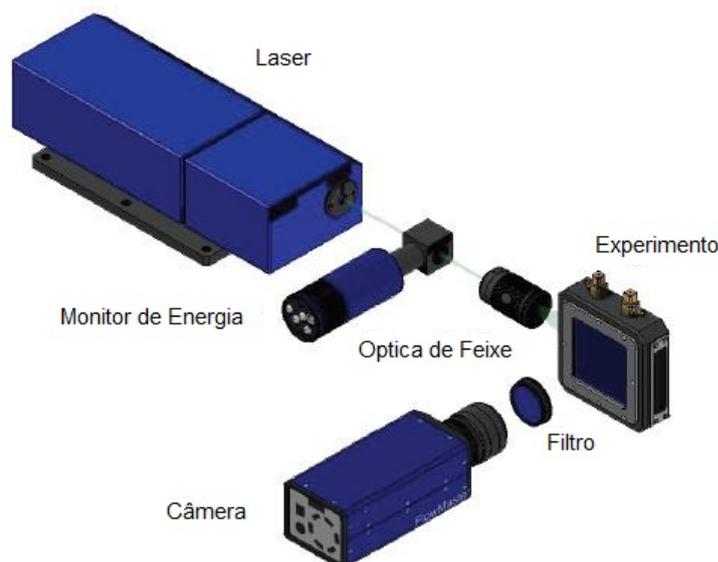


Figura 3.5: Configuração básica de um experimento utilizando a técnica PLIF (adaptado de (LaVision, 2009b)).

sem alterar o padrão do escoamento ou as reações químicas de interesse. Como exemplo pode-se citar a adição de acetona ao etanol para a determinação de concentração ou dispersão de gotículas do mesmo antes da combustão.

Alguns critérios básicos devem ser respeitados para se obter medições quantitativas da fluorescência de uma dada molécula (Eckbreth, 1996):

1. A molécula deve ter um espectro de emissões conhecido. Certas moléculas podem sofrer dissociação ou serem ionizadas ao serem excitadas, o que é problemático. Em outros casos a emissão é muito fraca ou difícil de ser detectada.
2. O comprimento de onda absorvido pela molécula deve ser acessível a uma fonte de laser sintonizável.
3. A razão de decaimento radiativo do estado excitado deve ser conhecida, uma vez que a intensidade da fluorescência é proporcional à essa razão.
4. Deve-se levar em conta as perdas do estado de excitação devido à desativação colisional, fotoionização e/ou pré-dissociação. A correção do aumento no decaimento radiativo devido à colisões, chamado de desativação colisional, envolve o conhecimento da pressão parcial de todas as espécies presentes e da razão de desativação do estado excitado da espécie de interesse por todas as presentes. Adicionalmente, é necessário que a dependência da taxa de decaimento com a temperatura seja conhecida. A fotoionização altera a configuração eletrônica da molécula, alterando assim o seu espectro de emissões. Já a taxa de pré-dissociação

depende da energia específica do estado de excitação e é uma propriedade intrínseca da molécula.

5. Outro aspecto a ser considerado é a alteração das taxas de reação devido à presença do laser, uma vez que o estado excitado do radical pode ter uma maior razão de reação que o estado original. Além disso, o radical em questão pode ter um aumento de concentração devido à fotodissociação de outros radicais. A importância de tais efeitos diminui na medida que se reduz a duração do pulso laser, sendo pouco significativo para pulsos da ordem de nanosegundos, ou menores.

A intensidade do sinal de fluorescência pode ser calculada pela expressão:

$$S_F = c(\Omega/4\pi) \cdot \alpha_i \cdot n(T, P) \cdot f_{v'', j''}(T) \cdot E_l \cdot \{A/(A + Q(n_i, T) + P)\}, \quad (3.1)$$

onde,  $S_F$  é o sinal da fluorescência,  $c$  é uma constante,  $\Omega$  é o ângulo sólido de captura da imagem,  $\alpha_i$  é a fração molar das espécies  $n_i$ ,  $n(T, P) = P/k_B T$  é a densidade total à pressão  $P$  e temperatura  $T$ ,  $k_B$  é a constante de Boltzmann,  $f_{v'', j''}(T)$  é a fração de Boltzmann para o estado vibracional-rotacional de interesse com os números quânticos  $v''$  e  $j''$ ,  $E_l$  é a energia do pulso laser por unidade de área e  $\{A/(A + Q(n_i, T) + P)\}$  é o fator de Stern-Volmer que indica a taxa da fluorescência produzida. Nesta expressão,  $A$  é o coeficiente de Einstein para emissões espontâneas,  $Q$  é a taxa de saturação colisional e  $P$  é a taxa de pré-dissociação.

No presente trabalho, as razões  $A$ ,  $Q$  e  $P$  não serão avaliadas. Sendo assim, os resultados terão apenas aspecto qualitativo, servindo como indicadores da localização e intensidade de reações na frente de chama, bem como do regime de combustão.

Os parâmetros do laser, da câmara e do intensificador de imagem, bem como a sincronização da abertura da câmara com os pulsos laser e entre os equipamentos de geração e sintonização do laser foram controlados com auxílio do software DaVis da empresa LaVision. Não será detalhada a metodologia de utilização do software, pois a mesma encontra-se descrita nos manuais fornecidos pelo fabricante (LaVision, 2008, LaVision, 2009a, LaVision, 2009b).

### 3.3.2

#### Geração do Plano Laser

No presente trabalho, o plano laser para iluminação da área de interesse terá dimensões 120 mm x 90 mm com espessura da ordem de 0,5 mm e comprimento de onda de aproximadamente 285,56 nm, que é o comprimento

de onda de excitação do radical OH. Para se aumentar a resolução temporal e espacial, é interessante que o pulso tenha duração da ordem de nanosegundos e energia da ordem de dezenas de mili Joules ou mais. Para se obter um plano laser com essas características foi adotado um sistema composto por um laser de bombeio, um laser de corante e um conjunto óptico conforme o ilustrado na figura 3.6.

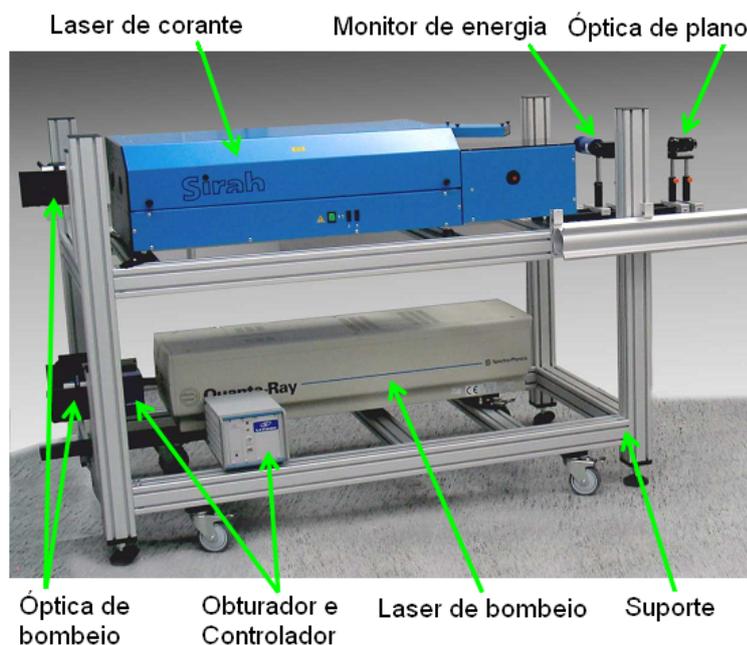


Figura 3.6: Sistema de Geração de Plano Laser Sintonizado (adaptado de (LaVision, 2008)).

O laser de bombeio utilizado é um laser do estado sólido do fabricante Quantel, modelo Brilliant b. Ele é constituído por uma barra de Itrio, Alumínio e Garnet dopada com Neodímio (Nd:YAG), a qual é excitada por uma lâmpada pulsante gerando um feixe laser com comprimento de onda fundamental de 1064 nm e harmônicos com 532, 355, 266 e 213 nm. O harmônico de interesse é o terceiro, de 355 nm, que possui duração de pulso de 4 ns, energia da ordem de 260 mJ, com potência de 6 MW por pulso à uma cadência de 10 Hz. A divergência do feixe de luz deste laser é de 0,5 mrad. No presente trabalho a frequência foi ajustada para 3,3 Hz devido a limitações do sistema de aquisição e gerenciamento de dados.

No entanto, o comprimento de onda obtido pelo laser Nd:YAG não é adequado para excitar as moléculas de OH, sendo necessário sintonizar o feixe laser. Para tanto foi adotado um laser de corante que utiliza uma solução de moléculas orgânicas, tipicamente hidrocarbonetos com ligações duplas e seus derivados, para sintonizar o comprimento de onda do laser. Essa sintonia é

possível, pois tais moléculas complexas apresentam um grande número de níveis de energia gerados por colisões e interações com as moléculas vizinhas, que se unem em um estado de energia distribuído de forma contínua. O comprimento de onda de emissão pode ser continuamente ajustado entre 200 e 1500 nm, dependendo da seleção correta do corante. Na figura 3.7 são apresentadas curvas de sintonia que mostram os comprimentos de ondas possíveis de serem obtidos com diversos corantes bombeados por harmônicos de laser Nd:YAG e qual a energia relativa de emissão nestes comprimentos de onda.

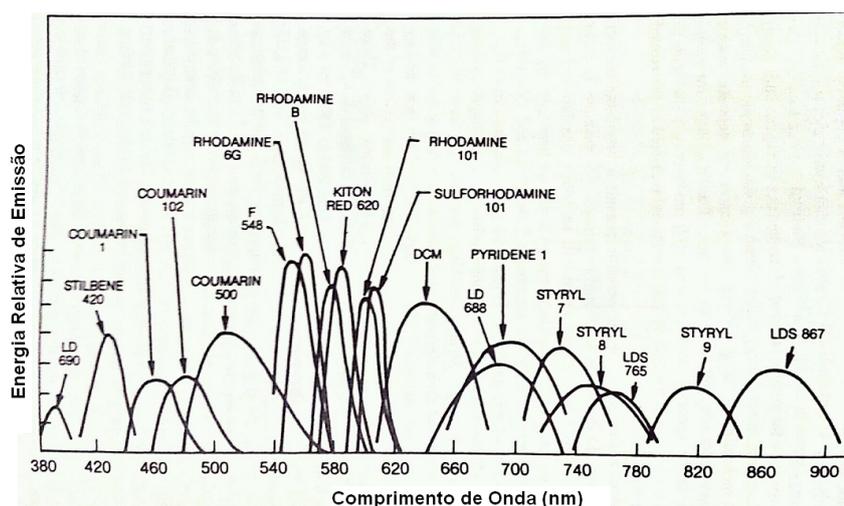


Figura 3.7: Curva de sintonia de lasers de corante. Comprimentos de onda abaixo de 540 nm são obtidas com bombeio pelo terceiro harmônico de lasers Nd:YAG, enquanto os demais com o segundo harmônico (Eckbreth, 1996).

O laser de corante utilizado é o modelo CSTR-G-3000 pela Sirah, que utiliza a recirculação do corante para o controle da temperatura. O corante utilizado foi o Coumarino-153 (registro CAS 53518-18-6), dissolvido em etanol absoluto, a uma concentração de 1,6 g/l. Devido às perdas no complexo sistema óptico e no processo de absorção e emissão pelo corante a eficiência deste laser é da ordem de 15%, ou seja, ao receber 260 mJ do laser de bombeio, o laser de corante irá emitir pulsos com 40 mJ.

A intensidade da luz laser gerada em cada pulso varia, sendo necessária a adoção de um medidor de intensidade capaz de medir este valor para o cálculo da luminescência do radical de interesse em cada imagem. Nesta configuração adotou-se o monitor de energia LaVision E-monitor que desvia 4% da luz de cada pulso e transmite a energia desta parcela para o software de pós-processamento, que calcula a energia total com base em um valor de referência.

O feixe de luz laser gerado pelo laser de corante deve, então, ser transformado em um plano, sendo que lentes cilíndricas são o componente básico para a geração de um plano. No entanto, para se obter um plano com baixa espes-

sura a partir de lasers com diâmetros e divergência relativamente elevadas e elevadas potências, como é o caso de lasers de corante empregado, é necessária a adoção de um conjunto de lentes diferentes (Raffel *et al.*, 2007). Para lasers de alta potência a primeira lente do conjunto deve ser divergente, a fim de evitar pontos focais que podem ionizar o ar ou partículas de poeira. A ionização destas partículas gera emissão de radiação acústica, e pode alterar as propriedades do feixe. Para a configuração do laboratório optou-se por utilizar uma lente cilíndrica combinada com duas telescópicas devido a sua versatilidade, conforme ilustrado na figura 3.8.

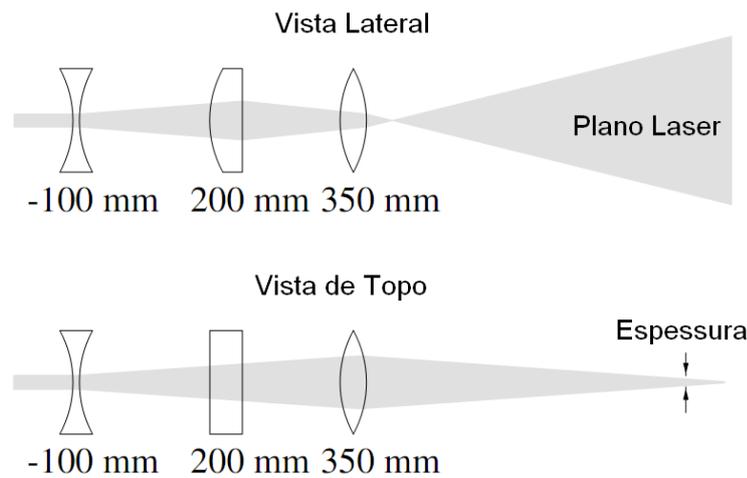


Figura 3.8: Configuração do sistema óptico de plano adotado para o sistema PLIF (adaptado de (Raffel *et al.*, 2007)).

Neste sistema a alteração da altura do plano laser pode ser feita pela substituição da lente cilíndrica, enquanto a espessura pode ser ajustada invertendo-se a posição das lentes esféricas. O ajuste de foco é feito pela alteração da distância entre as lentes. As lentes utilizadas são feitas de sílica fundida grau UV, que é o material indicado para resistir à potência do laser adotado, não possuem revestimento e foram fabricados pela empresa Edmund Optics.

### 3.3.3

#### Captura de Imagens

A luz emitida pela fluorescência induzida à laser tem baixa intensidade e chega à câmara de captura conjuntamente com a luz proveniente da combustão e com a luz do ambiente. Para se conseguir uma medida da intensidade da luz emitida pelo radical de interesse é necessário filtrar e intensificar o sinal. Para tanto, foi adotado um filtro passa banda centrado em  $305 \pm 5$  nm, que é o comprimento de onda da radiação emitida pelo radical OH. Este filtro foi acoplado a uma lente Nikon Rayfact 105mm F4.5 UV responsável por focalizar o plano laser.

A luz passa então por um intensificador de imagem de alta velocidade (*High Speed Intensifier Relais Optic* - HSIRO) fornecido pela LaVision. Este equipamento é constituído por um foto-cátodo que converte a luz em corrente elétrica que por sua vez é amplificada pela diferença de potencial no interior do cátodo. Este sinal então segue para uma superfície de fósforo onde é convertido em luz no espectro verde que segue para uma câmara CCD (*Charged Coupled Device*), que produz uma imagem digital em tons de cinza. A intensidade da luz torna-se, assim, visível por uma escala de cinza que pode ser convertida diretamente em uma unidade de intensidade denominada “counts” pelo fabricante. Vale ressaltar que um campo de “counts” é um resultado qualitativo da concentração do radical de interesse, e que para se obter o valor real de concentração é necessário converter esse valor mediante o uso de uma curva de calibração. Esta curva pode ser obtida a partir de um experimento de referência, como por exemplo, uma chama plana pré-misturada.

A câmara CCD empregada no laboratório é do modelo Imager Intense da LaVision e possui uma matriz de 1376 por 1040 *pixels*, taxa de captura máxima de 10 Hz, 500 ns de intervalo entre aquisições e uma eficiência quântica de 70% na faixa de 532 nm. O conjunto de filtro, intensificação e captura de imagens, bem como o funcionamento interno do intensificador encontram-se representados na figura 3.9.

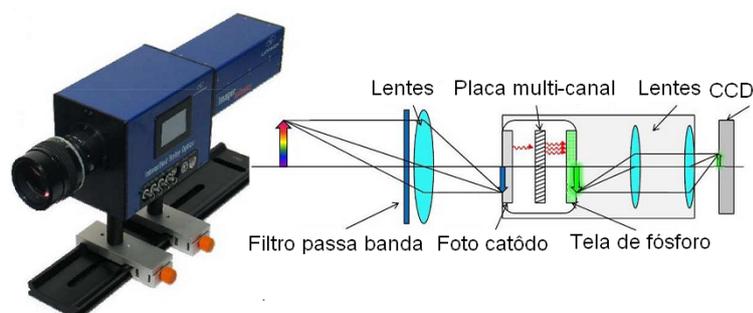


Figura 3.9: Sistema de Captura da Imagem (adaptado de (LaVision, 2008)).

### 3.4

#### Campo de Velocidade

A zona de recirculação formada a jusante do corpo rombudo influencia fortemente a topologia do jato, a posição onde a chama é ancorada e a taxa de mistura dos reagentes e produtos. Para avaliar os campos de velocidade na região de recirculação, será adotada a técnica conhecida como velocimetria pela imagem de partículas (*Particle Image Velocimetry* - PIV) que é capaz de medir o campo de velocidades a partir de duas imagens consecutivas de um plano laser que cruza o escoamento. Para tanto, devem ser adicionadas partículas ao

escoamento, que espalharão a luz laser por efeito Mie, permitindo que a posição das mesmas seja detectada nas duas imagens. O deslocamento de partículas entre essas duas imagens permite, então, calcular a velocidade (figura 3.10).

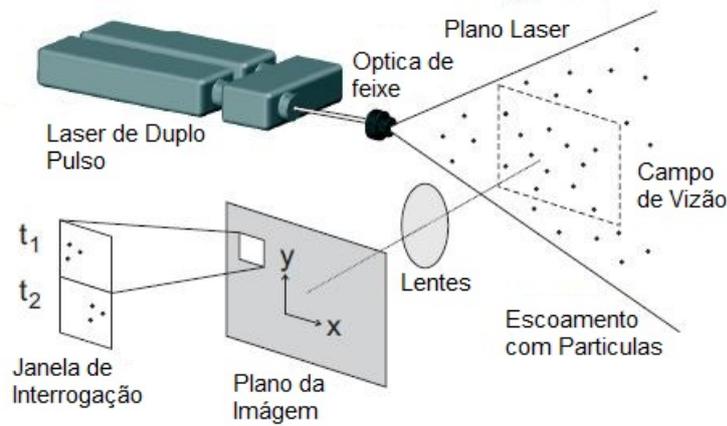


Figura 3.10: Esquema do funcionamento do sistema PIV (adaptado de (LaVision, 2007a)).

### 3.4.1

#### Embasamento Teórico e Metodologia

A PIV deriva diretamente das primeiras observações de escoamentos feitas com a adição de objetos flutuantes em cursos d'água como uma forma de obter estimativas de velocidade e observar as estruturas que se formam no escoamento. Tal metodologia, acompanhada de técnicas de pintura, levou artistas como Leonardo da Vinci a gerar desenhos detalhados de estruturas presentes em escoamentos. Uma grande evolução ocorreu com a adoção de metodologias de planejamento e visualização mais avançadas, como as utilizadas por Ludwig Prandtl, que em 1902 montou um túnel onde água circulava impulsionada por uma roda d'água manual em um circuito fechado. Neste canal era possível visualizar o escoamento ao redor de corpos, como cilindros, prismas e perfis de asa, através de partículas de mica flutuando na água, como o apresentado na figura 3.11. Com o auxílio desta montagem experimental Prandtl contribuiu para o entendimento dos escoamentos transientes. No entanto, as informações obtidas nesta época eram apenas qualitativas. Com os avanços no campo da ótica, lasers, eletrônica e computação obtidas nos últimos 20 anos foi possível realizar medidas quantitativas de velocidade em duas ou três dimensões (Raffel *et al.*, 2007).

O primeiro passo para a realização de medições é a adição, de forma controlada, de partículas que sejam pequenas suficiente para seguir o escoamento e grandes suficiente para conseguir espalhar luz para ser captada por uma câ-

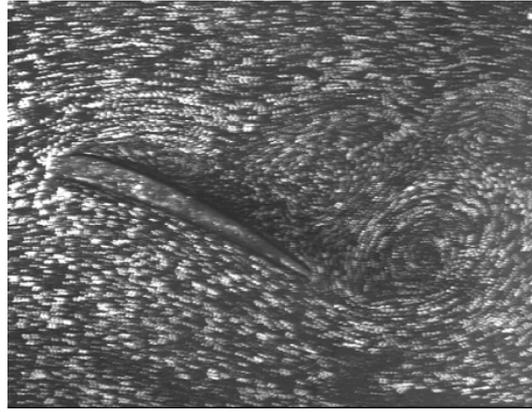


Figura 3.11: Imagem da separação do escoamento no bordo de fuga de uma asa obtida em uma replica do túnel de água de Ludwig Prandtl (Raffel *et al.*, 2007).

mera fotográfica. Estas partículas devem ser o mais esféricas possível, para se garantir que a luz seja emitida com a mesma intensidade, independente da rotação das partículas. Em escoamentos de gases pode-se utilizar fumaça teatral, diferentes tipos de óleos atomizados, micro esferas de vidro, dióxido de titânio ( $TiO_2$ ) e óxido de alumínio ( $Al_2O_3$ ), entre outros (Silva Freire *et al.*, 2006). No caso de escoamentos reativos é importante garantir, também, que as partículas selecionadas não sejam consumidas ou afetem a reação química. No presente trabalho optou-se pela utilização do dióxido de titânio com diâmetro médio de  $1\mu m$  que, apesar de não ser perfeitamente esférico, atende aos requisitos de acompanhamento do escoamento, refletividade e não reatividades requeridos. O erro decorrente da não esfericidade das partículas será avaliado na seção 3.5.3. O equipamento projetado para a dispersão de tais partículas no escoamento será descrito na seção 3.4.2.

Tais partículas devem ser iluminadas por um plano de luz ao menos duas vezes consecutivas em um pequeno intervalo de tempo. Uma vez que as partículas podem se deslocar com velocidades muito elevadas, o pulso de luz deve ter uma pequena duração (6-10 ns) para se evitar que as partículas deixem rastros na imagem. Além disso, o plano deve ser fino o suficiente para garantir que apenas as partículas no plano de interesse sejam iluminadas e deve ter intensidade suficiente para garantir que a luz espalhada pelas partículas possa ser captada. Estas características levam à necessidade de se utilizar uma fonte de luz laser, sendo que o sistema mais utilizado é o Nd:YAG (LaVision, 2007a).

As imagens podem ser capturadas utilizando-se filmes foto sensíveis que, após revelados, devem ser escaneados para um computador que realizará o pós processamento, ou por meio de câmeras digitais que transferem a imagem diretamente para um computador. Os desenvolvimentos tecnológicos

associados à fotografia digital, que permitem o aumento da resolução e da taxa de captura e transferência de imagens com a redução do nível de ruído, associados à facilidade operacional, tem feito com que a utilização de filmes foto-sensíveis a caia em desuso. Sendo assim, esta seção descreverá as metodologias que adotam câmeras digitais.

Como os pulsos são extremamente rápidos, é importante que a fonte laser seja sincronizada com a câmera para que a mesma capte a imagem assim que o plano for iluminado. Para este fim, pode-se adotar uma câmera que se manterá com o sensor sensibilizado durante os dois pulsos e, conseqüentemente, obterá uma só imagem (simples quadro / dupla exposição). Ou então, pode-se adotar um aparelho que seja rápido o suficiente para transferir a primeira imagem e se preparar antes do segundo disparo (duplo quadro / dupla exposição). Sendo assim, o alcance desta técnica é limitado pela frequência de captura e pela resolução da mesma. Com câmeras CCD (*Charged Coupled Device*), que são as mais utilizadas para PIV, é possível se captar mais de 10 imagens por segundo com resoluções superiores a 1 megapixel (1000 x 1000 sensores). Já as câmeras CMOS (*complementary metal-oxide semiconductor*), podem atingir frequências de captura na ordem dos kHz (Raffel *et al.*, 2007). As câmeras de duplo quadro, também chamadas de correlação cruzada, são as preferidas, por apresentarem valores de correlação mais altos e menos correlações ambíguas (LaVision, 2007a), sendo o tipo utilizado no presente trabalho.

As imagens captadas são divididas em janelas de interrogação (*interrogation window*), dentro das quais são aplicadas métodos estatísticos (auto-correlação ou correlação cruzada) para se determinar os vetores velocidade. No caso da correlação cruzada, o maior pico de correlação calculado entre os quadros é o mais provável vetor deslocamento ( $ds$ ), este processo encontra-se representado na figura 3.12.

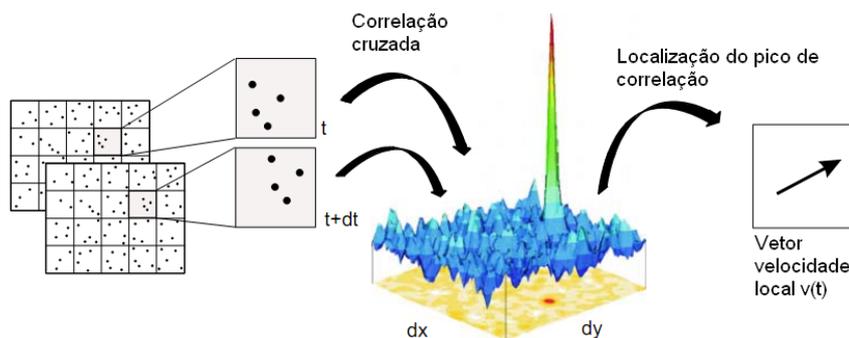


Figura 3.12: Determinação do campo vetorial utilizando-se correlação cruzada (adaptado de (LaVision, 2007a)).

O coeficiente de correlação entre as imagens 1 ( $I_1$ ) e 2 ( $I_2$ ), também chamado de correlação de Pearson é definido como

$$C = \frac{\text{cov}(X, Y)}{\sqrt{\text{var}(X) \cdot \text{var}(Y)}} \equiv \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sqrt{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2} \cdot \sqrt{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2}}, \quad (3.2)$$

onde  $x_i$  e  $y_i$  são cada uma das  $n$  medidas e  $\bar{x}$  e  $\bar{y}$  são as médias aritméticas das variáveis  $x$  e  $y$ .

Para a avaliação dos campos vetoriais de um escoamento transiente pode ser necessário calcular a equação 3.2 milhões de vezes. Para se reduzir o custo computacional, o software DaVis emprega um algoritmo cíclico baseado na transformação rápida de Fourier (FFT) que pode reduzir o custo computacional em até 50 vezes (LaVision, 2007a). Tal algoritmo retorna um resultado similar à correlação de Pearson, sendo descrito pela equação

$$C(dx, dy) = \sum_{x=0, y=0}^{x < n, y < n} I_1(x, y) I_2(x + dx, y + dy), \quad -\frac{n}{2} < dx, dy < \frac{n}{2}, \quad (3.3)$$

onde  $I_1$  e  $I_2$  dão as intensidades de imagens da primeira e segunda janela de interrogação respectivamente e o vetor  $C$  dá a intensidade da correlação para todos os deslocamentos  $(d_x, d_y)$  entre as duas janelas de interrogação.  $n$  é o tamanho da janela de interrogação e, normalmente, também é o tamanho do plano de correlação.

É assumido que as partículas dentro de cada janela de interrogação se movem de forma homogênea entre cada quadro. Para se garantir uma boa correlação, é importante que o tempo entre os pulsos seja pequeno o suficiente para que a componente ortogonal da velocidade não leve as partículas da primeira imagem para fora do plano, ou traga novas partículas para a segunda imagem. Raffel *et al.* (2007) constataram empiricamente que o deslocamento das partículas entre as exposições deve ser de no máximo 5 *pixels* para se garantir uma boa correlação. Além do ajuste correto do intervalo entre as exposições, é importante se garantir que existam partículas suficientes e que as mesmas estejam homogeneamente distribuídas.

O número de vetores gerados por imagem é determinado por dois parâmetros que devem ser cuidadosamente determinados. O tamanho da janela de interrogação determina a área onde serão aplicadas as correlações, sendo que janelas muito pequenas podem gerar correlações ambíguas devido à falta de partículas. Já a sobreposição determina a porcentagem da janela de interrogação que será sobreposta pela janela vizinha, conforme apresentado na figura 3.13. A origem de cada vetor é tomada no centro das janelas de interrogação.

A determinação do campo vetorial pode ainda ser feita em um ou em

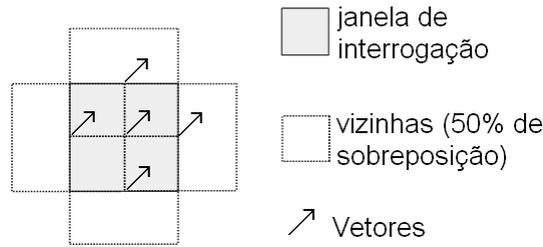


Figura 3.13: Exemplo de janelas de correlação com 50% de sobreposição, com indicação da origem dos vetores gerados (adaptado de (LaVision, 2007a)).

múltiplos passos. No caso da avaliação multi-passos com tamanho da janela constante, são realizadas  $n$  interações na mesma imagem, sendo que, em cada qual o campo de velocidade calculado é utilizado para se deslocar a janela de interrogação com o intuito de se obter uma melhor correlação, conforme apresentado esquematicamente na figura 3.14. Nesta figura, a posição inicial das janelas é apresentado do lado esquerdo e o vetor deslocamento calculado com esta janela está representado no centro da imagem. A partir do vetor deslocamento são estimados dois vetores deslocamento que determinarão uma nova posição para as janelas de interrogação com o intuito de obter uma melhor correlação, aumentando assim a precisão do vetor deslocamento calculado, conforme pode ser visto na metade direita da figura.

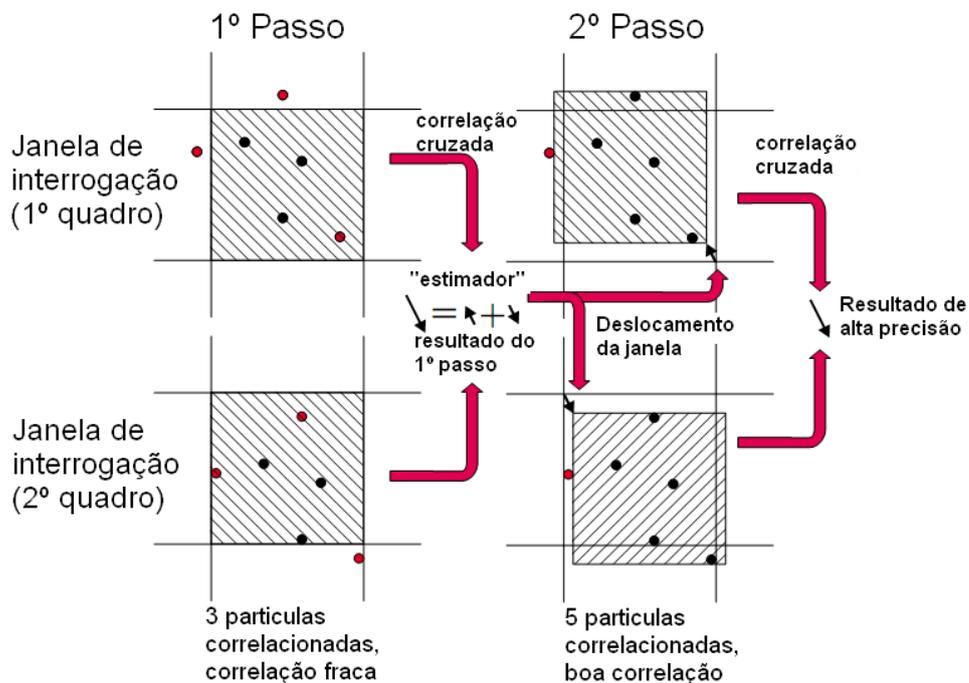


Figura 3.14: Correlação adaptativa multi-passo com tamanho de janela constante (adaptado de (LaVision, 2007a)).

Há também a opção de se utilizar avaliação multi-passo com diminuição da janela de interrogação. Neste caso, a cada interação o tamanho da janela

é reduzido em 50% e o campo vetorial do primeiro passo é utilizado para se determinar o deslocamento das novas janelas de interrogação. Este método permite que se utilize uma janela de interrogação final com tamanho menor que a obtida sem a utilização de passos adaptativos, mantendo-se uma boa correlação (LaVision, 2007a).

Na etapa de pós processamento, ainda há a possibilidade de utilizar filtros que (i) limitam os valores máximos e mínimos de velocidade em cada direção, e (ii) que removam vetores cuja qualidade da correlação seja questionável. A avaliação da qualidade da correlação em uma janela é feita por meio do “fator de picos” ( $Q$ ) que correlaciona a altura dos dois primeiros picos de correlação conforme a equação:

$$Q = \frac{P1 - \min}{P2 - \min} > QF, \quad (3.4)$$

onde  $P1$  e  $P2$  são as alturas do primeiro e do segundo pico de correlação e  $QF$  é o valor mínimo aceitável para o fator  $Q$ , sendo sempre maior do que 1. Valores próximos de 1 indicam que a intensidade dos dois primeiros picos é muito próxima, ou seja, não é possível garantir que a correlação encontrada é válida. Valores maiores que 1,5 indicam que o vetor encontrado tem grandes probabilidade de ser válido. Os valores usualmente adotados para este fator estão entre 1,2 e 1,5.

Há ainda as opções de (i) filtrar os vetores pela média dos vetores vizinhos ou (ii) suavizar o campo vetorial utilizando-se um filtro 3x3 de remoção de ruídos. Estes filtros não serão detalhados, pois foi determinado que a sua utilização produziria grandes discrepâncias no campo de velocidades calculado, devido à topologia do escoamento estudado no presente trabalho.

O software de pós processamento permite, ainda, que se opte por substituir os vetores removidos pelos filtros pela média dos vetores vizinhos. Tal opção pode gerar bons resultados para regiões pouco perturbadas do escoamento, onde a velocidade é praticamente constante. No entanto, pode levar a grandes erros em regiões com flutuações abruptas de velocidade, onde a velocidade dos vetores vizinhos pode ser muito diferente, não sendo adotada no presente trabalho.

O processamento é realizado por um computador com processador Intel, Core2Duo de 2.4 GHz e 2 Gb de memória RAM. A avaliação do tamanho da janela de interrogação, bem como dos parâmetros da correlação multi-passo e dos filtros utilizados será feita no capítulo 5.1.

Os parâmetros do laser, das câmeras, bem como a sincronização da abertura da câmara com os pulsos lasers, bem como com o sistema PLIF foram controlados com auxílio do software DaVis da empresa La-

Vision. Não será detalhada a metodologia de utilização do software, pois a mesma encontra-se detalhada nos manuais fornecidos pelo fabricante (LaVision, 2007a, LaVision, 2007b).

### 3.4.2

#### Dispersão de Partículas Sólidas

A qualidade das correlações depende diretamente da quantidade de partículas capturadas em cada imagem, sendo assim é importante garantir que as partículas estejam distribuídas com a melhor concentração e da forma mais homogênea possível no escoamento. No presente trabalho, as partículas são injetadas tanto no escoamento anular quanto no jato, sendo que a quantidade de partículas injetadas é controlada de forma independente para cada um destes fluxos. Além da dificuldade de compatibilizar o número de partículas por unidade de área,  $N$ , nos dois fluxos principais, a topologia do escoamento gera uma região de recirculação (esteira) que tende a ter uma concentração reduzida de partículas. Este efeito de baixa concentração na região de recirculação é ampliado pela presença da frente de chama que tende a soprar as partículas devido à grande aceleração do escoamento, a qual é associada à menor densidade dos gases queimados. Esta diferença de concentração pode ser vista na figura 3.15, onde é mostrada uma imagem instantânea das partículas (em preto) obtida em um caso com combustão de  $H_2$  no ar. Nesta figura podem ser identificadas três regiões distintas, (a) anular, (b) esteira turbulenta e (c) jato de combustível.

A baixa concentração de partículas pode reduzir a probabilidade de detecção de um vetor deslocamento válido. A probabilidade de detecção de um vetor válido é função (i) da concentração de partículas no interior da janela de interrogação  $N_i$ , (ii) da perda de pares devido à entrada de partículas no plano  $F_i$  e (iii) da perda de pares devido à saída de partículas no plano  $F_o$ . Os fatores  $F_i$  e  $F_o$  tendem a 1 no escoamento estudado, conforme será apresentado na seção 3.5.3. O número de partículas por janela foi calculado com auxílio do programa Carl Zeiss, KS400, que permite calcular a relação entre a área ocupada por partículas e área total ( $A$ ) nas 3 regiões indicadas na figura 3.15. Como esperado, a região com menor concentração de partículas foi a região da esteira (b), onde a área ocupada pelas partículas corresponde a  $A = 7 \pm 3\%$  da área total, ou seja, aproximadamente 71 *pixels* em uma janela de 32x32. Como a imagem de cada partícula ocupa aproximadamente 4,5 *pixels* (cálculo apresentado na seção 3.5.3 e supondo que não há sobreposição, pode-se inferir que existam aproximadamente 15 partículas detectadas em cada janela de interrogação ( $N_i = 15$ ).

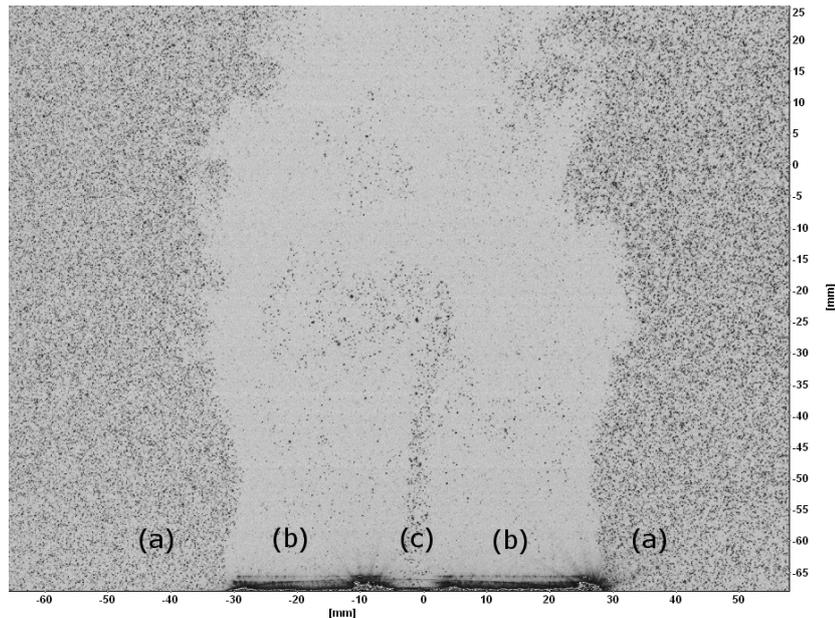


Figura 3.15: Imagem instantânea das partículas, em um escoamento com combustão, obtida com PIV para frequência do soprador 60 Hz e vazão de hidrogênio 2,  $16Nm^3/h$  (caso H2).

Raffel *et al.* (2007) simularam a probabilidade de detecção de partículas válidas em função dos parâmetros  $N_i$ ,  $F_o$ ,  $F_i$  e do tamanho da janela de interrogação resumando seus resultados na figura 3.16. Segundo esta figura, e os parâmetros calculados para os casos simulados, a probabilidade de detecção é próxima de 100%, fazendo que o erro relacionado à detecção tenda a zero.

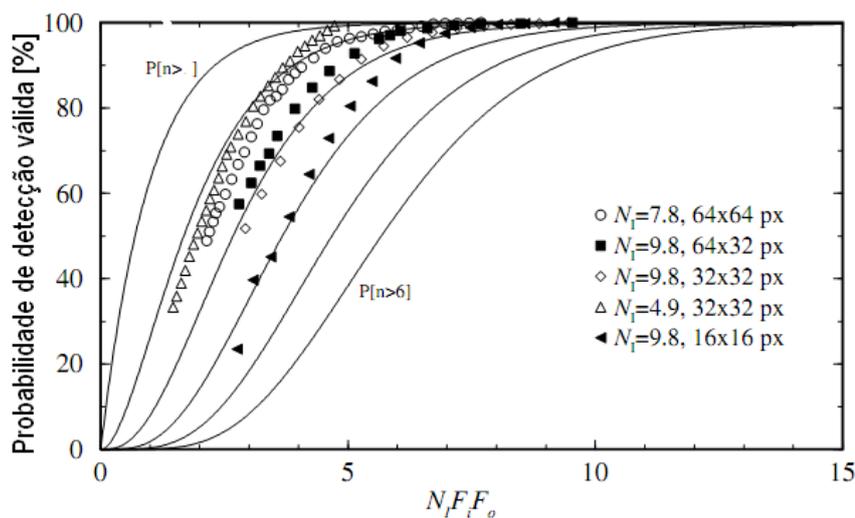


Figura 3.16: Simulações da probabilidade de detecção válida em função dos parâmetros  $N_i$ ,  $F_o$ ,  $F_i$  e do tamanho da janela de interrogação (adaptado de (Raffel *et al.*, 2007)).

Conforme foi exposto na seção 3.4.1, as partículas devem ter o diâmetro máximo controlado para se garantir que as mesmas sigam as flutuações do

escoamento. As partículas de óxido de titânio empregadas, são adquiridas com grande faixa de distribuição de diâmetro, podendo atingir até  $45\mu\text{m}$  de diâmetro máximo. Essas partículas são adicionadas ao escoamento através de um leito fluidizado, que define a massa de partículas que seguirá o escoamento e separa as partículas de maior diâmetro. Cabe ressaltar que a grande diversidade de diâmetros de partículas é desejável, no sentido de facilitar a fluidização do leito. Partículas de pequenas dimensões tem tendência a se aglomerar, o que é prejudicial para o funcionamento do leito.

Do leito, o escoamento entra tangencialmente na câmara cilíndrica de um ciclone deixando a mesma por um orifício central na parte superior, conforme apresentado esquematicamente na figura 3.17. A inércia faz com que as partículas mais pesadas não consigam acompanhar o fluido, se chocando com a parede e caindo no coletor (Perry e Green, 2008).

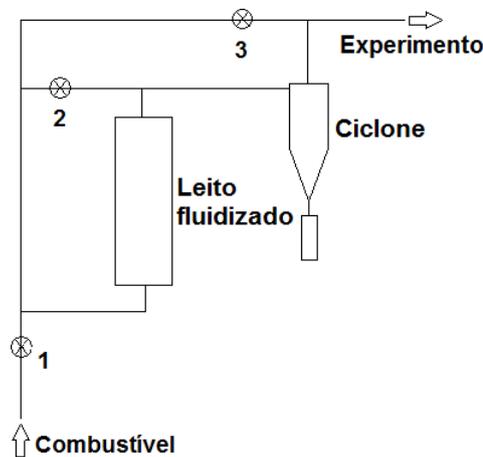


Figura 3.17: Esquema de montagem do Leito fluidizado, ciclone e de suas válvulas de controle.

No laboratório da PUC-Rio existem dois sistemas construídos em PVC projetados pelo engenheiro Waldir Martignoni (da Petrobras) para a alimentação de partículas no ar do anular e no combustível. Estes equipamentos foram confeccionados em caráter de teste em PVC devido à facilidade de usinagem e ao baixo custo deste material, porém possuem baixa resistência à pressão e não há garantia quanto à estanqueidade. Para a adição de partículas no combustível ( $H_2$ ) foram construídos, em aço inoxidável, um novo leito fluidizado com as mesmas dimensões, e um ciclone menor. Este segundo foi projetado com o objetivo de se reduzir as instabilidades detectadas na operação do primeiro modelo. Para este fim, aumento-se o número do swirl induzido pela redução do diâmetro. As dimensões principais destes equipamentos encontram-se na figura 3.18.

Para se determinar o diâmetro de corte das partículas no interior do

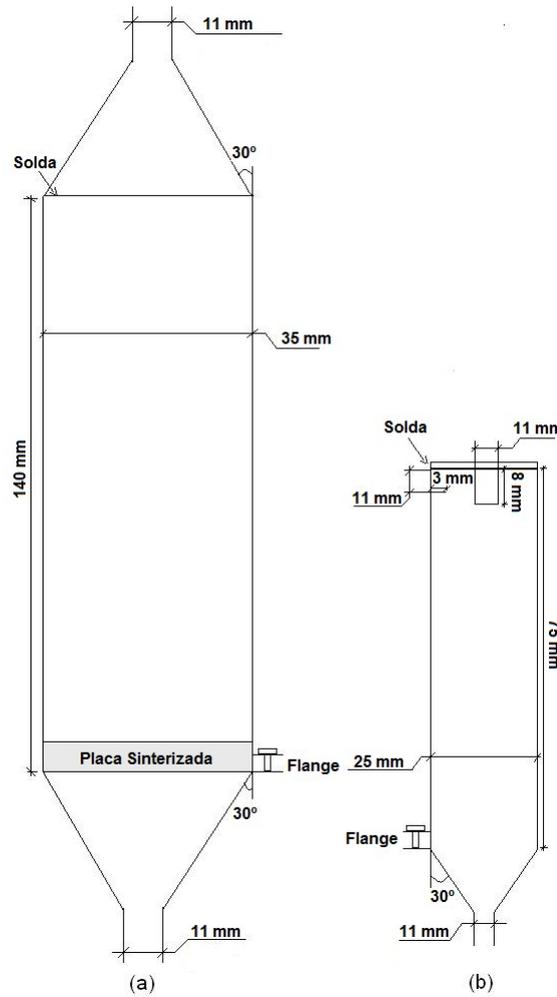


Figura 3.18: Leito fluidizado (a) e ciclone (b) projetados para operar com hidrogênio.

leito fluidizado, foi utilizado o conceito de velocidade terminal ( $U_t$ ) que é a velocidade na qual as forças de arrasto são iguais às forças gravitacionais, ou seja, é a maior velocidade possível de ser atingida por corpos em queda livre. Em outras palavras, as partículas grandes, cuja velocidade terminal é maior do que a velocidade no interior do leito fluidizado, não serão carregadas pelo escoamento. Para números de Reynolds da partícula menores que 0,1 as forças de arrasto podem ser representadas pela lei de Stokes (Yang, 1973), levando à:

$$U_t = \frac{d_p^2(\rho_p - \rho_g)g}{18\mu_g}, \quad (3.5)$$

onde  $d_p$  é o diâmetro da partícula,  $\rho_p$  e  $\rho_g$  são as densidades das partículas e do gás respectivamente,  $g$  é a aceleração gravitacional e  $\mu_g$  é a viscosidade dinâmica do gás. Pode-se escrever a velocidade terminal como função da vazão ( $Q$ ) e da área do leito:

$$U_t = \frac{4Q}{\pi D_t^2}, \quad (3.6)$$

onde  $D_l$  é o diâmetro do leito fluidizado. Substituindo a equação 3.6 na equação 3.5 e reordenando os termos obtêm-se a seguinte equação para o diâmetro máximo das partículas no leito:

$$d_p = \sqrt{\frac{72Q\mu_g}{D_l^2\pi(\rho_p - \rho_g)g}}. \quad (3.7)$$

Já para a determinação do diâmetro de corte das partículas na saída do ciclone foi utilizada a seguinte formulação, proposta por Perry e Green (2008)

$$d_p = \sqrt{\frac{9\mu_g D_c/4}{\pi N_s U_{max}(\rho_p - \rho_g)}}, \quad (3.8)$$

onde  $D_c$  é o diâmetro do ciclone,  $N_s$  é o número de espirais percorridas pelo fluido no interior do ciclone, que foi estimado em 2 para este ciclone, e  $U_{max}$  é o maior valor entre a velocidade de entrada e de saída do ciclone.

Como o ciclone encontra-se instalado em série com o leito fluidizado, pode-se afirmar que o diâmetro efetivo das partículas será o menor entre o diâmetro de corte do leito fluidizado e o diâmetro de corte do ciclone.

A metodologia de cálculo empregada para o projeto do leito e dos ciclones foi validada com a utilização de um equipamento modelo APS 3320 da TSI que permite determinar a distribuição do diâmetro das partículas em um escoamento quimicamente inerte. Como tal equipamento não pode ser utilizado para a medição de escoamentos reativos e não é seguro utilizar combustível sem a presença de chama, utilizou-se nitrogênio para as medições da granulometria no jato principal e ar comprimido para o escoamento anular. Para o jato central a vazão de nitrogênio no sistema dispersor de partículas foi de  $1Nm^3/h$ . Enquanto para o escoamento anular, o qual não possui medição de vazão, a vazão de ar comprimido foi regulada de modo a se obter uma distribuição visivelmente adequada de partículas para a frequência do soprador setada em 40 Hz. O histograma de distribuição do diâmetro das partículas encontra-se na figura 3.19.

Os histogramas mostram que em ambos os escoamentos a média da distribuição de diâmetros é próxima a  $1 \mu m$  e o desvio padrão é da ordem de  $0,3 \mu m$ .

Conforme apresentado na figura 3.17, a corrente que recebe as partículas é dividida em três, a primeira passa pelo leito, a segunda encontra com a primeira na saída do leito passando então pelo ciclone, aumentando assim a sua eficiência de separação, e a terceira encontra com a exaustão do ciclone. A proporção de gás que passa por cada corrente é controlada por válvulas agulha, mas não passa por controladores de vazão, assim, não se conhece a vazão que passa por cada um dos componentes. Devido a essas limitações,

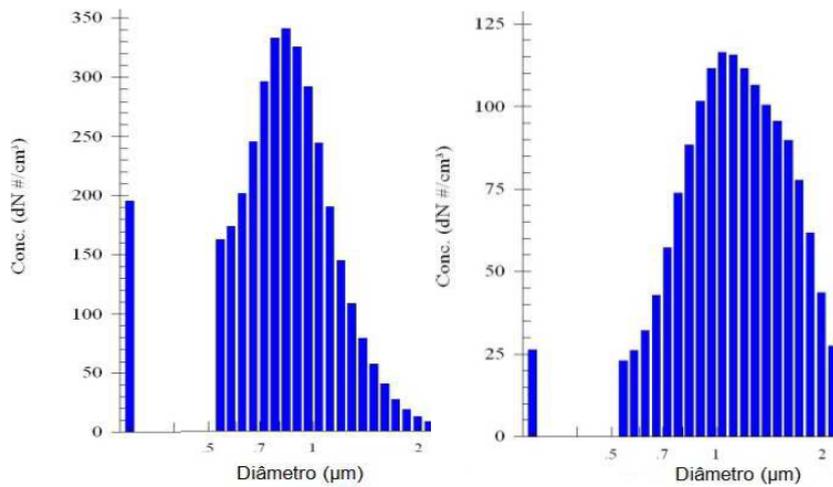


Figura 3.19: Histogramas de diâmetro das partículas de  $TiO_2$  no anular (esquerda) e no jato central (direita) de Nitrogênio.

a validação dos resultados de vazão foi feita através da simulação de valores representativos de abertura das válvulas de controle e é apresentada na tabela 3.1. Os valores calculados para o diâmetro das partículas variaram entre 4,5 e 6,4  $\mu m$ , sendo de 4 a 6 vezes superiores à média das medidas e de 2 a 3 vezes superiores ao maior diâmetro medido nos escoamentos. razão desta discrepância pode estar relacionada ao valor estimado para o número de espiras percorridas pelo fluido no ciclone ( $N_S$ ). De fato, quanto maior o número de  $N_S$ , menor o diâmetro da partícula (eq. 3.8), Entretanto, tal resultado mostra que a metodologia e os valores adotados resultam em previsões conservadoras do diâmetro das partículas. Nota-se que os resultados de  $d_p$  indicam que seria interessante dobrar o diâmetro do leito ( $D_l$ ), cortando pela metade  $d_p$  leito e, logo, reduzindo a carga de partículas do ciclone.

Tabela 3.1: Diâmetro das partículas de  $TiO_2$  calculado para a vazão de  $1Nm^3/h$  de nitrogênio passando pelo sistema dispersor de partículas original.

Abertura das Válvulas	$d_p$ leito [ $\mu m$ ]	$d_p$ ciclone [ $\mu m$ ]	$d_p$ efetivo [ $\mu m$ ]
2 e 3 fechadas	33,3	4,5	4,5
2 a 50% e 3 fechada	23,5	4,5	4,5
2 fechada e 3 a 50%	23,5	6,4	6,4
2 e 3 a 25%	23,5	5,2	5,2
2 e 3 a 30%	21,1	5,4	5,4
2 e 3 a 40%	14,9	5,9	5,9

O cálculo foi repetido considerando-se as dimensões do ciclone menor (25 mm de diâmetro contra 40 mm do ciclone utilizado no anular e no teste com nitrogênio) e com as propriedades do hidrogênio. Foram adotados dois valores para a vazão total do hidrogênio que são a mínima ( $Q_{min} = 0,574Nm^3/h$ )

e máxima vazão medidas pelo rotâmetro ( $Q_{max} = 7,174 Nm^3/h$ ), obtendo os valores para o diâmetro de corte apresentados na tabela 3.2.

Tabela 3.2: Diâmetro das partículas de  $TiO_2$  calculado para a operação do novo sistema de dispersão de partículas operando com hidrogênio.

Abertura das Válvulas	Q	$d_p$ leito [ $\mu m$ ]	$d_p$ ciclone [ $\mu m$ ]	$d_p$ efetivo [ $\mu m$ ]
2 e 3 fechadas	max	64,8	0,9	0,9
	min	18,3	3,3	3,3
2 a 50% e 3 fechada	max	45,8	0,9	0,9
	min	13,0	3,3	3,3
2 fechada e 3 a 50%	max	45,8	1,3	1,3
	min	13,0	4,7	4,7
2 e 3 a 25%	max	45,8	1,1	1,1
	min	13,0	3,8	3,8
2 e 3 a 30%	max	41,0	1,1	1,1
	min	11,59	3,98	3,98
2 e 3 a 40%	max	29,0	1,2	1,2
	min	8,2	4,3	4,3

Os valores de diâmetro calculados variam entre 0,9 e 4,7  $\mu m$ , sendo até 4 vezes menores que os valores encontrados para o ciclone maior operando com nitrogênio. Como, por motivos de segurança, não é possível medir a distribuição granulométrica das partículas de  $TiO_2$  no hidrogênio, pode-se afirmar, por analogia à validação feita com nitrogênio, que as partículas presentes no jato de combustível terão diâmetro médio da ordem de 1  $\mu m$ . Nota-se, enfim, que os resultados apresentados nas tabelas 3.1 e 3.2 também indicam a influência da abertura de cada uma das válvulas no diâmetro das partículas, podendo assim, servir de guia de operação do sistema dispersor de partículas.

### 3.4.3

#### Geração do Plano Laser

Como descrito nos objetivos (capítulo 1.5), no presente trabalho será feita a medição simultânea do campo de velocidades e do campo de concentração de OH. Para tanto é necessário que os dois planos laser sejam coplanares e tenham aproximadamente as mesmas dimensões (120 mm, 90 mm, 0,5 mm). A luz é gerada por um laser Nd:YAG de dupla cavidade modelo Twins BSL 200. Este laser possui duas cavidades geradoras de pulso laser independentes com comprimento de onda fundamental (1064 nm) que são alinhados e passam por um cristal gerador de segundo harmônico (532 nm). Esta configuração permite que o intervalo entre os pulsos seja ajustado conforme a velocidade do escoamento que se deseja medir.

Cada cavidade é capaz de gerar pulsos de segundo harmônico com até 200 mJ com uma duração de 7 ns e uma divergência de luz inferior a 4,5 mrad à uma frequência de 15 Hz. No presente trabalho a frequência foi ajustada para 3,3 Hz devido a limitações do sistema de aquisição e gerenciamento de dados.

O sistema óptico para a criação do plano de luz laser é composto por duas lentes esféricas e uma cilíndrica montadas em um suporte telescópico que permite o ajuste do foco entre 30 e 200 cm. O ajuste do ângulo de abertura do feixe é feito pela substituição da lente cilíndrica, sendo que foram fornecidas 3 lentes com distâncias focais de -10, -20 e -50 mm. As lentes tem 12 mm de diâmetro e são de quartzo com transmitância de 75 % na faixa de 230 a 800 nm. O sistema foi fornecido pela LaVision e encontra-se representado na figura 3.20.

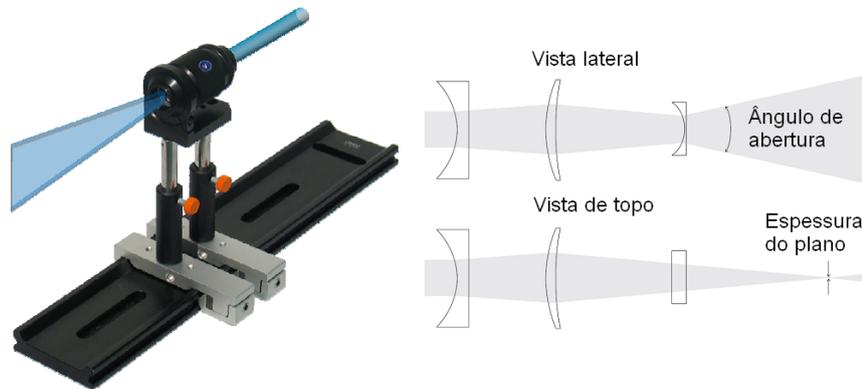


Figura 3.20: Configuração do sistema óptico de plano adotado para o sistema PIV (LaVision, 2008).

#### 3.4.4 Captura de Imagens

Assim como descrito para o PLIF, luz proveniente do espalhamento Mie chegaria às câmeras de captura conjuntamente com a luz proveniente da combustão e com a luz do ambiente. Para se conseguir uma medida precisa da posição da partícula é necessário que somente a luz espalhada pelas partículas chegue à lente, para tanto foi adotado um filtro passa banda centrado em  $532 \pm 5$  nm, que é o comprimento de onda do laser utilizado. Este filtro foi acoplado a lentes Nikon AF 50mm  $F/1.4$  responsável por focalizar o plano laser.

A câmera CCD empregada para o PIV é do modelo Imager Intense da LaVision e possui uma matriz de  $1376 \times 1040$  pixels, com  $6,45 \mu\text{m}$  de dimensões de pixel, taxa de captura máxima de 10 Hz, 500 ns de intervalo entre aquisições e uma eficiência quântica de 70% na faixa de 532 nm. Esta câmera é idêntica à adotada para o sistema PLIF, porém não se utiliza intensificador de imagem.

### 3.4.5

#### Calibração da Técnica de Medição

A calibração das medidas de velocidade obtidas com o PIV foram feitas com o auxílio de um anemômetro de fio quente Dwyer, modelo S471 DTA que possui incerteza de medição de  $\pm 3\%$  indicada pelo fabricante e laudo de calibração indicando desvio de  $\pm 2,5\%$ , para 7,0 m/s, emitido pela empresa Skilltech. Foram feitas medidas em dois pontos, o primeiro é no escoamento anular na altura do corpo rombudo ( $y = 0$ ) e o segundo também foi no anular, porém 100 mm acima da primeira medição ( $y = 100$  mm). As velocidades medidas nestes dois pontos foram 8,0 m/s e 7,8 m/s, respectivamente, com as duas técnicas de medição. Essas medidas indicam que, para estas velocidades, os dois aparelhos apresentam incertezas de medição similares.

A vazão do gás no jato foi então calibrada com auxílio da técnica de PIV, uma vez que o pequeno diâmetro da saída do jato dificulta a obtenção de medidas precisas com o anemômetro. A vazão foi ajustada em  $0,75 \pm 0,019 Nm^3/h$  no rotâmetro, o que equivale a  $0,78 \pm 0,027 Nm^3/h$  de nitrogênio, após ser corrigida pela temperatura, pressão e propriedades do fluido de trabalho (lembrando que o rotâmetro utilizado foi originalmente calibrado para gás natural). Considerando o diâmetro da saída do jato de  $7,1 \pm 0,1$  mm, a velocidade média na saída do jato central é de 5,5 m/s. As medidas de velocidade, realizadas com PIV nestas condições, apresentam uma média de 5,6 m/s, ou seja, 4% de desvio. A incerteza de medição da velocidade obtida pelo rotâmetro é 3,5%, conforme será apresentado na próxima seção. Tal erro é da mesma ordem de grandeza do erro apresentado pelo PIV, mas o valor de 4% será adotado, por ser mais conservador.

### 3.5

#### Análise de Incerteza de Medição

Nesta seção será apresentada a metodologia para quantificação das incertezas de medição associadas ao campo de concentração do radical OH e ao campo de velocidade. Tal quantificação é indispensável para se avaliar a confiabilidade estatística dos resultados e para se ter uma melhor comparação com os resultados das simulações numéricas. Para tanto serão levadas em conta as incertezas de medição de cada instrumento e a sua propagação para os resultados.

A incerteza é fruto da imprecisão dos equipamentos de medição. O método de Kline-McClintock determina a incerteza calculando as tolerâncias sobre essas medições (Moffat, 1982). A melhor representação da incerteza relativa dos resultados,  $u_{Total}$ , é:

$$u_{Total} = \pm \left[ \sum_{i=1}^n (u_i)^2 \right]^{1/2}, \quad (3.9)$$

onde  $u_i$  é cada uma das incertezas que afetam a medição e  $n$  é número total dessas incertezas.

### 3.5.1

#### Estimativa da Incerteza no Número de Reynolds do Jato

O principal parâmetro de similaridade do escoamento é o número de Reynolds do jato ( $Re_j$ ) definido pela equação

$$Re_j = \frac{U_j d \rho_g}{\mu_g}, \quad (3.10)$$

onde  $U_j$  é a velocidade do jato de combustível,  $d$  é o diâmetro do orifício e  $\rho_g$  e  $\mu_g$  são a densidade e a viscosidade dinâmica do gás respectivamente. Os elementos que contribuem para a incerteza do número de Reynolds são:

1. velocidade do gás no jato,  $u_{U_j}$ ;
2. diâmetro do orifício do jato de combustível,  $u_d$ ;
3. densidade do gás, que é função da temperatura,  $u_{\rho_t}$ ;
4. viscosidade dinâmica, que é função da temperatura,  $u_{\mu_t}$ ;

O diâmetro do orifício do jato de combustível,  $d = 7,1$  mm, foi medido com um paquímetro de 0,1 mm de resolução. Logo, a incerteza relativa ao diâmetro do jato é  $u_d = \pm 1,4\%$ .

A incerteza de medição do rotâmetro utilizado no presente trabalho (modelo 4T7-0803-X12 da OMEL) é 2% segundo o fabricante, mas foi medido como 2,5% (Caetano, 2012). A vazão volumétrica medida deve ser corrigida pela pressão e pela temperatura, logo deve-se considerar a incerteza de medição do manômetro (Wika; 232:54:115L) que é 2,5%, segundo o fabricante, e a do termopar digital (ECIL/WATLOW, 935), cuja incerteza é dada como sendo 0,25%. Logo, a incerteza do valor corrigido de vazão é  $u_Q = \pm 3,2\%$ . A velocidade do jato é função da vazão e do diâmetro do jato segundo a equação:

$$U_j = \frac{4Q}{\pi d^2}. \quad (3.11)$$

Sendo assim, a incerteza associada à velocidade do jato é calculada como:

$$u_{U_j} = \pm [(u_Q)^2 + (u_d)^2] = \pm 3,5\%. \quad (3.12)$$

No entanto, conforme foi apresentado na seção 3.4.5, as medidas de velocidade do jato apresentaram um desvio de  $\pm 4\%$ , valor esse que será adotado como incerteza da velocidade do jato.

A incerteza relativa da densidade é obtida a partir da equação dos gases ideais que relaciona a densidade do gás com a pressão e a temperatura. A contribuição das incertezas fornecidas pelo termopar e pelo manômetro gera uma incerteza relativa à densidade do gás  $u_{\rho_t} = \pm 2,5\%$ .

A viscosidade dinâmica do hidrogênio é obtida a partir da correção de Sutherland (Sutherland, 1893)

$$\mu = \mu_0 \frac{T_0 + 72}{T + 72} \left( \frac{T}{T_0} \right)^{3/2}, \quad (3.13)$$

onde  $T$  é a temperatura do gás e  $T_0$  é a temperatura de referência em Kelvin e  $\mu_0$  é a viscosidade dinâmica na temperatura de referência. O erro da aplicação desta correção tende a zero para variações de temperatura menores que 10% (Arnold, 1933). A viscosidade de referência nas condições normais de pressão e temperatura obtidos pelo NIST com erro inferior a 0,08% (NIST, 2011). Levando em conta o erro na medição de temperatura do termopar, o erro da viscosidade dinâmica é  $u_{\mu_t} = \pm 0,26\%$ .

Logo, o erro no cálculo do número de Reynolds é:

$$u_{Re_j} = \pm [(u_{U_j})^2 + (u_d)^2 + (u_{\rho_t})^2 + (u_{\mu_t})^2] \cong \pm 4,9\%. \quad (3.14)$$

### 3.5.2

#### Estimativa da Incerteza nos Resultados de PLIF

As imagens obtidas com o sinal de fluorescência pela aplicação da técnica PLIF possuem erros sistemáticos influenciados pelos seguintes fatores:

1. flutuações da intensidade da luz dos pulsos do laser de bombeio ( $u_{LB}$ );
2. comprimento de onda de excitação ( $u_{\lambda}$ );
3. ângulo de divergência do feixe e distribuição não-homogênea do plano de luz ( $u_{PL}$ );
4. ruído de fundo da câmera ( $u_{RF}$ );
5. atenuação e distorção da luz causada pelo sistema óptico de detecção por reflexos no laboratório ( $u_{RL}$ );
6. desativação colisional da fluorescência ( $u_{DC}$ ).

A variação de intensidade dos pulsos lasers é corrigida pela adoção de um monitor de intensidade de luz laser conforme descrito na seção 3.3.2 ( $u_{LB} = 0$ ).

O comprimento de onda da luz laser utilizado para excitação deve ser ajustado com base na resposta da fluorescência, a qual é influenciada pelas condições do ambiente. Desta forma, antes de iniciar a captura das imagens

experimentais é realizada uma varredura de comprimentos de onda em uma faixa do espectro que englobe a linha de fluorescência desejada, a fim de definir qual é o comprimento de onda da luz laser de excitação que produz a melhor resposta da fluorescência. Assim, é obtida a melhor relação sinal/ruído para a fluorescência do OH, minimizando a incerteza ( $u_\lambda = 0$ ).

O ângulo de divergência do feixe é função da óptica de feixe aplicada, que por sua vez é selecionada de acordo com a distância entre este conjunto e o experimento e pela largura do plano laser necessário, conforme foi apresentado no seção 3.3.2. Antes da realização de cada experimento é utilizado um alvo de calibração e papel térmico, que fica marcado ao ser atingido pelo feixe, para ajustar o plano laser de forma que ele fique focado no centro do jato e com 90 mm de altura.

O software DaVis possui um sistema de correção para a não-homogeneidade da distribuição de energia no plano de luz laser. Para usar este sistema deve-se capturar imagens do plano usando uma mistura homogênea de um traçador evaporado (recomenda-se a utilização de acetona) e ar, ou a gravação do sinal de espalhamento Rayleigh espontâneo do plano laser. Caetano (2012) realizou uma medição de espalhamento Rayleigh espontâneo com mil imagens do plano laser com a mesma configuração minutos antes da realização dos experimentos do presente trabalho, sendo assim, os resultados obtidos por este autor podem ser diretamente aplicados neste trabalho. Os valores máximo e mínimo de intensidade do plano de luz laser medidos são de 65,9 e 56,7 *counts* respectivamente, conforme pode ser visto na figura 3.21. A média dos valores de intensidade dos *pixels* da imagem é igual a 59,4 *counts* e o desvio padrão de 1,3 *counts*, o que leva a uma incerteza de aproximadamente 2% ( $u_\lambda = \pm 2\%$ ).

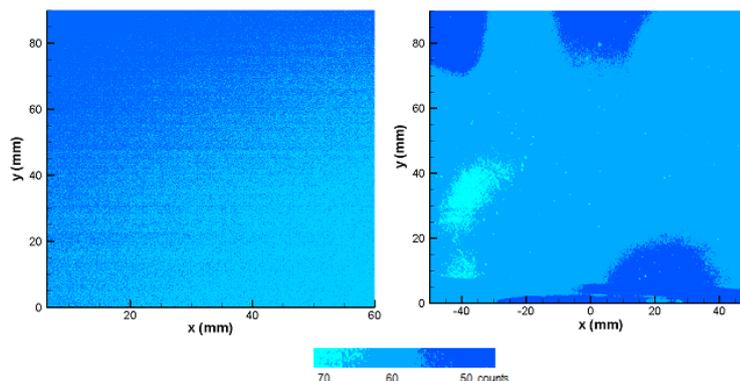


Figura 3.21: Imagem produzida pelo ruído de fundo da matriz CCD (esquerda) e; Imagem do feixe de luz laser obtida por espalhamento Rayleigh (direita) (Caetano, 2012).

Cada imagem capturada apresenta um ruído de fundo eletrônico proveniente da corrente elétrica de alimentação da matriz do CCD. O software DaVis permite a correção deste efeito através da utilização de uma imagem de fundo que é a média de 100 imagens obtidas com a lente da câmara tampada. Assim como foi apresentado para a medição do plano laser, será utilizada a medição de ruído de fundo realizada por Caetano (2012) que encontra-se na figura 3.21. Os valores máximos e mínimos de intensidade de luz nesta imagem média são 62,1 e 54,3 *counts* respectivamente. A média dos valores de intensidade dos *pixels* da imagem é igual a 55,8 *counts* e desvio padrão de 0,9 *counts*, produzindo uma incerteza de aproximadamente 2% ( $u_{RF} = \pm 2\%$ ).

As superfícies que podem ser atingidas por faixas de luz laser foram pintadas de preto fosco para reduzir a reflexão. Este procedimento, somado à adição do filtro de comprimento de ondas na lente da câmara de captura impede a chegada de luz espúria ao sensor de captura ( $u_{RL} = 0$ ).

Conforme exposto no capítulo 3.3.1, a correção do aumento no decaimento radiativo devido à colisões, chamado de desativação colisional, envolve o conhecimento da pressão parcial de todas as espécies presentes e da taxa de desativação do estado excitado da espécie de interesse por todas as outras presentes. Adicionalmente, é necessário que a dependência da taxa de decaimento em função da temperatura seja conhecida. Como a avaliação do campo de luminescência de OH no presente trabalho tem um caráter qualitativo, a estimativa da incerteza relacionada à desativação colisional será feita de forma simplificada. Serão utilizados os resultados de Tamura *et al.* (1998) que determinaram a taxa de desativação colisional do OH em uma chama de metano no ar, à pressão atmosférica e temperatura ambiente, é  $20 \cdot 10^6 s^{-1}$ . Supondo que a taxa de decaimento é a mesma para a queima do  $H_2$ , calcula-se que até 25,9% do OH será desativado durante o tempo de captura de sinal que é de 15 ns, logo a incerteza de medição devido à desativação colisional é 25,9%.

Sendo assim, a incerteza de medição total relativa às medições de PLIF é,

$$u_{PLIF} = \pm [(u_{LB})^2 + (u_{\lambda})^2 + (u_{PL})^2 + (u_{RF})^2 + (u_{RL})^2 + (u_{DC})^2]^{1/2} \cong \pm 26,1\%. \quad (3.15)$$

### 3.5.3

#### Estimativa da Incerteza nos Resultados de PIV

As principais fontes de incerteza na medição dos campos vetoriais pela aplicação da técnica PIV são:

1. termoforese, ou efeito Soret,  $u_{U_t}$ ;
2. gradiente de índice de refração,  $u_{IR}$ ;
3. emissão espontânea de radiação pela chama e pela fuligem presente pela chama,  $u_{EE}$ ;
4. diâmetro das imagens da partículas,  $u_{DP}$ ;
5. movimento da partículas fora do plano laser,  $u_{PP}$ ;
6. ruído de fundo,  $u_{RF}$ ;
7. gradiente de deslocamento no interior da janela de interrogação,  $u_{\nabla d}$ ;
8. ajuste subpixel,  $u_{SP}$ .

As três primeiras fontes de incerteza serão consideradas apenas nos casos com combustão.

Termoforese é o movimento das partículas submetidas à influência de um gradiente de temperatura, como o presente nas proximidades da frente de chama. Esta deriva é observada em escala milimétrica, produzindo um erro sistemático nas medições de velocidade das partículas. Segundo Westerweel (1997), a velocidade da termoforese pode ser estimada por,

$$U_t = \frac{c}{3\pi\mu d_P} F_t, \quad (3.16)$$

onde  $F_t$  é a força de empuxo sobre as partículas, gerada a partir do gradiente de temperatura ( $\nabla T$ ),

$$F_t = p\lambda_0 d_P^2 \left( \frac{\nabla T}{T} \right), \quad (3.17)$$

$d_P$  é o diâmetro das partículas que estão imersas em um fluido com viscosidade cinemática  $\mu$  e  $\lambda_0$  é o livre caminho médio, nas condições normais de pressão  $p$  e temperatura  $T$ .  $c$  é o fator de correção da lei de Stokes dado por

$$c = 1 + \left( \frac{2\lambda_0}{d_P} \right), \quad (3.18)$$

No presente trabalho as partículas tem diâmetro  $1 \mu m$ , a pressão de operação é a atmosférica e a variação de temperatura entre os gases frescos e os queimados é da ordem de  $2 \cdot 10^3$  K, o que leva a um gradiente de temperatura estimado em  $2 \cdot 10^6$  K/m considerando espessura de frente de chama de 1 mm (conforme resultados apresentados no capítulo 5.4.1). Admitindo valores típicos para o ar (que é o fluido predominante no escoamento) de  $\mu = 17 \cdot 10^{-6}$  Pa.s e  $\lambda_0 = 70$  nm, o valor da velocidade de termoforese no presente trabalho é da

ordem de 0,33 m/s, o que equivale a aproximadamente 5% da velocidade na região onde se encontra a frente de chama.

O índice de refração do ar é função da temperatura ( $n_{tp}$ ), podendo ser calculado pela seguinte expressão (Kaye *et al.*, 1995):

$$n_{tp} = 1 + (n_s - 1) \cdot \frac{p[1 + p(60,1 - 0,972T) \cdot 10^{-10}]}{96095,43(1 + 0.003661T)}, \quad (3.19)$$

onde,  $p$  é a pressão em Pa,  $T$  é a temperatura em °C e  $n_s$  é o índice de refração do ar relativo ao vácuo nas condições padrão de pressão e temperatura, que por sua vez é calculado pela expressão:

$$n_s = 1 + (8342,54 + 2406147(130 - \sigma^2)^{-1} + 15998(38.9 - \sigma^2)^{-1}) \cdot 10^{-8}, \quad (3.20)$$

onde  $\sigma = 1/\lambda$ , sendo que  $\lambda$  é o comprimento de onda da luz laser em  $\mu m$ . Como no sistema PIV adotado o comprimento de onda é 0,532  $\mu m$ ,  $n_s = 1,000278$  e para uma temperatura da chama da ordem de 2,2.10<sup>3</sup> °C,  $n_{tp} = 1,0000018$ , o que gera uma variação de 0,025% no índice de refração. O desvio da trajetória da luz proveniente de uma partícula pode ser calculada pela lei de Snell, escrita da seguinte forma

$$n_{tp} \text{sen} \theta_1 = n_s \text{sen} \theta_2, \quad (3.21)$$

onde  $\theta_1$  é o ângulo de incidência da luz na interface entre os meios com diferentes índices de refração e  $\theta_2$  é o ângulo de refração, supondo que  $\theta_2$  é o maior ângulo possível para que a luz proveniente da partícula atinja a lente da câmara de captura e que a distância entre a lente e o plano é 500 mm e que a altura do plano é 90 mm, através de algumas manipulações geométricas é possível mostrar que o maior erro devido à variação do índice de refração é 0,8%.

Conforme exposto na seção 3.4.4, a luz que chega à câmara é proveniente tanto do espalhamento Mie nas partículas, como da chama, da fuligem e do ambiente. Esta luz proveniente de fontes diversas ao espalhamento podem saturar o sensor CCD, principalmente no segundo quadro do par de imagens capturadas, devido a seu tempo de exposição relativamente maior (100 ms contra 10  $\mu s$  do primeiro), dificultando, ou até mesmo impossibilitando a correlação entre os pares de imagens. Chamas de hidrogênio não produzem fuligem, reduzindo significativamente este problema. A luz proveniente da emissão espontânea da chama e do ambiente é praticamente eliminada pela adoção de um filtro passa banda centrado em  $532 \pm 5$  nm, não influenciando na correlação entre as imagens. Com isso, o erro proveniente de emissões espontâneas será desconsiderado no cálculo da incerteza total do PIV.

A dimensão da partícula pode influenciar negativamente a medição em dois aspectos, primeiro, a partícula pode não acompanhar o escoamento, segundo a correlação depende diretamente do tamanho que a partícula é visualizada no escoamento. O primeiro aspecto pode ser verificado através do tempo de relaxação ( $t_s$ ) que representa o inverso da frequência máxima de oscilação de uma partícula em um escoamento fluido. Este tempo pode ser calculado pela seguinte equação derivada da equação de Stokes (Raffel *et al.*, 2007):

$$t_s = d_p^2 \frac{\rho_p}{18\mu_g}, \quad (3.22)$$

onde  $d_p$  é o diâmetro da partícula que foi calculado como  $1 \mu m$  na seção 3.4.2,  $\rho_p$  é a densidade das partículas que é  $4.170 \text{ kg/m}^3$  e  $\mu_g$  é a viscosidade do gás, que pode ser ar ou hidrogênio, assumindo os valores  $\mu_{ar} = 17.10^{-6} \text{ Pa.s}$  e  $\mu_{h_2} = 8,8.10^{-6} \text{ Pa.s}$ , respectivamente. Assim sendo, o tempo de relaxação é  $13,6 \mu s$  para as partículas no ar e  $26,3 \mu s$  para as partículas no hidrogênio, levando à flutuações máximas na ordem de  $73 \text{ KHz}$  e  $38 \text{ KHz}$  respectivamente. Tais flutuações são superiores aos maiores valores de flutuação turbulenta encontrada no escoamento que é da ordem de  $6 \text{ KHz}$ , como será mostrado no capítulo 5.4.3, o que nos leva a desconsiderar possíveis erros decorrentes da incapacidade da partícula acompanhar o escoamento.

Raffel *et al.* (2007) realizaram simulações com o método de Monte Carlo para avaliar a influência do tamanho visível da partícula na incerteza de medição com diferentes tamanhos de janelas de interrogação, figura 3.22. Conforme pode ser visto nesta figura, a incerteza é mínima para partículas cuja imagem tem diâmetro próximos de  $2 \text{ pixels}$ , independente do tamanho da janela de interrogação.

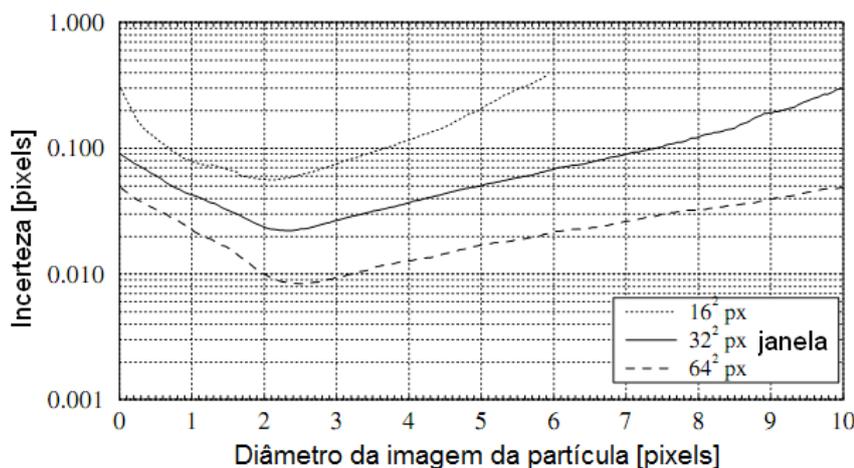


Figura 3.22: Simulações da influência do tamanho visível da partícula sobre a incerteza de medição (adaptado de (Raffel *et al.*, 2007)).

Ainda segundo Raffel *et al.* (2007), o diâmetro visível, ou diâmetro da partícula na imagem ( $d_\tau$ ) é determinado pelo módulo da soma de dois termos, sendo um termo regido pelo produto da magnificação pelo diâmetro real da partícula ( $d_p$ ) e o outro termo regido pela difração da luz por parte da partícula, conforme a equação,

$$d_\tau = \sqrt{(Md_p)^2 + d_{diff}^2} \quad (3.23)$$

onde  $d_{diff}$  é o diâmetro mínimo dos anéis de difração calculado pela relação,

$$d_{diff} = 2,44f_\#(M + 1)\lambda, \quad (3.24)$$

onde  $f_\# = 11$  é a razão entre a distância focal e o diâmetro da abertura da lente da câmera utilizada durante os experimentos,  $\lambda = 532$  nm é o comprimento de onda da luz laser e  $M = 0,074$  é a magnificação da imagem. O diâmetro médio efetivo para as partículas no hidrogênio não foi medido, mas será adotado o diâmetro medido no escoamento de nitrogênio que é  $1 \mu m$ , conforme foi apresentado na seção 3.4.2. Desta forma, o diâmetro da imagem das partículas é  $15 \mu m$  o que equivale a  $2,4 \text{ pixels}$ . Segundo a figura 3.22 tal diâmetro introduz uma incerteza de  $0,02 \text{ pixels}$  para a janela de  $32 \times 32$ , ou seja, aproximadamente 1 % do diâmetro da partícula no CCD, logo  $u_{DP} = \pm 1\%$ .

A entrada ou saída de partículas do plano de medição pode reduzir a intensidade do pico de correlação entre as imagens, diminuindo a confiança nos resultados. Existem três formas de se reduzir este efeito. A primeira é reduzir o intervalo de tempo entre a captura das duas imagens, tendo como desvantagem a diminuição da faixa de aplicação do PIV. Uma segunda opção é o aumento da espessura do plano laser de forma a acomodar o movimento transversal das partículas. Ou ainda, caso se tenha um escoamento com velocidade transversal ao plano praticamente constante, pode-se deslocar o plano laser na direção deste escoamento no momento do segundo disparo. Normalmente a melhor solução é uma combinação dos três métodos de forma a garantir um número mínimo de partículas dentro de cada janela de interrogação (tipicamente  $N_i \geq 4$ ) (Raffel *et al.*, 2007). No presente trabalho, estima-se devido à grande simetria dos valores medidos, que a componente transversal ao plano laser tem velocidade de duas a três ordens de grandeza inferior à componente longitudinal, o que, para o tempo entre disparo de ( $20 \mu m$ ) leva a um deslocamento no sentido transversal da ordem de nanômetros. Tal deslocamento é insuficiente para provocar a saída de partículas de um plano laser com a espessura do adotado neste experimento ( $500 \mu m$ ). Sendo assim, a incerteza gerada pelo movimento transversal ao plano será desconsiderada.

O erro relacionado ao ruído de fundo é praticamente constante para variações de partículas superiores a 0,4 *pixels*, conforme apresentado na figura 3.23. O nível de ruído das câmaras CCD utilizadas no laboratório é inferior a 10% e o deslocamento é da ordem de 4 *pixels*, sendo assim, a incerteza de medição é da ordem de 0,03 *pixels*, ou 1%.

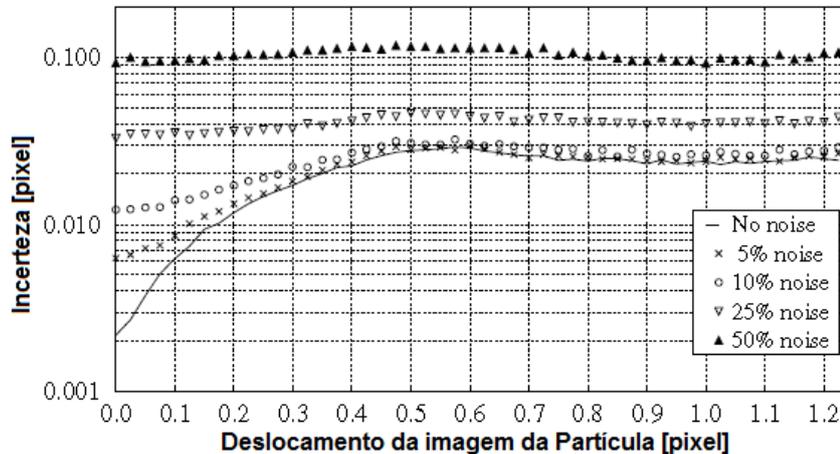


Figura 3.23: Simulações da incerteza de medição provocada pelo ruído de fundo em função do deslocamento da imagem da partícula (adaptado de (Raffel *et al.*, 2007)).

Gradientes de deslocamento no interior das janelas de interrogação podem levar a erros de viés, devido à característica estatística do processo de correlação. Isso se dá devido ao fato de que algumas partículas presentes na primeira janela podem não estar presentes na segunda. Os campos vetoriais tendem a apresentar velocidades inferiores às reais, pois as partículas com maior deslocamento tem uma maior tendência a sair da janela de interrogação antes do segundo disparo. Tal efeito pode ser reduzido ao se aplicar um deslocamento das janelas entre os quadros (Raffel *et al.*, 2007), operação esta que foi realizada no presente trabalho.

Raffel *et al.* (2007) realizaram simulações para avaliar a influência deste efeito considerando três tamanhos de janelas de interrogação e variando a concentração de partículas nas imagens (figura 3.24).

No presente trabalho os resultados dos casos com combustão mostram que o maior gradiente de velocidade encontra-se entre o jato e a região de recirculação formada a jusante do corpo rombudo. Foi então traçado o perfil radial da componente longitudinal da velocidade no caso H1, nas proximidades do jato a uma distância de  $D/6$  da saída do queimados. o qual esta representado na figura 3.25. Mais detalhes sobre os resultados deste caso podem ser encontrados no capítulo 5.4.

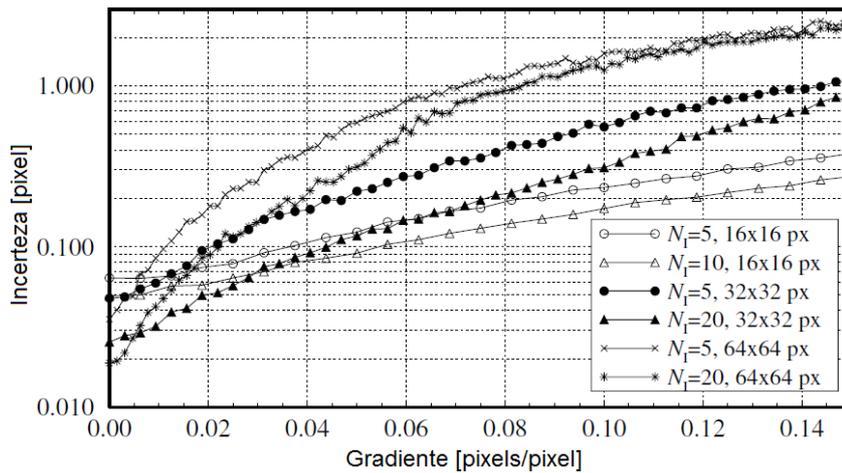


Figura 3.24: Simulações da incerteza de medição provocada pelo gradiente de deslocamento das partículas no interior da janela de interrogação (adaptado de (Raffel *et al.*, 2007)).

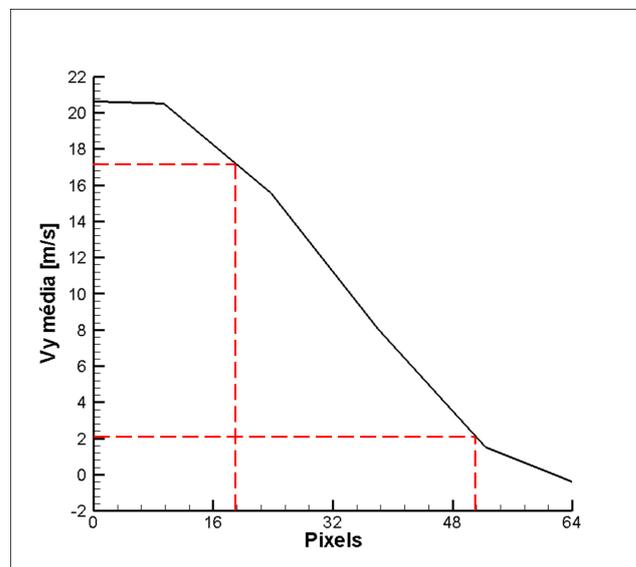


Figura 3.25: Perfil da componente longitudinal da velocidade nas proximidades do jato e uma distância  $D/6$  do corpo rombudo para o caso H1. Em vermelho está marcada a maior diferença de velocidade possível dentro de uma janela de  $32 \times 32$  pixels

Nesta região encontra-se o maior gradiente de velocidade, onde há uma variação de 15,2 m/s ou 175.000 *pixels/s*, em uma distância de uma janela de medição de  $32 \times 32$ . Neste caso, a diferença no deslocamento entre as partículas mais rápidas e as mais lentas dentro de uma janela, levando em conta o intervalo entre disparos de 20  $\mu\text{m}$  chega a 3,5 *pixels*, ou seja, o gradiente de *pixels* pode chegar a 0,11 *pixels/pixel*, o que para  $N_i = 14$  leva a uma incerteza de aproximadamente 0,5 *pixels*, ou seja 14,2% do deslocamento.

Análise semelhante foi feita para os casos inertes, sendo que o maior gradiente de velocidade dentro de uma janela de medição encontra-se no caso

V1 e é 8 m/s. Com tal velocidade, a incerteza é de aproximadamente 1,5 *pixels* ou seja, 8% do deslocamento.

A utilização de um estimador subpixel inapropriado pode levar a erros sistemáticos, com ordem de grandeza representada na figura 3.26. Tais erros são minimizados quando se utiliza partículas com diâmetro na imagem ( $d_\tau$ ) superior a 2 *pixels*, pela adoção de um estimador de picos adequado para lidar com partículas de baixo diâmetro ou pela adoção de filtros otimizadores na etapa de pós processamento (Raffel *et al.*, 2007). No atual trabalho, a dimensão das partículas é da ordem de 2 *pixels* e o deslocamento é da ordem de 4 *pixels*, levando o erro relacionado ao ajuste subpixel inferior a 0,01 *pixels*, ou seja, inferior a 0,25%.

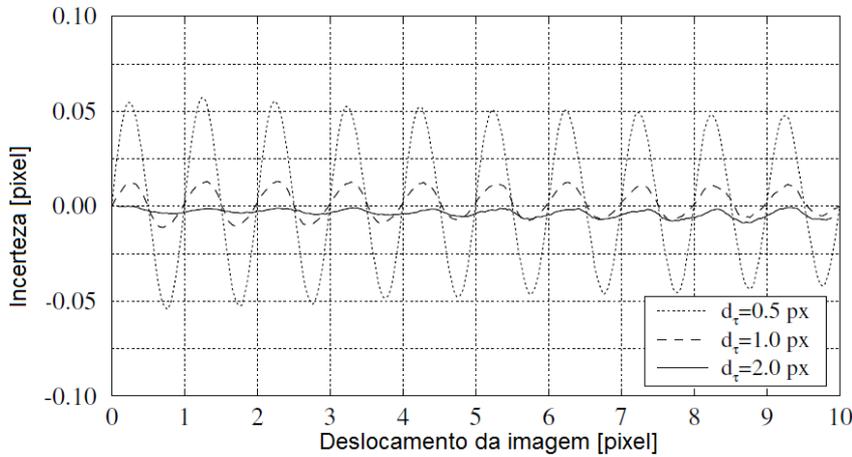


Figura 3.26: Simulações da incerteza de medição provocada pelo tamanho da partícula ser muito pequeno para o estimador subpixel (adaptado de (Raffel *et al.*, 2007)).

Sendo assim, a máxima incerteza de medição total relativa às medições de PIV nos casos com combustão ( $u_{PIV_{comb}}$ ) é,

$$u_{PIV_{comb}} = \pm [(u_{U_t})^2 + (u_{IR})^2 + (u_{EE})^2 + (u_{DP})^2 + (u_{PP})^2 + (u_{RF})^2 + (u_{\nabla d})^2 + (u_{SP})^2]^{1/2} \cong \pm 15,2\%. \quad (3.25)$$

Enquanto a máxima incerteza de medição nos casos inertes ( $u_{PIV_{in}}$ ) é,

$$u_{PIV_{in}} = \pm [(u_{DP})^2 + (u_{PP})^2 + (u_{N_i})^2 + (u_{RF})^2 + (u_{\nabla d})^2 + (u_{SP})^2]^{1/2} \cong \pm 8,2\%. \quad (3.26)$$

É importante ressaltar que a maior fonte de erro é o gradiente de velocidade no interior da janela de interrogação. Em regiões onde o escoamento

é uniforme o gradiente é praticamente zero, logo esta fonte de erro será desconsiderada nesta região. Sendo assim, a incerteza de medição total do PIV, onde o escoamento é uniforme, é de aproximadamente 1,4% para todos os casos, uma vez que não há combustão nesta região. No capítulo 5 será mostrado que o escoamento na região anular é homogêneo, podendo ser adotados tais incertezas nessa região.

### 3.6

#### Comentários Finais

No presente capítulo, foram apresentados os equipamentos disponíveis no laboratório de combustão e turbulência do departamento de engenharia mecânica da PUC-Rio, bem como as técnicas empregadas para a medição simultânea do campo de luminescência de OH e do campo de velocidades 2D em um plano que cruza uma chama não-pré misturada de hidrogênio no ar. O novo sistema de dispersão de partículas sólidas permitiu a injeção de partículas no combustível de forma mais controlada e segura, contribuindo para a evolução contínua das instalações deste laboratório.

A análise de incerteza de medição indicou que o erro relacionado ao número de Reynolds é de aproximadamente  $\pm 4,9\%$ , sendo dominado pelos erros na vazão corrigida obtida com o rotâmetro que é de aproximadamente  $\pm 4\%$ . Tal erros poderiam ser minimizados pela adoção de um sistema de medição de vazão mais preciso.

A incerteza de medição do campo de luminescência de OH é dominada pela desativação colisional que foi estimada de forma simplificada em  $\pm 25,9\%$ , gerando uma incerteza total de aproximadamente  $\pm 26,1\%$ . Tal incerteza é admissível no presente trabalho, pois a luminescência do radical OH é usada como indicador da posição da frente de chama, tendo caracter qualitativo. A obtenção de medidas quantitativas depende da determinação da taxa de desativação colisional para o OH nas condições do experimento e da redução do tempo de captura do sinal, o que leva à redução direta do decaimento total e conseqüentemente da incerteza relacionada a essa fonte.

O campo de velocidade 2D será medido com uma incerteza máxima estimada em  $\pm 8,2\%$  para os casos inertes e  $\pm 15,2\%$  para os casos com combustão, gerada, principalmente, pela má distribuição de partículas e pelo grande gradiente de velocidade nas proximidades do jato. A quantidade de partículas e a qualidade da distribuição das mesmas são limitadas (i) pela formação de regiões de recirculações que tendem a ter baixa concentração de partículas, (ii) pela queda abrupta de densidade ocorrida na frente de chama e (iii) pela limitação de pontos de injeção de partículas. Os fatores (i) e (ii) não

podem ser alterados, por serem características físicas do escoamento estudado, já o item (iii) implica na inserção de injetores de partículas em locais chave, o que se mostra complicado devido à possíveis alterações na topologia do escoamento provocadas pela utilização de tais dispositivos.

Já o erro relacionado ao gradiente de velocidade poderia ser minimizado (i) pela redução da janela de medição, conforme mostrado na figura 3.24 e (ii) pela diminuição do intervalo entre disparos. No entanto, a redução da janela de medição implica na redução do número de partículas no interior de cada janela, o que implica no aumento na incerteza de medição, sendo desconsiderada no presente trabalho. A redução do tempo entre disparos pode impossibilitar a determinação do deslocamento de partículas em regiões com baixa velocidade, pois a variação de posição destas partículas pode ser imperceptível ao sistema de captura. Vale ressaltar que na região anular, onde o escoamento é homogêneo, este erro tende a zero. Nesta região também não há combustão, logo, a incerteza estimada para o campo de velocidade nestas regiões é 1,4%.

## 4

### Metodologia Numérica

Paralelamente aos experimentos, são realizadas simulações numéricas validadas por comparação com os resultados dos experimentos. Os resultados numéricos também ajudam a compreender a física envolvida na formação da esteira turbulenta a jusante do corpo rombudo, a sua interação com o jato de combustível e, em particular, como os processos de turbulência influenciam a mistura do combustível com o comburente. A topologia do escoamento é estudada em casos sem e com combustão, de modo que é possível analisar a influência do calor liberado pelas reações químicas sobre o escoamento. Todas as simulações serão realizadas no código ANSYS/FLUENT e os modelos serão apresentados da forma como eles estão descritos no manual da versão 13.0 software (ANSYS, 2010a), uma vez que é impossível ter acesso ao modo como de fato estes modelos são implementados. Nesta descrição será adotada a simbologia clássica, que pode ser consultada na nomenclatura.

A simulação da combustão não pré-misturada ancorada por corpo rombudo apresenta dois grandes desafios que serão abordados separadamente neste capítulo, a modelagem do escoamento turbulento (seção 4.1) e a modelagem da combustão (seção 4.2).

No presente capítulo também serão apresentadas a malha de cálculo (seção 4.3) e as condições de contorno adotadas (seção 4.4).

#### 4.1

##### Modelagem da Turbulência

As equações de Navier-Stokes descrevem de forma rigorosa o fenômeno de turbulência no entanto, no caso geral estas equações não apresentam solução analítica e não há expectativa de obtenção de soluções numéricas para situações de interesse industrial em um futuro próximo. O problema reside no fato do escoamento turbulento apresentar um caráter essencialmente tridimensional e transiente, caracterizando-se pela presença de movimento do fluido com uma larga faixa de escalas de comprimento e de tempo, que requerem níveis de discretização espacial e temporal que ultrapassam em muito a capacidade computacional disponível para valores de número de Reynolds de interesse prático. De fato, simulações diretas a partir das equações de Navier-Stokes (*Direct Numerical Simulation* - DNS) têm sido realizadas apenas

para casos simples de escoamentos turbulentos a baixos números de Reynolds (Boersma, 1999).

Um recurso alternativo à DNS é a simulação de grandes escalas (*Large Eddy Simulation* - LES) que resolve as equações de Navier-Stokes para as grandes escalas da turbulência. As menores escalas, que apresentam comportamento mais universal, são aproximados por modelos simples. Com isso se reduz a capacidade computacional necessária, porém, o custo computacional ainda é muito elevado quanto da simulação de escoamentos reativos (Andrade *et al.*, 2011).

Em muitas situações de interesse industrial, a descrição do escoamento médio é suficiente. O conceito de tensão de Reynolds (Reynolds, 1895) é o ponto de partida para os modelos mais utilizados em simulações de escoamentos complexos. De acordo com este conceito qualquer propriedade do escoamento pode ser escrita pela soma de um valor médio com uma flutuação associada à turbulência. As equações médias resultantes deste procedimento são chamadas de equações médias de Reynolds. Este procedimento nada mais é que um filtro temporal, eliminando as flutuações das variáveis dependentes, e permitindo o uso de malhas muito menos refinadas do que as necessárias para DNS, o que o torna viável em termos de requisitos computacionais. A velocidade instantânea ( $U$ ) pode então ser descrita por

$$U = \bar{U} + u', \quad (4.1)$$

onde  $\bar{U}$  é a média da velocidade e  $u'$  é a flutuação da velocidade, sendo que

$$\overline{u'} = 0. \quad (4.2)$$

Em escoamentos compressíveis é conveniente utilizar a média ponderada pela densidade, também conhecida como média de Favre (Hinze, 1975). A velocidade instantânea pode então ser escrita como

$$U = \tilde{U} + u'', \quad (4.3)$$

onde  $u''$  é a flutuação da velocidade, sendo que

$$\overline{\rho u''} = 0, \quad (4.4)$$

e  $\tilde{U}$  é a média da velocidade ponderada pela densidade, definida como

$$\tilde{U} = \frac{\overline{\rho U}}{\bar{\rho}}. \quad (4.5)$$

#### 4.1.1

##### As Equações médias de Navier-Stokes

No escoamento turbulento as equações de transporte de massa, quantidade de movimento e energia valem em qualquer instante de tempo e, portanto

também na média. Após a aplicação da média de Favre e algumas manipulações matemáticas às equações médias da continuidade, momento e energia, assumindo as hipóteses de fluido newtoniano e a lei de Stokes para gases monoatômicos, podem ser escritas como:

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} [\bar{\rho} \tilde{u}_i] = 0, \quad (4.6)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{u}_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} [\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j + \bar{p} \delta_{ij} + \overline{\rho u_i'' u_j''} - \bar{\tau}_{ji}] = 0, \quad (4.7)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{e}_0) + \frac{\partial}{\partial x_j} [\bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{e}_0 + \tilde{u}_j \bar{p} + \overline{u_j'' p} + \overline{\rho u_j'' e_0''} + \bar{q}_j - \overline{u_i \tau_{ij}}] = 0. \quad (4.8)$$

Na equação (4.8),  $\tilde{e}_0$  é a media ponderada pela densidade da energia total dada por

$$\tilde{e}_0 = \tilde{e} + \frac{\tilde{u}_k \tilde{u}_k}{2} + k, \quad (4.9)$$

sendo  $k$  a energia cinética turbulenta definida como

$$k = \frac{\overline{u_k'' u_k''}}{2}. \quad (4.10)$$

O termo  $\bar{q}_j$  é o fluxo de calor médio, que pela aplicação da lei de Fourier e assumindo  $C_p$  constante, pode ser escrito como:

$$\bar{q}_j = -C_p \frac{\mu}{Pr} \frac{\partial \bar{T}}{\partial x_j} = -C_p \frac{\mu}{Pr} \frac{\partial \bar{T}}{\partial x_j} - C_p \frac{\mu}{Pr} \frac{\partial \bar{T}''}{\partial x_j}, \quad (4.11)$$

onde  $Pr$  é o número de Prandtl definido como

$$Pr \equiv \frac{C_p \mu}{\lambda}. \quad (4.12)$$

Uma simplificação aplicada, como forma de reduzir o custo computacional, em muitos modelos de turbulência comerciais (Apalart-Almaras,  $k - \epsilon$ ,  $k - \omega$ , dentre outros) é a modelagem do termo  $\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j$  através da hipótese de Boussinesq (Boussinesq, 1877). Segundo esta hipótese, a transferência de quantidade de movimento causada pela turbulência pode ser modelada a partir da viscosidade turbulenta ( $\mu_t$ ) de forma análoga à viscosidade molecular,

$$-\tau_{ij}^{turb} \equiv -\overline{\rho u_i'' u_j''} = 2\mu_t \widetilde{S_{ij}^*} - \frac{2}{3} \bar{\rho} k \delta_{ij}, \quad (4.13)$$

onde  $\tau_{ij}$  é o tensor de tensões de Reynolds e  $S_{ij}^*$  é o tensor taxa de deformação sem o seu traço,

$$S_{ij}^* \equiv \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{1}{3} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij}. \quad (4.14)$$

Aplicando as equações (4.11) e (4.13), assumindo a hipótese de gás perfeito pode-se reescrever as equações (4.6), (4.7) e (4.8) da seguinte forma:

$$\frac{\partial \bar{p}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} [\bar{\rho} \tilde{u}_i] = 0, \quad (4.15)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{u}_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} [\bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{u}_i + \bar{p} \delta_{ij} - \tilde{\tau}_{ji}] = 0, \quad (4.16)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{e}_0) + \frac{\partial}{\partial x_j} [\bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{e}_0 + \tilde{u}_j \bar{p} + \tilde{q}_j - \tilde{u}_i \tilde{\tau}_{ij}] = 0, \quad (4.17)$$

Note que as flutuações da viscosidade molecular ( $\mu$ ) foram negligenciadas, assim como o termo  $|\tau''_{ij}|$ , por ser muito inferior ao termo  $|\tilde{\tau}_{ij}|$ .

Para se solucionar estas equações é necessário, ainda, modelar os termos  $\mu_t$ ,  $k$  e  $Pr_t$ . Nas próximas seções serão apresentadas as metodologias aplicadas pelos modelos  $k - \epsilon$ ,  $k - \omega$ , SST  $k - \omega$  que utilizam a hipótese de Boussinesq. Será também apresentado o modelo RSM que não assume esta hipótese, resolvendo uma equação de transporte para cada termo do tensor de tensões de Reynolds. Este modelo foi desenvolvido com o intuito de melhorar a predição de escoamentos não isentrópicos, conforme será apresentado na seção 4.1.5. As equações serão escritas considerando as hipóteses de escoamento subsônico.

### 4.1.2

#### Modelo $k - \epsilon$

O modelo  $k - \epsilon$  é o modelo mais utilizado para descrever escoamentos turbulentos. O seu desenvolvimento se deu nos trabalhos publicados por Launder *et al.* (Jones e Launder, 1972, Launder e Sharma, 1974) e se tornou tão popular que a modelagem proposta é conhecida como “modelo  $k - \epsilon$  padrão”.

Este modelo se baseia no transporte da energia cinética turbulenta ( $k$ ) e na sua taxa de dissipação  $\epsilon$ . Na sua formulação padrão, a equação de transporte para ( $k$ ) deriva de uma equação exata, enquanto  $\epsilon$  é obtido utilizando-se raciocínios físicos. A vasta experiência na utilização deste modelo levou ao desenvolvimento de algumas variações, dentre elas o chamado modelo “ $k - \epsilon$  realizável” que será o empregado no presente trabalho.

O termo “realizável” significa que este modelo satisfaz certas restrições matemáticas do tensor de Reynolds que não são satisfeitas pelo modelo padrão. Para tanto, duas alterações em relação ao modelo original são usadas.

- Formulação alternativa para a viscosidade turbulenta;
- Equação de transporte modificada para a taxa de dissipação,  $\epsilon$ , derivada da equação exata para o transporte da variância da vorticidade.

Esta formulação é destinada a superar algumas limitações encontradas no modelo padrão, como a chamada anomalia do jato circular, que leva à má predição da taxa de abertura de jatos circulares. Estudos iniciais indicam

que esta é a formulação do modelo  $k - \epsilon$  que apresenta a melhor desempenho em casos de validação com escoamentos separados e escoamentos secundários complexos (ANSYS, 2010a). Uma limitação do modelo realizável é a predição de viscosidade turbulenta, muito elevadas nas interfaces entre regiões com grande rotação e regiões com escoamento estacionário (Shih *et al.*, 1995).

### Equações de transporte

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho k u_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + G_k - \rho \epsilon + S_k, \quad (4.18)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho \epsilon) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho \epsilon u_j) &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\epsilon} \right) \frac{\partial \epsilon}{\partial x_j} \right] \\ &+ \rho C_1 S \epsilon - \rho C_2 \frac{\epsilon^2}{k + \sqrt{\nu \epsilon}} + S_\epsilon, \end{aligned} \quad (4.19)$$

onde

$$C_1 = \max \left[ 0.43, \frac{\eta}{\eta + 5} \right], \quad \eta = S \frac{k}{\epsilon}, \quad S = \sqrt{2S_{ij}S_{ij}},$$

$G_k$  representa a geração de energia cinética turbulenta devido aos gradientes de velocidade média

$$G_k = \mu_t S^2, \quad (4.20)$$

$C_2$  é constante do modelo,  $\sigma_k$   $\sigma_\epsilon$  são os números de Prandtl turbulentos para  $k$  e  $\epsilon$  respectivamente.  $S_k$  e  $S_\epsilon$  são termos fontes introduzidos pelo usuário.

### Viscosidade turbulenta

$$\mu_t = \rho C_\mu \frac{k^2}{\epsilon}, \quad (4.21)$$

sendo

$$C_\mu = \frac{1}{A_0 + A_s \frac{k U^*}{\epsilon}}, \quad (4.22)$$

$$U^* \equiv \sqrt{S_{ij}S_{ij} + \tilde{\Omega}_{ij}\tilde{\Omega}_{ij}}, \quad (4.23)$$

$$\tilde{\Omega}_{ij} = \Omega_{ij} - 2\epsilon_{ijk}\omega_k, \quad (4.24)$$

$$\Omega_{ij} = \overline{\Omega_{ij}} - \epsilon_{ijk}\omega_k, \quad (4.25)$$

onde,  $\overline{\Omega_{ij}}$  é o tensor taxa média de rotação visto de um referencial se movendo com velocidade angular  $\Omega_k$ . As constantes do modelo são  $A_0$  e  $A_s$  dadas por

$$A_0 = 4,04, A_s = \sqrt{6} \cos \phi, \quad (4.26)$$

sendo,

$$\phi = \frac{1}{3} \cos^{-1}(\sqrt{6}W), \quad W = \frac{S_{ij}S_{jk}S_{ki}}{\tilde{S}^3}, \quad \tilde{S} = \sqrt{S_{ij}S_{ij}}. \quad (4.27)$$

### Constantes do modelo

$$C_2 = 1,9, \quad \sigma_k = 1,0, \quad \sigma_\epsilon = 1,2.$$

#### 4.1.3

##### Modelo $k - \omega$

O primeiro modelo de duas equações foi proposto por Kolmogorov (1942) que escolheu como parâmetros de turbulência a energia cinética de turbulência ( $k$ ) e a dissipação por unidade de energia cinética ( $\omega$ ).

Em sua formulação Kolmogorov se referiu a  $\omega$  como a razão de dissipação de energia em unidade de volume e tempo. Para enfatizar sua relação física com a “escala externa de turbulência,  $l$ ”, foi definida sua frequência como  $\omega = ck^{1/2}/l$ . Enquanto a dissipação ocorre nas pequenas escalas, a razão de dissipação é a razão de transferência da energia cinética de turbulência para as pequenas escalas. Como essa razão é definida por propriedade das grandes escalas, escalando assim com  $k$  e  $l$ ,  $\omega$  é indiretamente associado com o processo dissipativo. Combinando física com análise dimensional, Kolmogorov postulou a seguinte equação para  $\omega$ :

$$\rho \frac{\partial \omega}{\partial t} + \rho \bar{u}_j \frac{\partial \omega}{\partial x_j} = -\beta \rho \omega^2 + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \sigma \mu_T \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \right]. \quad (4.28)$$

Pode-se notar três particularidades nessa equação. Primeiro, não há nenhuma analogia com o termo de produção da equação de  $k$ . Segundo, esta equação foi escrita em termos de  $\omega$  e não de  $\omega^2$ . Terceiro, nesta equação não existem termos de difusão molecular, com isso, a mesma só pode ser aplicada a escoamentos com alto número de Reynolds e não é válida através da subcamada viscosa.

Em desenvolvimentos subsequentes a interpretação de  $\omega$  se adequou à flutuação turbulenta. Wilcox (1988) e Speziale *et al.* (1990), definem  $\omega$  como a razão de  $\epsilon$  por  $k$ , ou seja, a razão de dissipação por unidade de energia cinética de turbulência. A formulação da equação de transporte de  $\omega$  mudou a medida que o modelo  $k - \omega$  evoluiu nas últimas seis décadas. A formulação do modelo adotado pelo FLUENT, e aqui apresentado, é a forma mais testada do modelo  $k - \omega$  desenvolvida por Wilcox (Wilcox, 1997) que incorpora modificações para

efeitos de baixo número de Reynolds e descolamento da camada limite. A principal limitação deste modelo é a sensibilidade da solução aos valores de  $k$  e  $\omega$  fora da camada limite. O usuário deste modelo deve atentar para a qualidade da malha na proximidade das paredes, sendo recomendado manter  $y^* < 3$  caso se deseje avaliar a transição laminar-turbulenta e  $y^* < 20$  nos demais casos, sendo que para estes casos é aplicada uma lei de parede de forma similar ao adotado para o modelo  $k - \epsilon$  (ANSYS, 2010a).

### Equações de Transporte

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho k u_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \Gamma_k \frac{\partial k}{\partial x_j} \right) + G_k - Y_k + S_k, \quad (4.29)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \omega) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho \omega u_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \Gamma_\omega \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \right) + G_\omega - Y_\omega + S_\omega, \quad (4.30)$$

sendo  $S_k$  e  $S_\omega$  os termos fonte introduzidos pelo usuário,  $G_k$  é o termo de geração de energia cinética turbulenta devido aos gradientes de velocidade média, que tem a mesma formulação da adotada pelo modelo  $k - \epsilon$  (eq. 4.20) e  $G_\omega$  é o termo de geração de  $\omega$ , representado por

$$G_\omega = \alpha \frac{\omega}{k} G_k, \quad (4.31)$$

onde,

$$\alpha = \frac{\alpha_\infty}{\alpha^*} \left( \frac{\alpha_0 + Re_t/R_\omega}{1 + Re_t/R_\omega} \right), \quad (4.32)$$

$R_\omega = 2,95\alpha^*$  e  $Re_t$  é calculado pela expressão,

$$Re_t = \frac{\rho k}{\mu \omega}, \quad (4.33)$$

e  $\alpha^*$  é o coeficiente de amortecimento para baixo número de Reynolds calculado como

$$\alpha^* = \alpha_\infty \left( \frac{\alpha_0^* + Re_t/R_k}{1 + Re_t/R_k} \right), \quad (4.34)$$

onde  $R_k$ ,  $\alpha_0^*$  e  $\beta_i$  são constantes do modelo. Para elevados números de Reynolds  $\alpha^* = \alpha_\infty = 1$ .

Os termos  $\Gamma_k$  e  $\Gamma_\omega$ , nas equações 4.29 e 4.29, representam a difusividade efetiva de  $k$  e  $\omega$ , dadas por

$$\Gamma_k = \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k}, \quad (4.35)$$

$$\Gamma_\omega = \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\omega}, \quad (4.36)$$

onde  $\mu_t$  é a viscosidade turbulenta calculada combinando  $k$  e  $\omega$  da seguinte forma

$$\mu_t = \alpha^* \frac{\rho k}{\omega}. \quad (4.37)$$

Os termos  $Y_k$  e  $Y_\omega$ , nas equações 4.29 e 4.29, representam a dissipação de  $k$  e  $\omega$ , dadas por

$$Y_k = \rho \beta_i^* f_{\beta_i^*} k \omega, \quad (4.38)$$

$$Y_\omega = \rho \beta_i f_{\beta_i} \omega^2, \quad (4.39)$$

onde,

$$f_{\beta^*} = \begin{cases} 1 & \chi_k \leq 0 \\ \frac{1+680\chi_k^2}{1+80\chi_k^2} & \chi_k > 0 \end{cases} \quad (4.40)$$

$$f_\beta = \frac{1+70\chi_\omega}{1+80\chi_\omega} \quad (4.41)$$

sendo,

$$\chi_k \equiv \frac{1}{\omega^3} \frac{\partial k}{\partial x_j} \frac{\partial \omega}{\partial x_j}, \quad (4.42)$$

$$\chi_\omega = \left| \frac{\Omega_{ij} \Omega_{jk} S_{ki}}{(\beta_\infty^* \omega)^3} \right|. \quad (4.43)$$

$$\beta_i^* = \beta_\infty^* \left( \frac{4/15 + (Re_t/R_\beta)^4}{1 + (Re_t/R_\beta)^4} \right), \quad (4.44)$$

$$\Omega_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right), \quad (4.45)$$

### Constantes do Modelo

$$R_k = 6, \quad \alpha_0^* = \frac{\beta_i}{3}, \quad \beta_i = 0,072, \quad \sigma_k = 2,0, \quad \sigma_\omega = 2,0, \quad R_\beta = 8,0, \quad \beta_\infty^* = 0,09.$$

#### 4.1.4

##### Modelo SST $k - \omega$

O modelo SST (*Shear-Stress Transport*)  $k - \omega$  foi desenvolvido por Menter (Menter, 1994) com o intuito de agregar a exatidão do modelo  $k - \omega$  nas proximidades das paredes com os bons resultados obtidos com o  $k - \epsilon$  no

escoamento livre. Para tanto, converteu-se a formulação do modelo  $k - \epsilon$  em uma formulação  $k - \omega$ , diferenciando-se deste segundo modelo nos seguintes pontos:

- Os modelos  $k - \omega$  e  $k - \epsilon$  são multiplicados por uma função de mistura e ambos são computados simultaneamente. Este função de mistura tem valor 1 nas regiões próximas à parede, ativando apenas o modelo  $k - \omega$  e 0 longe das paredes, ativando apenas o modelo  $k - \epsilon$ ;
- O modelo SST incorpora um termo de correlação cruzada amortecido no cálculo de  $\omega$ ;
- A definição de viscosidade turbulenta é modificada para levar em consideração o transporte da tensão de cisalhamento turbulenta;
- As constantes do modelo são diferentes.

Estas modificações tornam o modelo mais adequados para algumas configurações de escoamento, como escoamentos com gradiente adverso de pressão, aerofólios e ondas de choque transônicas (ANSYS, 2010a). As principais limitações deste modelo estão relacionadas à produção excessiva de turbulência em regiões de estagnação ou com grandes acelerações (CFD-Online, 2011). Ao aplicar-se este modelo deve-se tomar os mesmos cuidados com a qualidade da malha nas proximidades da parede que os adotados com o modelo  $k - \omega$ .

### Equações de transporte

As equações de transporte do modelo SST  $k - \omega$  são similares às do modelo  $k - \omega$ :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho k u_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \Gamma_k \frac{\partial k}{\partial x_j} \right) + \tilde{G}_k - Y_k + S_k, \quad (4.46)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \omega) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho \omega u_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \Gamma_\omega \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \right) + G_\omega - Y_\omega + D_\omega + S_\omega. \quad (4.47)$$

As principais diferenças entre este modelo e o modelo  $k - \omega$  são os termos  $\tilde{G}_k$ ,  $D_\omega$ , a forma como a viscosidade turbulenta ( $\mu_t$ ) é calculada e o fato dos números de Prandtl para  $k$  e  $\omega$  serem calculados pelas equações 4.48 e 4.49 respectivamente. Nesta seção é apresentado o equacionamento para esses termos, os demais termos estão descritos na seção 4.1.3.

$$\sigma_k = \frac{1}{F_1/\sigma_{k,1} + (1 - F_1)/\sigma_{k,2}}, \quad (4.48)$$

$$\sigma_\omega = \frac{1}{F_1/\sigma_{\omega,1} + (1 - F_1)/\sigma_{\omega,2}}. \quad (4.49)$$

A viscosidade turbulenta é descrita como:

$$\mu_t = \frac{\rho k}{\omega} \frac{1}{\max \left[ \frac{1}{\alpha^*}, \frac{SF_2}{\alpha_1 \omega} \right]}. \quad (4.50)$$

As funções de mistura,  $F_1$  e  $F_2$  são dadas por

$$F_1 = \tanh(\Phi_1^4), \quad (4.51)$$

$$\Phi_1 = \min \left[ \max \left( \frac{\sqrt{k}}{0,09\omega y}, \frac{500\mu}{\rho y^2 \omega} \right), \frac{4\rho k}{\sigma_{\omega,2} D_\omega^+ y^2} \right], \quad (4.52)$$

$$D_\omega^+ = \max \left[ 2\rho \frac{1}{\sigma_{\omega,2}} \frac{1}{\omega} \frac{\partial k}{\partial x_j} \frac{\partial \omega}{\partial x_j}, 10^{-10} \right], \quad (4.53)$$

$$F_2 = \tanh(\Phi_2^2), \quad (4.54)$$

$$\Phi_2 = \max \left[ 2 \frac{\sqrt{k}}{0,09\omega y}, \frac{500\mu}{\rho y^2 \omega} \right], \quad (4.55)$$

onde  $y$  é a distância para a superfície mais próxima e  $D_\omega^+$  é o termo positivo do termo de difusão cruzada que, por sua vez, é calculada como

$$D_\omega = 2(1 - F_1)\rho \frac{1}{\omega \sigma_{\omega,2}} \frac{\partial k}{\partial x_j} \frac{\partial \omega}{\partial x_j}. \quad (4.56)$$

O termo de produção  $\tilde{G}_k$  é definido como,

$$\tilde{G}_k = \min(G_k, 10\rho\beta^*k\omega), \quad (4.57)$$

sendo  $G_k$  o termo de produção de  $k$  do modelo  $k - \omega$  (eq. 4.20). O termo de produção de  $\omega$  é calculado de forma análoga ao modelo  $k - \omega$ ,

$$\tilde{G}_\omega = \frac{\alpha}{\nu_t} \tilde{G}_k. \quad (4.58)$$

Note que para o modelo  $k - \omega$ , o termo  $\alpha_\infty$  é uma constante, enquanto para o modelo SST  $k - \omega$  este termo é calculado pela equação

$$\alpha_\infty = F_1\alpha_{\infty,1} + (1 - F_1)\alpha_{\infty,2}, \quad (4.59)$$

sendo,

$$\alpha_{\infty,1} = \frac{\beta_{i,1}}{\beta_\infty^*} - \frac{\kappa^2}{\sigma_{\omega,1} \sqrt{\beta_\infty^*}}, \quad (4.60)$$

$$\alpha_{\infty,2} = \frac{\beta_{i,2}}{\beta_\infty^*} - \frac{\kappa^2}{\sigma_{\omega,2} \sqrt{\beta_\infty^*}}, \quad (4.61)$$

### Constantes do Modelo

$$\begin{aligned} \sigma_{k,1} &= 1,176, & \sigma_{\omega,1} &= 2,0, & \sigma_{k,2} &= 1,0, & \sigma_{\omega,2} &= 1,168, \\ f_\beta &= 1,0, & \alpha_1 &= 0,31, & \beta_{i,1} &= 0,075, & \beta_{i,2} &= 0,0828. \end{aligned}$$

As demais constantes tem os mesmos valores adotados para o modelo  $k - \omega$ .

#### 4.1.5 Modelo RSM

Este modelo difere dos modelos anteriores por não adotar a hipótese de Boussinesq, (eq. 4.13), fechando as equações médias de Navier-Stockes pela solução de equações de transporte para o tensor de tensões de Reynolds e uma equação para a dissipação. Com isso, são adicionadas 7 equações de transporte às equações (4.15 - 4.16).

Este modelo é mais completo que os modelos de uma ou duas equações, levando em conta efeitos de curvatura de linhas de corrente, *swirl*, rotação e mudanças abruptas na taxa de cisalhamento. Por outro lado sua exatidão pode ser afetada pelas hipóteses de fechamento das equações de transporte dos vários termos do tensor de Reynolds, em particular no caso de combustão pré-misturada, a qual não é objeto deste estudo. Com isso, este modelo pode não apresentar resultados superiores a ponto de compensar o seu maior custo computacional, mas o seu uso é indispensável em escoamentos fortemente anisotrópicos. Destacam-se então as seguintes aplicações: (i) escoamentos em ciclones, (ii) combustores com elevado número de *swirl*, (iii) passagens com escoamento rotativo e (iv) escoamentos secundários induzidos por tensões em dutos (ANSYS, 2010a).

#### Equações de transporte

A equação exata do transporte do tensor de Reynolds pode ser escrita da forma,

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\overline{\rho u'_i u'_j}) + \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_k} (\rho u_k \overline{u'_i u'_j})}_{C_{ij}} = & \underbrace{-\frac{\partial}{\partial x_k} [\overline{\rho u'_i u'_j u'_k} + p (\delta_{kj} u'_i + \delta_{ik} u'_j)]}_{D_{T,ij}} \\ + \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_k} \left[ \mu \frac{\partial}{\partial x_k} (\overline{u'_i u'_j}) \right]}_{D_{L,ij}} - \underbrace{\rho \left( \overline{u'_i u'_k} \frac{\partial u_j}{\partial x_k} + \overline{u'_j u'_k} \frac{\partial u_i}{\partial x_k} \right)}_{D_{P,ij}} + \underbrace{p \left( \frac{\partial u'_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u'_j}{\partial x_i} \right)}_{\phi_{ij}} \\ - \underbrace{2\mu \frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \frac{\partial u'_j}{\partial x_k}}_{\epsilon_{ij}} - \underbrace{2\rho \Omega_k (\overline{u'_j u'_m} \epsilon_{ikm} + \overline{u'_i u'_m} \epsilon_{jkm})}_{F_{ij}}, \end{aligned} \quad (4.62)$$

onde  $C_{ij}$  é o termo convectivo,  $D_{T,ij}$  é a difusividade turbulenta,  $D_{L,ij}$  é a difusividade molecular,  $D_{P,ij}$  é a produção de tensão,  $\phi_{ij}$  é o termo que relaciona

pressão e deformação,  $\epsilon_{ij}$  é a dissipação e  $F_{ij}$  é a produção devido à rotação do sistema de coordenadas. Destes termos,  $D_{T,ij}$ ,  $\phi_{ij}$  e  $\epsilon_{ij}$  precisam ser modelados.

### Transporte da difusividade turbulenta

O termo  $D_{T,ij}$  é modelado da seguinte forma no FLUENT,

$$D_{T,ij} = \frac{\partial}{\partial x_k} \left( \frac{\mu_t}{\sigma_k} \frac{\partial \overline{u'_i u'_j}}{\partial x_k} \right), \quad (4.63)$$

sendo que a viscosidade turbulenta ( $\mu_t$ ) é definida pela equação 4.21. No entanto, no modelo RSM, o valor de  $C_\mu$  é uma constante, com valor igual à 0,09.

### Termo pressão-deformação

O FLUENT disponibiliza algumas abordagens para a modelagem deste termo. No presente trabalho é adotada a formulação linear típica (Gibson e Launder, 1978, Fu *et al.*, 1987, Launder, 1989) que parte da seguinte decomposição,

$$\phi_{ij} = \phi_{ij,1} + \phi_{ij,2} + \phi_{ij,w}, \quad (4.64)$$

onde  $\phi_{ij,1}$  é o termo de pressão-deformação lenta, também conhecido como termo de retorno para a isotropia,  $\phi_{ij,2}$  é o termo de pressão-deformação rápida e  $\phi_{ij,w}$  é o termo de reflexão na parede, estes termos são modelados como,

$$\phi_{ij,1} \equiv -C_1 \rho \frac{\epsilon}{k} \left[ \overline{u'_i u'_j} - \frac{2}{3} \delta_{ij} k \right], \quad (4.65)$$

$$\phi_{ij,2} \equiv -C_2 \left[ (P_{ij} + F_{ij} - C_{ij}) - \frac{2}{3} \delta_{ij} \left( \frac{1}{2} P_{kk} - \frac{1}{2} C_{kk} \right) \right], \quad (4.66)$$

$$\begin{aligned} \phi_{ij,w} \equiv & C'_1 \frac{\epsilon}{k} \left( \overline{u'_k u'_m n_k n_m} \delta_{ij} - \frac{3}{2} \overline{u'_i u'_k n_j n_k} - \frac{3}{2} \overline{u'_j u'_k n_i n_k} \right) \frac{C_l k^{3/2}}{\epsilon d} \\ & + C'_2 \left( \overline{\phi_{km,2} n_k n_m} \delta_{ij} - \frac{3}{2} \overline{\phi_{ik,2} n_j n_k} - \frac{3}{2} \overline{\phi_{jk,2} n_i n_k} \right) \frac{C_l k^{3/2}}{\epsilon d}, \end{aligned} \quad (4.67)$$

onde,  $C_1 = 1,8$ ,  $C_2 = 0,60$ ,  $C'_1 = 0,5$ ,  $C'_2 = 0,3$ ,  $n_k$  é o componente  $x_k$  do vetor unitário normal à parede,  $d$  é a distância normal à parede, e  $C_l = C_\mu^{3/4}/\kappa$ , onde  $C_\mu=0,09$  e  $\kappa$  é a constante de von Kármán (0,4187).

### Taxa de dissipação

O tensor dissipação é modelado como

$$\epsilon_{ij} = \frac{2}{3} \delta_{ij} \rho \epsilon, \quad (4.68)$$

A taxa de dissipação escalar,  $\epsilon$  é computada com um modelo de transporte similar ao usado no modelo  $k - \epsilon$  padrão,

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho \epsilon) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho \epsilon u_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\epsilon} \right) \frac{\partial \epsilon}{\partial x_j} \right] C_{\epsilon 1} \frac{1}{2} P_{ii} \frac{\epsilon}{k} \\ - C_{\epsilon 2} \rho \frac{\epsilon^2}{k} + S_\epsilon, \end{aligned} \quad (4.69)$$

onde,  $S_\epsilon$  é um termo fonte definido pelo usuário,  $\sigma_\epsilon = 1,0$ ,  $C_{\epsilon 1} = 1,44$  e  $C_{\epsilon 2} = 1,92$ .

## 4.2

### Modelagem da Combustão

A modelagem da interação da combustão com a turbulência tem se mostrado um grande desafio devido aos seguintes fatores:

- A combustão, mesmo em regime laminar, envolve uma grande gama de tempos químicos e físicos característicos. Alguns dos fenômenos químicos que controlam a combustão ocorrem muito rapidamente e em uma região muito restrita do escoamento. Os tempos característicos da combustão podem ser significativamente menores que os relevantes em simulações de escoamentos não reativos, o que pode levar a considerável aumento dos custos computacionais associados;
- Os mecanismos necessários para se descrever a cinética química podem ser compostos por centenas de espécies químicas e milhares de reações;
- A combustão turbulenta resulta de uma interação de duas vias entre o processo químico e a turbulência. A combustão é fortemente exotérmica, o que reduz a densidade dos fluidos e, conseqüentemente, gera grande aceleração. Além disso a viscosidade cinemática do fluido é modificada devido à variação na composição química e de temperatura. A turbulência, também, altera de forma significativa a estrutura da chama, o que incrementa as reações químicas, mas em casos extremos pode levar à sua extinção.

Essas dificuldades levaram à criação de diversos modelos que, através de hipóteses simplificadoras, visam descrever as alterações de temperatura e a formação dos produtos da combustão nos escoamentos. No entanto, esses modelos são aplicáveis somente a uma gama restrita de problemas e a sua utilização em condições diferentes das originais pode levar a resultados completamente

diferentes dos medidos. Para definir as condições de aplicabilidade dos modelos é preciso conhecer algumas definições:

- Chamas pré-misturadas: São chamas que se formam em uma mistura homogênea de combustíveis e reagentes. Neste caso, a frente de chama se desloca em direção aos gases frescos, ou seja, a chama se propaga até queimar todos os reagentes;
- Chamas não pré-misturadas: Também chamadas de chamas de difusão. Neste caso o oxidante e o combustível encontram-se segregados pela superfície da chama;
- Número de Damköhler ( $Da$ ): Definido como  $Da = \tau_m/\tau_c$ , representa a razão entre o tempo de transporte mecânico e o tempo de reação química da mistura reativa.

No presente trabalho, a chama estudada é do tipo não pré-misturada. Na tabela 4.1, estão indicados os principais modelos de reação química para este tipo de chama implementados no ANSYS/FLUENT e as suas principais aplicações e restrições.

Uma primeira análise permite descartar a utilização do modelo *Laminar finite-rate* (LFR), pois o mesmo é indicado apenas para chamas laminares ou supersônicas. No modelo *Eddy-dissipation Model* (EDM), as reações são dominadas pela taxa de mistura, abordagem esta que não permite descrever a interação entre turbulência e cinética química. Mais importante, a cinética química é negligenciada, logo, a concentração do radical OH não é calculada, impossibilitando a comparação com o campo de intensidade de fluorescência de OH obtido experimentalmente. Conforme foi apresentado no capítulo de revisão bibliográfica (cap. 2.2) a adoção de modelos de transporte da função densidade de probabilidade dos escalares reativos apresenta elevados custos computacionais e desafios de modelagem que fogem ao escopo do presente trabalho.

Neste ponto, as opções são os modelos *Eddy-dissipation Concept* (EDC) e Elementos de Chama Laminar (*Laminar Flamelet Model* - LFM). O modelo EDC negligencia aspectos da interação da turbulência com a frente de chama, prejudicando, principalmente, as previsões de extinções localizadas. Este modelo também apresenta limitações no cálculo de emissões, particularmente de NOx (Benim e Syed, 1998, Keum, 2009), o que limita a sua aplicação na avaliação de situações de interesse industrial. Além disso, a utilização de tabelas de reação faz com que o modelo LFM tenha um custo computacional menor do que o modelo EDC. No entanto, o modelo de elementos de chama apresenta restrições de aplicação, uma vez que só deve ser utilizados para elevados

Tabela 4.1: Principais modelos de combustão não pré-misturada existentes no Fluent.

Modelo	Aplicação
<i>Laminar finite-rate</i>	Ignora efeito da flutuação turbulenta Taxa de reação determinada pela lei de Arrhenius Indicado para escoamentos laminares, reações químicas relativamente lentas e para combustão supersônica
<i>Eddy-dissipation Model</i>	Escoamento Turbulento Reação ocorre nas grandes escalas Cinética da combustão é negligenciada Reação dominada pela mistura turbulenta
<i>Eddy-dissipation Concept</i>	Variação do modelo EDM que considera a cinética química Combustão ocorre nas pequenas escalas Hipótese de reator perfeitamente misturado
Elemento de Chama Laminar	Não pré-misturado Utiliza o conceito de fração de mistura que segue uma função $\beta$ PDF Alto número de Danköhler Utiliza biblioteca de reações químicas
<i>Composition PDF Transport</i>	Escoamento Turbulento Pode ser adotado em qualquer regime de combustão Cinética química detalhada Indicado para prever extinção e ignição Abordagem Lagrangian ou Euleriana Elevado custo computacional

números de Danköhler. Tal limitação não se aplica ao presente trabalho, pois o número de Danköhler das chamas estudadas é elevado o suficiente para a aplicação deste modelo. Assim, o modelo de Elementos de Chama laminar será adotado para a modelagem da combustão no presente trabalho. A formulação de tal modelo encontra-se na seção seguinte.

#### 4.2.1

##### Modelo de Elemento de Chama Laminar

Antes de descrever o modelo, é necessário introduzir o conceito de fração de mistura ( $f$ ), que é a fração mássica originada da corrente de combustível. Em outras palavras, esta é a fração mássica local dos componentes dos combustíveis queimados e não queimados ( $C$ ,  $H$ , etc) em relação a todas as espécies ( $CO_2$ ,  $H_2O$ ,  $O_2$ , etc). Esta abordagem é interessante, pois os elementos químicos se conservam, de forma que a fração de mistura é uma quantidade escalar

que se conserva. Sendo assim, as suas equações de transporte não apresentam termos fonte, transformando a descrição da combustão em um problema de mistura, eliminando a necessidade de fechamento associado à taxas de reação não lineares.

A fração de mistura pode ser definida termos da fração mássica ( $Z$ ) do elemento químico  $i$  como,

$$f = \frac{Z_i - Z_{i,ox}}{Z_{i,comb} - Z_{i,ox}}, \quad (4.70)$$

onde o índice  $ox$  denota valores para a corrente de oxidantes, enquanto  $comb$  se refere à corrente de combustível. Esta equação é válida para qualquer espécie química caso o coeficiente de difusão possa ser considerado igual para todas as espécies. Esta hipótese não é válida para escoamentos laminares, mas pode ser empregada quando a difusão turbulenta supera a difusão molecular. A média de Favre da fração de mistura é:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \bar{f}) + \nabla \cdot (\rho \vec{v} \bar{f}) = \nabla \cdot \left( \frac{\mu_t}{\sigma_t} \nabla \bar{f} \right). \quad (4.71)$$

Adicionalmente, o modelo de elementos de chama requer que seja conhecida a variância da fração de mistura ( $\overline{f'^2}$ ) (Jones e Whitelaw, 1982),

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \overline{f'^2}) + \nabla \cdot (\rho \vec{v} \overline{f'^2}) = \nabla \cdot \left( \frac{\mu_t}{\sigma_t} \nabla \overline{f'^2} \right) + C_g \mu_t (\nabla \bar{f})^2 - C_d \rho \frac{\epsilon}{k} \overline{f'^2}, \quad (4.72)$$

sendo que as constantes são  $\sigma_t = 0,85$ ,  $C_g = 2,86$  e  $C_d = 2,0$ .

### Conceito de elemento de chama

Por este conceito, a chama é um conjunto de elementos de chama, finos, laminares e localmente unidimensionais que estão inseridos em um escoamento turbulento. Estes elementos podem ser representados por uma chama laminar de difusão em contra corrente, como a mostrada na figura 4.1.

Na medida que a distância entre os jatos de combustível e de oxidante diminui, ou que a velocidade das correntes aumenta, a chama é estirada até se extinguir. Esta configuração experimental permite a medição dos campos de concentração de espécies e de temperatura em chamas de difusão laminar. Tais medidas possibilitam a calibração de modelos unidimensionais ao longo do eixo de simetria dos jatos de combustível, permitindo que mecanismos complexos de cinética química sejam considerados com custo computacional aceitável. Neste eixo, a fração de mistura ( $f$ ) decresce monotonicamente, partindo de 1 na saída do combustível e chegando a zero na saída do oxidante. Se a fração mássica das espécies químicas e a temperatura ao longo do eixo forem mapeados no espaço

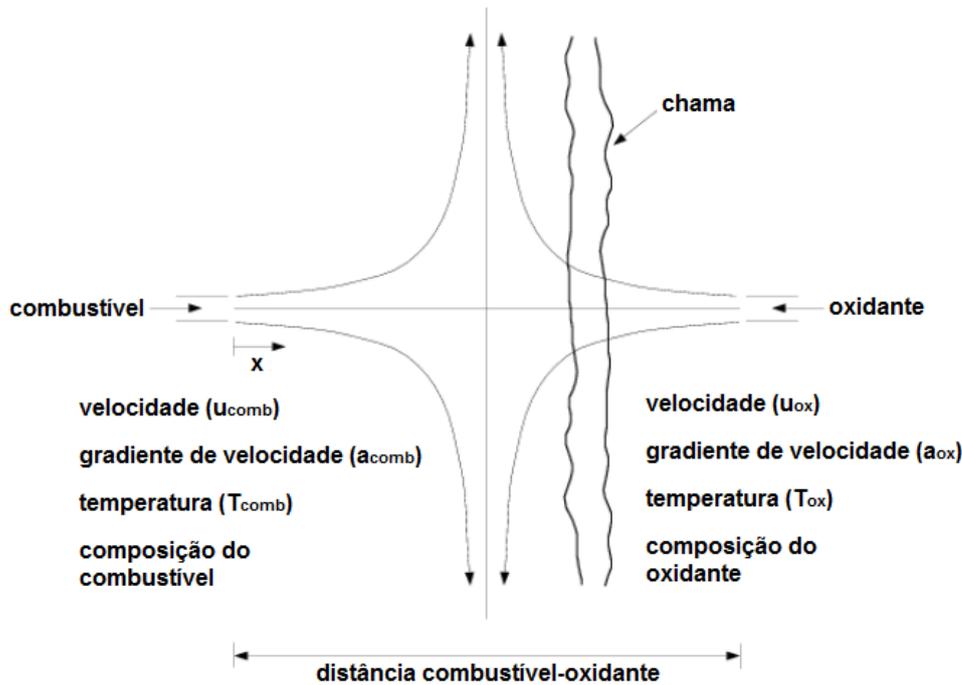


Figura 4.1: Chama laminar difusiva em contra corrente (adaptado de (ANSYS, 2010a)).

da fração de mistura, estes podem ser descritos por apenas duas propriedades, a fração de mistura e a taxa de estiramento ( $a_s$ ), definida como

$$a_s = \frac{v}{2l}, \quad (4.73)$$

onde  $v$  é a velocidade relativa entre os jatos de combustível e oxidante e  $l$  é a distância entre eles. No entanto, é mais conveniente utilizar a taxa de dissipação escalar,  $\chi$ , para caracterizar o afastamento do equilíbrio químico,

$$\chi = 2D_i |\nabla f|^2, \quad (4.74)$$

onde  $D_i$  é o coeficiente de difusão.

Nota-se que  $\chi$  varia ao longo do eixo do elemento de chama. Para a geometria de contra corrente, a taxa de estiramento do elemento de chama pode ser relacionada com a dissipação escalar no ponto onde  $f$  é estequiométrico da seguinte forma (Peters, 1984),

$$\chi_{st} = \frac{a_s \exp(-2[erfc^{-1}(2f_{st})]^2)}{\pi}, \quad (4.75)$$

onde  $\chi_{st}$  é a dissipação escalar no local onde  $f = f_{st}$ ,  $f_{st}$  é a fração de mistura estequiométrica e  $erfc^{-1}$  é o inverso da função de erro complementar. À medida em que a largura da frente de chama diminui, o gradiente de  $f$  na posição estequiométrica aumenta.  $\chi_{st}$  é utilizado, então, como parâmetro de não equilíbrio, sendo que para o seu valor nulo a reação tende ao equilíbrio e a reação se extingue para valores maiores do que o crítico.

Para sistemas adiabáticos, a fração mássica das espécies químicas e a temperatura no interior dos elementos de chama laminares são completamente parametrizados por  $f$  e  $\chi_{st}$ . A fração mássica ponderada pela densidade e a temperatura na chama turbulenta podem ser determinadas pela utilização de PDF de  $f$  e  $\chi$ ,

$$\bar{\phi} = \int \int \phi(f, \chi_{st}) p(f, \chi_{st}) df d\chi_{st}, \quad (4.76)$$

onde  $\phi$  representa a fração mássica das espécies e a temperatura.

No FLUENT, é assumido que  $f$  e  $\chi_{st}$  são estatisticamente independentes, assim a PDF conjunta  $p(f, \chi_{st})$  pode ser simplificada como  $p_f(f)p_\chi(\chi_{st})$ . Uma distribuição  $\beta$  é assumida para a PDF  $p_f$  e equações de transporte para  $\bar{f}$  e  $\overline{f'^2}$  (equações (4.71) e (4.72)) são resolvidas para determinar  $p_f$ . Flutuações em  $\chi_{st}$  são ignoradas, de forma que a PDF de  $\chi$  é uma função delta:  $p_\chi = \delta(\chi - \bar{\chi})$ . Sendo que  $\bar{\chi}$  é modelado como,

$$\bar{\chi}_{st} = \frac{C_\chi \epsilon \overline{f'^2}}{k}, \quad (4.77)$$

onde  $C_\chi$  é uma constante com valor 2.

A integração da equação (4.76) é feita previamente e armazenada em uma tabela de consulta, reduzindo significativamente o tempo das simulações com combustão. Para escoamentos adiabáticos, a tabela tem três entradas,  $\bar{f}$ ,  $\overline{f'^2}$  e  $\chi_{st}$ .

### Geração das tabelas de elementos de chama

Para a geração das tabelas de consulta,  $N$  equações são resolvidas no espaço de fração de mistura para a fração mássica das espécies,  $Z_i$ ,

$$\frac{1}{2} \rho \chi \frac{\partial^2 Z_i}{\partial f^2} + S_i = 0, \quad (4.78)$$

e uma equação para a temperatura,

$$\frac{1}{2} \rho \chi \frac{\partial^2 T}{\partial f^2} - \frac{1}{c_p} \sum_i H_i S_i + \frac{1}{2c_p} \rho \chi \left[ \frac{\partial c_p}{\partial f} + \sum_i c_{p,i} \frac{\partial Z_i}{\partial f} \right] \frac{\partial T}{\partial f} = 0. \quad (4.79)$$

Nestas equações  $Z_i$ ,  $T$ ,  $\rho$  e  $f$  são, respectivamente a fração mássica, a temperatura, a densidade e a fração de mistura da  $i$ ésima espécie.  $c_{p,i}$  e  $c_p$  são o calor específico e o calor específico ponderado pela mistura da  $i$ ésima espécie.  $S_i$  e  $H_i$  são a taxa de reação e a entalpia específica da  $i$ ésima espécie. Sendo que  $S_i$  é determinado por um modelo de cinética química, conforme será explicado na seção seguinte.

A dissipação escalar  $\chi$  é modelada no interior do elemento de chama por uma extensão da equação (4.80) que leva em conta a densidade variável

(Kim e Williams, 1997):

$$\chi(f) = \frac{a_s}{4\pi} \frac{3 \left( \sqrt{\rho_\infty/\rho} + 1 \right)}{2\sqrt{\rho_\infty/\rho} + 1} \exp \left( -2[\operatorname{erfc}^{-1}(2f)]^2 \right), \quad (4.80)$$

onde  $\rho_\infty$  é a densidade na corrente de oxidante.

#### 4.2.2

#### Mecanismo de Cinética Química

No presente trabalho é adotado um mecanismo de cinética química detalhada para a descrição da combustão do Hidrogênio no ar. Embora existam dois elementos químicos envolvidos ( $H_2$  e  $O_2$ ), as reações são relativamente complicadas, pois envolvem diversos passos de reações elementares característicos dos processos de iniciação, propagação, ramificação e término da cadeia de reação. Durante as últimas três décadas, um grande número de mecanismos de cinética química detalhada que incluem o mecanismo de oxidação do hidrogênio foram desenvolvidos. Dentre eles os mecanismo de Li *et al.* (2004) de destaca por obter resultados muito bons em casos de combustão não-pré misturada em condições de pressão e temperatura similares às adotadas no presente trabalho (Mendoza Orbegoso e Figueira da Silva, 2009, Mendoza Orbegoso *et al.*, 2011). No presente trabalho será adotada a versão deste mecanismo recentemente atualizado por Burke *et al.* (2012), visando incorporar novos avanços na determinação de constantes e melhorar a predição em chamas diluídas e a alta pressão. O detalhamento das 19 equações entre as 11 espécies que constituem este modelo encontram-se descritas no Apêndice A. Vale ressaltar que o modelo empregado não prevê a formação de NOx.

#### 4.3

#### Malha Computacional

Nesta seção é apresentada a estratégia adotada para a construção das malhas computacionais estudadas. Como o escoamento medido é axissimétrico optou-se por simular uma fatia de  $20^\circ$  do queimador e utilizar-se de condições de simetria nas faces da fatia, como forma de representar o comportamento de toda a região de interesse.

O primeiro passo é a determinação do domínio computacional a ser utilizado. Por se tratar de um escoamento predominantemente externo, a rigor deve-se estender o domínio até o ponto onde o escoamento se comporte como escoamento potencial. No entanto, caso se adote esta premissa pode-se chegar a um domínio demasiadamente grande. Para se escolher as dimensões do domínio foram considerados (i) os domínios dos trabalhos avaliados na revisão bibliográfica (vide tabela 2.2) e (ii) o fato do presente trabalho estudar chamas

de hidrogênio que, devido à baixa densidade do combustível, tendem a ser mais longas que as de gás natural.

Outro fator a ser ponderado é a presença (ou não) do duto de injeção de combustível no domínio computacional. Estudos anteriores (Novgorodcev, 2003), mostram que a presença de regiões de recirculação na saída do jato perturba o campo de pressão nesta região, podendo ser formada uma pequena zona de recirculação no duto de alimentação do jato. Para se garantir a predição deste comportamento em uma região crítica para a determinação da estrutura do escoamento e, conseqüentemente, da taxa de mistura que domina a combustão, optou-se por manter o duto de admissão do combustível no domínio de cálculo. O domínio adotado, com suas medidas adimensionalizadas, encontra-se representado na figura 4.2. No aparato experimental da PUC os diâmetros característicos são  $D = 60$  mm e  $d = 7,1$  mm.

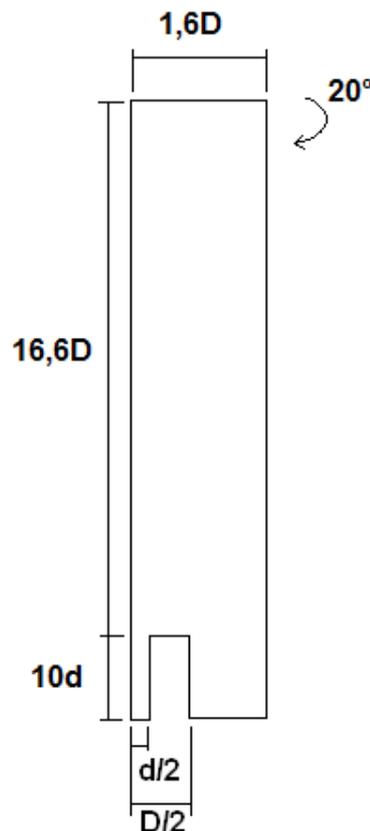


Figura 4.2: Domínio Computacional.

Ao se gerar uma malha hexaédrica para uma fatia, os elementos próximos ao centro terão espessuras muito pequenas, enquanto os da extremidade radial terão espessuras maiores. Caso se aumente o grau de refino, de modo a melhorar o alongamento na direção radial dos elementos do centro pode-se gerar elementos muito alongados na direção transversal próximos da extremi-

dade do domínio. Para equilibrar as dimensões dos elementos é aconselhada a utilização de refino não homogêneo. No entanto, a malha deve ser muito refinada para conseguir preencher o triângulo oculto que se forma na interseção dos planos de simetria (linha de centro), aumentando muito o número de nós utilizado. Para reduzir este problema foi feito um pequeno chanfro na geometria conforme o representado na figura 4.3.

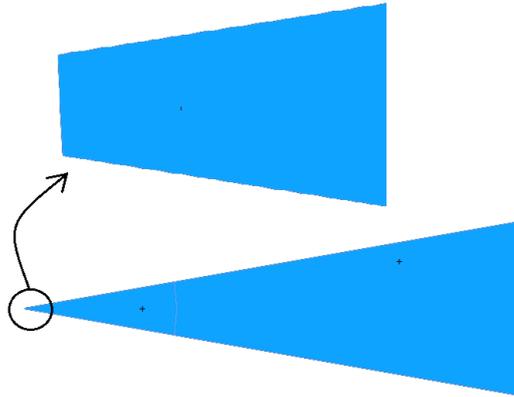


Figura 4.3: Chanfro empregado para melhoria da malha.

Foram confeccionadas 3 malhas de cálculo com auxílio do software ANSYS ICEM CFD, alterando-se os parâmetros de geração e o número de nós. No processo de geração de malha, a mesma foi dividida em setores para se aumentar o controle da qualidade da malha em cada região, com atenção ao duto injetor. Os principais parâmetros adotados no refinamento das malhas encontram-se na tabela 4.2, sendo que os parâmetros estão separados em globais e adotados especificamente no duto injetor.

Tabela 4.2: Sumário dos parâmetros de refino de malha adotados.

Malha n°	Tipo	Refinamentos	
		Global	Duto Injetor
1	Hexa	Proximidade das superfícies	Proximidade das superfícies
2	Hexa/tetra no injetor	Forçar tetra	Curvatura
3	Hexa/tetra no injetor	Forçar tetra - camada de prismas	Curvatura

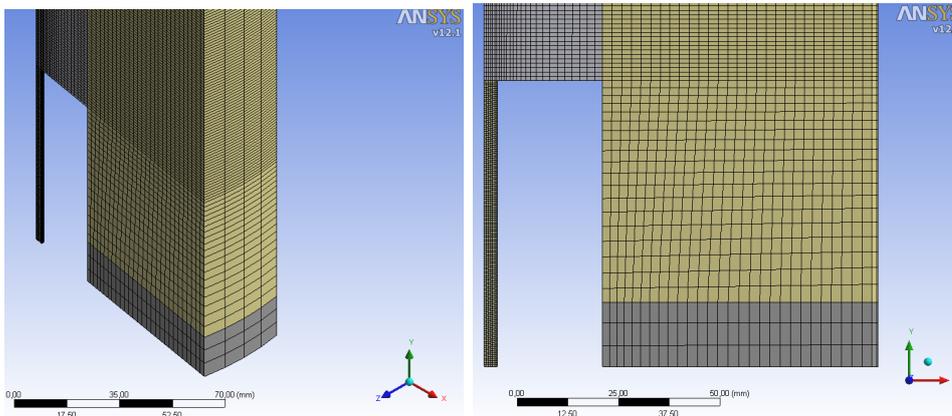
O número de nós e o número de elementos em cada direção estão listados para cada uma das malhas geradas pelos parâmetros descritos na tabela 4.2 encontram-se na tabela 4.3. Nesta tabela a direção circunferencial é denominada circ. enquanto a direção radial é denominada rad. .

Conforme mencionado anteriormente, atenção foi dada à região do duto injetor e à sua interligação com o restante da malha. Estas regiões estão

Tabela 4.3: Sumário das dimensões das malhas de cálculo.

Malha nº	Nº de nós	Nº de elementos			
		Global		Duto	
		rad.	circ.	rad.	circ.
1	260365	54	4	6	4
2	372685	61	6	7	6
3	498539	76	6	11	6

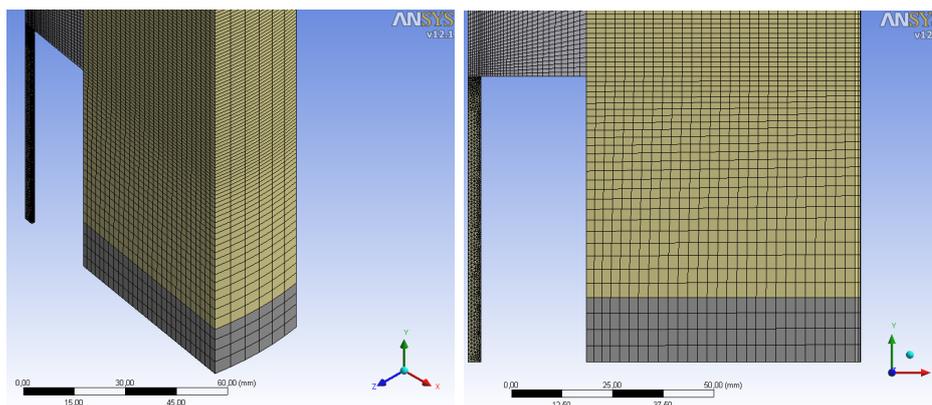
representadas em duas perspectivas nas figuras 4.4, 4.5 e 4.6 para as malhas 1,2 e 3 respectivamente. Nestas figuras é possível contar o número de elementos da malha na direção circunferencial.



4.4(a): Vista Isométrica

4.4(b): Vista no plano Z

Figura 4.4: Malha de cálculo 1.

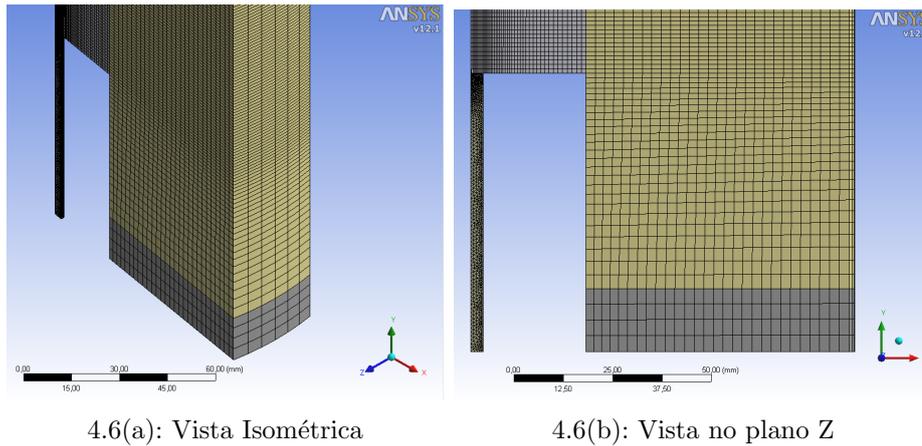


4.5(a): Vista Isométrica

4.5(b): Vista no plano Z

Figura 4.5: Malha de cálculo 2.

A seleção da malha de cálculo a ser adotada no caso reativo se deu por comparação dos resultados de simulações de escoamento inerte em regime permanente, com os resultados experimentais obtidos por Caetano (2012). Os resultados desta seleção encontram-se capítulo 5.2.



4.6(a): Vista Isométrica

4.6(b): Vista no plano Z

Figura 4.6: Malha de cálculo 3.

#### 4.4 Condições de Contorno

As posições das condições de contorno adotadas encontram-se indicadas na figura 4.7.

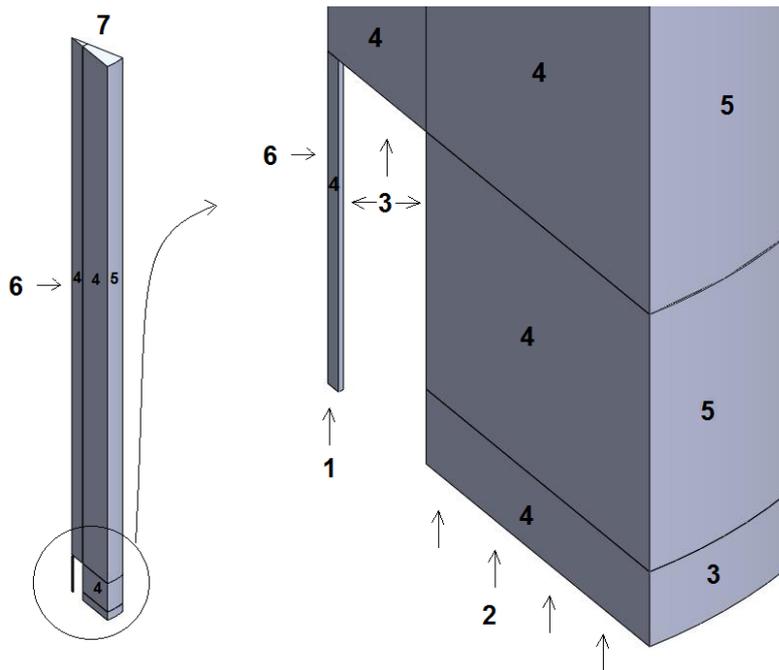


Figura 4.7: Condições de Contorno.

#### Condição 1 - Entrada do gás

Neste plano é imposta entrada com velocidade definida. Esta velocidade é calculada com base na leitura de vazão do rotâmetro de combustível do laboratório e é inserida como um perfil homogêneo. Como a turbulência não é medida, optou-se por arbitrar as escalas de comprimento dos turbilhões ( $l_t$ ) e

intensidade turbulenta ( $I$ ) com base nas seguintes equações tipicamente utilizadas para estimar estas propriedades em escoamentos plenamente desenvolvidos em dutos (ANSYS, 2010b),

$$l_t = 0,07d_h, \quad (4.81)$$

$$I = 0,16Re_{d_h}^{-\frac{1}{8}}, \quad (4.82)$$

onde  $d_h$  é o diâmetro hidráulico. Para a entrada do combustível, o diâmetro hidráulico adotado é o diâmetro do próprio orifício de injeção do combustível ( $d_h = d = 7,1$  mm). Tais estimativas das propriedades que caracterizam a turbulência foram ajustadas interativamente para melhor representar os resultados experimentais. A temperatura adotada nesta condição é a temperatura medida na linha de fornecimento de hidrogênio, após a passagem pelo rotâmetro. As condições de contorno iniciais na entrada do jato podem, então, ser descritas como:

$$\left\{ \begin{array}{l} V_x = 0 \\ V_y = Q_c/A_j \\ V_z = 0 \\ l_t = l_{t1} \approx 0,07d \\ I = I_1 \approx 0,16Re_{d_h}^{-\frac{1}{8}} \\ T = T_{H_2} \end{array} \right. \quad (4.83)$$

Sendo  $Q_c$  a vazão volumétrica de combustível e  $A_j$  a área do duto de injeção do combustível.

### Condição 2 - Entrada do ar anular

Neste plano é imposta entrada com velocidade definida. Esta velocidade foi obtida com auxílio de um anemômetro de fio quente na saída do anular (vide capítulo 3.4.4). As propriedades que definem a turbulência foram estimadas com a mesma metodologia empregada para a entrada do combustível, sendo que o diâmetro hidráulico foi estimado como sendo a diferença entre diâmetro externo do anular (200 mm) e o diâmetro do corpo rombudo ( $D = 60$  mm). Para a temperatura do ar foi admitida a temperatura medida no ambiente ( $T_{amb}$ ) na hora dos experimentos. As condições de contorno iniciais na entrada do anular podem, então, ser descritas como:

$$\left\{ \begin{array}{l} V_x = 0 \\ V_y = V_0 \\ V_z = 0 \\ l_t = l_{t2} \approx 0,07(0,2 - D) \\ I = I_1 \approx 0,16Re_{dh}^{-\frac{1}{8}} \\ T = T_{amb} \end{array} \right. \quad (4.84)$$

### Condição 3 - Paredes

Esta condição corresponde às paredes do corpo rombudo e dos dutos que conduzem o combustível e o ar anular. Foi adotada a condição de não deslizamento. As paredes foram consideradas adiabáticas.

### Condição 4 - Simetria

Esta condição corresponde às faces da fatia de 20° onde o domínio foi cortado. Nestas faces foi adotada a condição de plano de simetria.

### Condição 5 - Abertura

Essas faces correspondem à fronteira externa do domínio (no sentido radial), que é a região mais delicada em termos de estabilidade numérica. Conforme foi exposto na seção anterior, o ideal é que as fronteiras externas situem-se em regiões onde o escoamento se comporte como escoamento potencial. No entanto, foi preciso restringir o domínio a uma região perturbada do escoamento para se reduzir o número de elementos da malha. Logo, esta face foi posicionada em uma região onde pode haver escoamento nos dois sentidos, o que levou à avaliação de diferentes estratégias.

A primeira abordagem foi a adoção da condição de contorno de saída com pressão manométrica ( $\Delta P$ ) especificada, que no FLUENT possibilita a existência de escoamento reverso. Para evitar modificações abruptas da direção do escoamento durante o processo de convergência, um coeficiente de perda é definido para modelar queda de pressão, que corresponderia a uma turbulência de grade ( $f_p$ ). Esta condição exige também a definição da intensidade turbulenta ( $I$ ) e da escala de comprimento dos turbilhões ( $l_t$ ) no escoamento reverso. Esta condição pode, então, ser descrita pelas equações:

$$\left\{ \begin{array}{l} \Delta P = 0 \\ f_p = f_{p5} \\ l_t = l_{t5} \\ I = I_5 \end{array} \right. \quad (4.85)$$

No entanto, a adoção de fronteira com escoamento reverso levou às seguintes dificuldades:

- Necessidade de prescrição de um valor fixo a ser adotado para a intensidade turbulenta e para as escalas de comprimento dos turbilhões no escoamento reverso;
- Tendência a uma maior fluxo de ar no sentido radial do que o encontrado no experimento;
- Introdução de instabilidades numérica, dificultando a convergência.

Para superar tais dificuldades foram testados diferentes valores para os parâmetros impostos nesta condição de contorno, bem como na condição de contorno de saída do domínio (condição 7). Como o fluxo de ar por este plano não afeta significativamente a estrutura da chama, optou-se, então, por testar a condição de contorno de parede sem atrito como uma forma de aumentar a estabilidade numérica e inibir o fluxo de ar no sentido radial. Esta foi a solução que apresentou os melhores resultados e foi a adotada nos casos apresentados no capítulo de resultados.

### **Condição 6 - Chanfro**

Esta face corresponde à face do corte feito no domínio para melhoria da qualidade da malha (vide seção 4.3). Sendo assim, esta face não corresponde a uma fronteira física real do escoamento. Inicialmente foi imposta condição de contorno de parede sem atrito (*freesleep*), no entanto tal condição de contorno levou ao surgimento de uma flutuação de velocidade nas proximidades desta fronteira ao se adotar o modelo RSM e à manutenção, não física, da velocidade inicial na linha de centro do jato no decorrer do domínio computacional ao se adotar os modelos  $k - \omega$  e SST  $k - \omega$ .

Tais discrepâncias nos resultados foram sanadas com a adoção da condição de plano de simetria nesta região.

### **Condição 7 - Saída**

Nesta face é imposta condição de saída com pressão manométrica especificada. Foram testados diferentes valores para esta pressão com o intuito de melhor reproduzir a influência do exaustor presente no laboratório sobre o escoamento. No entanto a condição que apresentou os melhores resultados foi  $\Delta P = 0$ . Na condição de saída é necessária a prescrição de grandezas turbulentas para o escoamento reverso, caso este ocorra. Nesta região não foram realizadas medidas experimentais, mas estima-se que exista baixa intensidade turbulenta, levando à adoção dos seguintes valores:

$$\begin{cases} \Delta P = 0 \\ k = 0,1m^2/s^2 \\ \epsilon = 1m^2/s^2 \end{cases} \quad (4.86)$$

Não foram testadas variações para as propriedades que definem a turbulência no escoamento reverso, pois este escoamento só aparece nos primeiros passos da simulação, não interferindo significativamente na convergência e não influenciando no resultado convergido.

## 5

### Resultados e Discussões

Neste capítulo são inicialmente apresentados os resultados do estudo dos parâmetros de processamento das imagens capturadas nos experimentos. Em seguida é apresentada a comparação dos resultados numéricos com experimentais para escoamentos não reativos. Nesta etapa são comparados resultados obtidos com diferentes malhas e modelos de turbulência, com o intuito de selecionar a combinação de parâmetros que melhor reproduz os resultados experimentais nos casos com escoamento quimicamente inerte.

Por fim são comparados os resultados obtidos experimentalmente e numericamente em presença de combustão com o intuito de avaliar a influência da turbulência sobre a topologia da chama e a capacidade de predição obtida com os métodos numéricos adotados. Nesta seção as chamas obtidas são classificadas de acordo com os diagramas propostos por Huang e Lin (1994) e Caetano *et al.* (2009).

Ao todo são avaliados resultados de 4 configurações experimentais distintas cujos principais parâmetros encontram-se detalhados na tabela 5.1, sendo que os dados dos casos de validação foram obtidos por Caetano (2012) com o mesmo aparato experimental empregado no presente trabalho, porém sem combustão. Estes casos são indicados com o prefixo V, enquanto que os experimentos realizados no âmbito desta dissertação são indicados pela letra H. Nota-se que para as vazões adotadas, apenas o caso V1 é plenamente turbulento. A escolha destas vazões ocorreu devido à limitação da vazão máxima dos rotâmetros disponíveis no laboratório e à grande vazão de hidrogênio necessária para obtenção de um jato plenamente turbulento um orifício com o diâmetro adotado (7,1 mm). O comportamento laminar do jato, esperado nos demais casos, pode provocar dificuldades para a modelagem computacional, visto que a transição entre o regime laminar e o turbulento não é corretamente prevista por modelos de duas equações.

Tabela 5.1: Sumário das configurações experimentais avaliadas.

Caso	Gás	Velocidade no jato	$Re_j$	Velocidade no Anular
V1	$N_2$	13,30 ± 0,90 m/s	6066 ± 425	4 ± 0,01 m/s
V2	$N_2$	4,20 ± 0,25 m/s	1915 ± 135	8 ± 0,02 m/s
H1	$H_2$	15,15 ± 0,61 m/s	1151 ± 56	8,2 ± 0,02 m/s
H2	$H_2$	15,15 ± 0,61 m/s	1151 ± 56	12,0 ± 0,03 m/s

A diferença entre os casos H1 e H2 é a velocidade de ar no anular, uma vez que a vazão de hidrogênio adotada é a máxima possível com a configuração atual do laboratório. A velocidade no anular é controlada pela variação da frequência da alimentação elétrica do motor do soprador de ar. Para os casos H1 e H2, a frequência do soprador foi mantida em 40 e 60Hz, respectivamente.

Os detalhes das condições de contorno adotadas em cada simulação serão apresentadas na medida que os resultados forem discutidos. Uma descrição detalhada da metodologia adotada para a determinação destas condições de contorno encontra-se no capítulo 4.4, enquanto a localização espacial de cada condição encontra-se na figura 4.7.

## 5.1

### Estudo dos Parâmetros de Processamento dos Resultados Experimentais

Conforme exposto no capítulo 3.4.2, a topologia do escoamento, bem como a forma como as partículas são adicionadas, levam à criação de regiões com baixa concentração de partículas nos casos com combustão, o que pode ser visto na figura 3.15. Essa baixa concentração de partículas pode levar à redução da probabilidade de detecção de um vetor deslocamento válido e ao aumento da incerteza dos valores medidos. A utilização de janelas de interrogação maiores pode aumentar a probabilidade de se correlacionar corretamente as partículas, reduzindo-se assim, o número de correlações incertas. Por outro lado, a utilização de janelas maiores reduz a resolução espacial das medições, limitando a escala das flutuações de velocidade captadas, e pode levar ao aumento da incerteza de medição proveniente de gradientes de velocidade no interior da janela. Buscando o compromisso entre resolução e número de vetores espúrios, optou-se pela adoção de processamento multi passo com sobreposição de 50% (estes parâmetros são descritos no cap. 3.4.1), janela inicial de 64x64 *pixels* e pela comparação dos resultados obtidos com janelas de 64x64 e 32x32 no segundo passo.

A primeira linha de janelas de interrogação do PIV, obtida com resolução de 64x64 *pixels* na saída do jato, está representada na figura 5.1. A baixa resolução espacial proporcionada pelas janelas maiores é sentida principalmente na região de interface com o jato, pois 64 *pixels* captam a imagem de 5,5 mm do escoamento, o que equivale a 78% do diâmetro do jato. Levando em conta a sobreposição de 50%, o escoamento na saída do jato é representado por apenas 3 vetores, sendo que apenas o vetor central é calculado pela média do deslocamento no interior do jato, enquanto os demais captam também o deslocamento das partículas na região da esteira formada a jusante do corpo rombudo.

Nos casos H1 e H2, os campos vetoriais gerados com a janela de interroga-

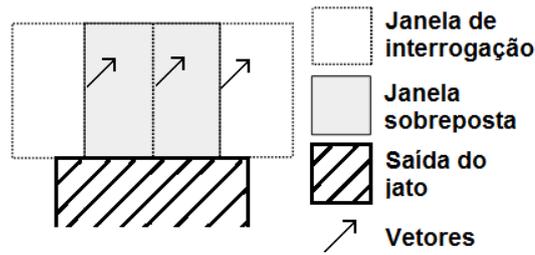


Figura 5.1: Representação das janelas de interrogação com dimensões  $64 \times 64$  *pixels* na saída do jato.

ção de  $32 \times 32$  *pixels* apresentam uma grande concentração de vetores espúrios. Buscando reduzir o número de vetores espúrios, optou-se por adotar dois tipos de filtros no pós processamento, (i) o de banda permitida e (ii) o de remoção de relação de picos. O primeiro filtro permite determinar os valores máximos e mínimos permitidos para os componentes da velocidade, apagando os vetores situados fora desta banda. Os parâmetros para este filtro são escolhidos com base nas velocidades esperadas para este escoamento e ajustados interativamente. Os melhores resultados foram obtidos com a seguinte configuração:

$$\begin{aligned} U_x &= 0 \pm 7m/s; \\ U_y &= 6 \pm 16m/s. \end{aligned} \quad (5.1)$$

Já o filtro de remoção de picos permite remover os vetores que possuem pouca diferença entre o primeiro (P1) e o segundo pico de correlação (P2), calculada pela relação de picos (Q), que é definida como:

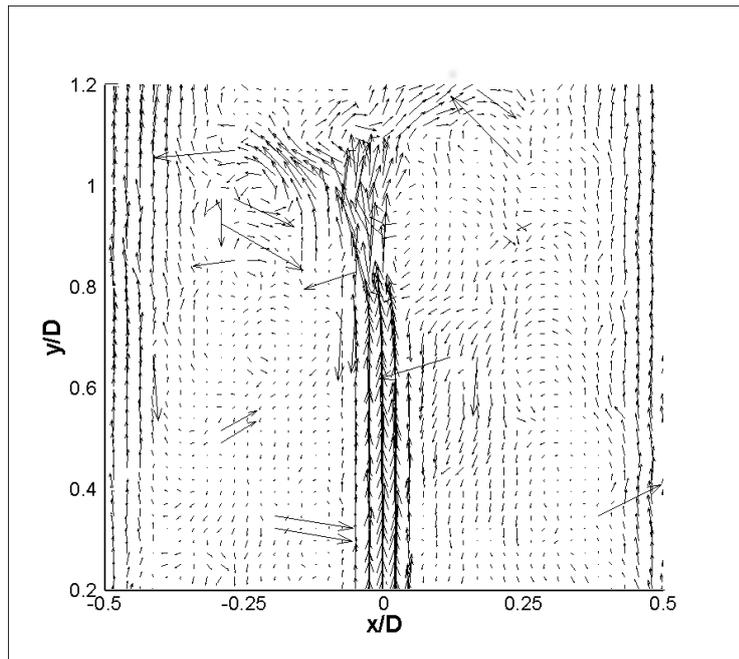
$$Q = \frac{P1 - \min}{P2 - \min}, \quad (5.2)$$

onde *min* é o menor valor de correlação.

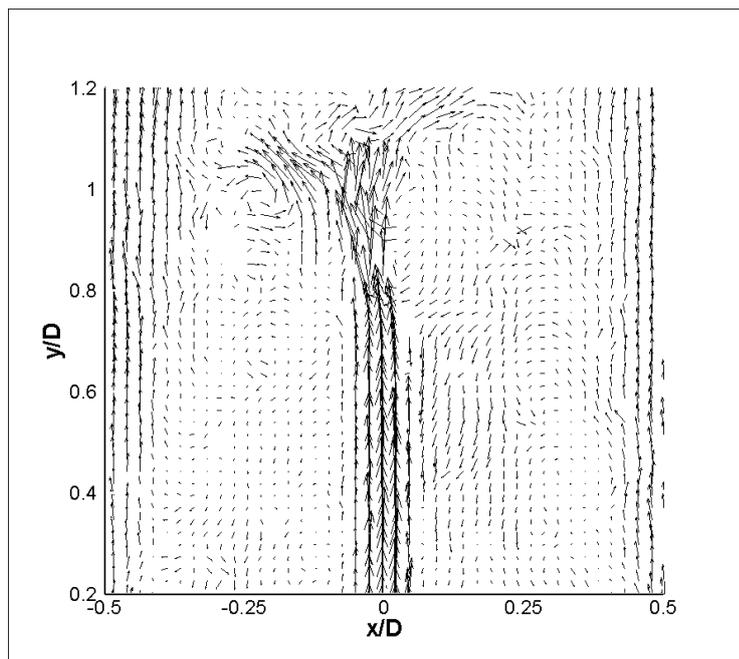
Pequenos valores do fator  $Q$  indicam que o vetor gerado é pouco confiável, sendo assim, este filtro pode ser utilizado para apagar todos os vetores que não sejam suficientemente confiáveis. No entanto, a adoção de valores elevados de  $Q$  neste filtro pode excluir também vetores com boa qualidade. Usualmente são adotados valores para  $Q$  entre 1,2 e 1,5 (LaVision, 2007a). No presente trabalho, após alguns testes, optou-se pela adoção um parâmetro de corte brando ( $Q > 1,1$ ) para se reduzir a remoção de vetores não espúrios.

O resultado da aplicação destes filtros pode ser visto na figura 5.2 onde estão representados os campos vetoriais instantâneos obtidos a partir do caso H2, utilizando-se processamento multi passos com janela final de  $32 \times 32$  *pixels* antes (5.2(a)) e depois (5.2(b)) da aplicação dos filtros. Nestas imagens instantânea pode-se notar que 19 vetores são removidos pelo filtro. O número e a posição dos vetores removidos varia nos 1000 pares de imagens obtidos.

Nestas figuras pode-se notar que os filtros eliminam os vetores espúrios,



5.2(a): uso de janela final 32x32 sem pós processamento.



5.2(b): uso de janela final 32x32 com pós processamento.

Figura 5.2: Campo vetorial obtido com PIV para frequência do soprador 60 Hz e vazão de hidrogênio 2,  $16 \text{ Nm}^3/\text{h}$  (caso H2).

deixando vazios no campo de velocidade. Para minimizar a presença de regiões sem vetores pode-se utilizar a função preenchimento (“*fill up*”) que preenche os locais vazios com a média dos vetores vizinhos. No presente trabalho optou-se pela não utilização desta função, pois a mesma pode gerar resultados inválidos em regiões com variações abruptas de velocidade. Outro fator que leva à não adoção deste procedimento é o grande número de imagens geradas para cada

condição de escoamento (1000 imagens), sendo que a ausência desses vetores é pouco sentida na determinação dos campos médios e, em menor grau de suas variâncias.

Para a realização de uma comparação quantitativa dos parâmetros de pós processamento são traçados perfis à distância de 10 e 60 mm ( $D/6$  e  $D$ ) da superfície do corpo rombudo para os casos H1 e H2 (vazão de hidrogênio igual a  $2,15 Nm^3/h$  e velocidade do ar no escoamento anular de  $8,2$  e  $12 m/s$  respectivamente), conforme apresentado na figura 5.3. Optou-se por realizar esta análise apenas dos casos reativos, por estes serem os casos críticos no que diz respeito à distribuição das partículas traçadoras. Nos resultados os perfis à distância  $D/6$  são representados por símbolos e à distância  $D$  são representados por linhas, variando a forma de acordo com os parâmetros de processamento de imagem, conforme é indicado na legenda de cada figura. Os valores “64x64” e “32x32” indicam o tamanho da janela final no processamento multi passo e o índice “p” indica os resultados com aplicação dos filtros, descritos acima, na etapa de pós processamento.

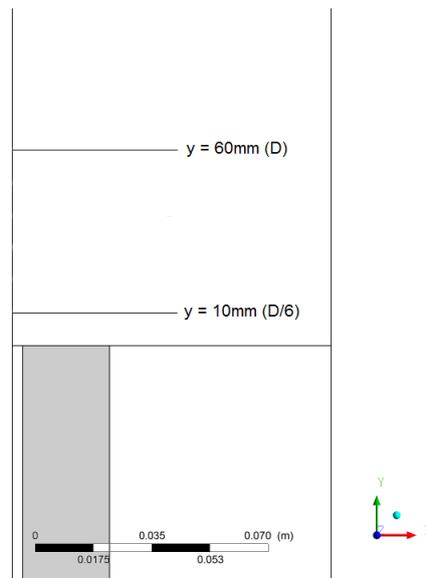


Figura 5.3: Linhas base onde foram traçados os perfis para avaliação dos parâmetros de pós processamento.

Inicialmente são avaliados os efeitos dos parâmetros de pós processamento aplicados ao caso H1. Na figura 5.4 é apresentada a comparação dos perfis de velocidade na direção principal do escoamento ( $U_y$ ) que é a direção da saída do jato e do escoamento anular.

Para  $U_y$ , os resultados obtidos com a janela de  $32 \times 32$  pixels com e sem pós processamento são praticamente idênticos e ambos têm comportamento mais suaves que os resultados para a janela de  $64 \times 64$  na região de recirculação a jusante do corpo rombudo. Este comportamento mais suave pode ser atribuído

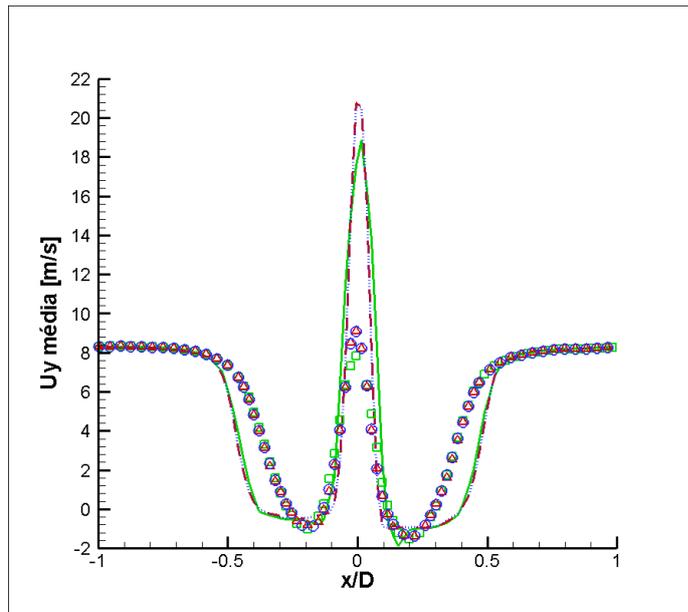


Figura 5.4: Perfis de velocidade na direção principal do escoamento ( $U_y$ ) para o caso H1. —  $y = D/6$  (64x64), - -  $y = D/6$  (32x32), ...  $y = D/6$  (32x32p), □  $y = D$  (64x64), △  $y = D$  (32x32), ○  $y = D$  (32x32p).

à maior resolução espacial dos resultados obtidos com as janelas de interrogação menores. Por esta mesma razão, a máxima velocidade no centro do jato é maior para as janelas mais refinadas. Já a semelhança entre os valores com e sem pós processamento pode ser explicada devido à baixa incidência de vetores espúrios na região central do jato e à aparente baixa influência dos vetores espúrios na média deste componente da velocidade devido ao grande número de imagens geradas.

Outro aspecto a ser notado é a assimetria do escoamento na região de recirculação, chegando a  $0,5 \text{ m/s}$  em  $x/D = 0,5$ . Esta assimetria não era esperada devido à simetria praticamente perfeita do escoamento anular, sendo assim, fruto de alguma imprecisão construtiva do aparato experimental que deverá ser corrigida em trabalhos futuros.

Os resultados do componente  $U_x$ , apresentados na figura 5.5, evidenciam a presença de extremos de velocidade na fronteira do corpo rombudo ( $x = \pm 0,5D$ ) em  $y = D/6$  apenas com o menor tamanho de janela, indicando que a baixa resolução das janelas de  $64 \times 64 \text{ pixels}$  age como um filtro de média nas regiões com grandes gradientes de velocidade (conforme já se havia constatado na análise dos resultados para  $U_y$ ). Tais extremos sofrem uma pequena redução ao se aplicar o pós processamento. Nota-se, também, uma redução das variações espaciais de velocidade em  $y = D$ , gerando um perfil mais suave. Estes comportamentos indicam que a presença de vetores espúrios é mais sentida no componente  $x$  da velocidade, principalmente nas regiões próximas ao corpo

rombudo.

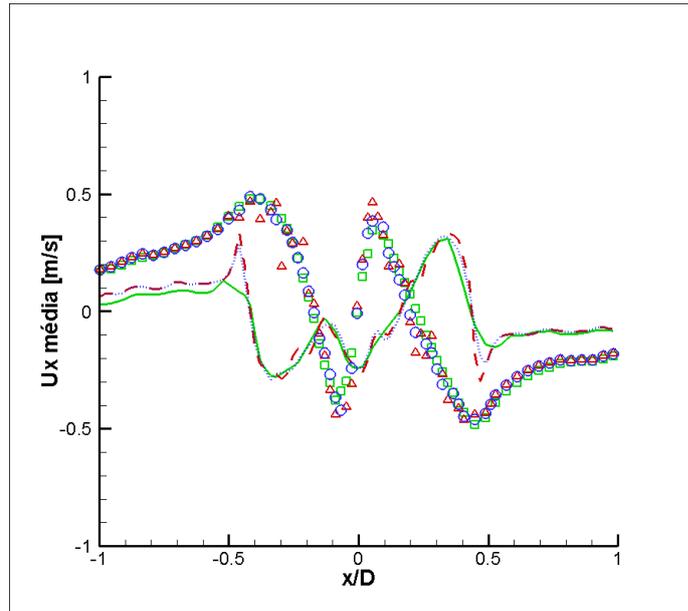


Figura 5.5: Perfis de velocidade na direção transversal do escoamento ( $U_x$ ) para o caso H1. —  $y = D/6$  (64x64), - -  $y = D/6$  (32x32), ...  $y = D/6$  (32x32p),  $\square$   $y = D$  (64x64),  $\triangle$   $y = D$  (32x32),  $\circ$   $y = D$  (32x32p).

Em  $y = D/6$  é possível notar que o componente  $U_x$  da velocidade apresenta um extremo negativo no centro do jato que se reduz ao se afastar em ambos os sentidos, voltando a crescer em  $x/D \cong -0,1$ . Era esperado que este componente da velocidade tivesse valor zero no centro do jato e uma variação com sinais opostos e mesma intensidade ao se afastar do centro (conforme é observado em  $y = D$ ). Tal comportamento pode indicar que há um escoamento transversal próximo à base do jato, sendo compatível com a assimetria detectada para  $U_y$ . Uma outra hipótese para explicar este comportamento é a baixa concentração de partículas nesta região, o que aumenta a incerteza de medição.

Na figura 5.6 mostra-se o efeito observado do pós processamento sobre o componente  $yy$  do tensor de Reynolds na zona de recirculação, onde a baixa concentração de partículas leva à aparição de vetores espúrios que, por sua vez, ampliam artificialmente as flutuações de velocidade que caracterizam o tensor de Reynolds. Em  $y = D/6$ , a influência do tamanho da janela é sentida, principalmente, no centro do jato e na região de esteira, onde a baixa resolução das janelas de 64x64 leva à coexistência de partículas provenientes de zonas com velocidades muito distintas no interior da mesma janela de interrogação, gerando assim flutuações de velocidade fictícias. Ao se afastar do corpo rombudo, o jato tende a se alargar, possibilitando que o mesmo seja melhor capturado com a utilização da janela de maiores dimensões. Estas agem

como um filtro das flutuações, levando a subestimar as componentes do tensor de Reynolds, como pode ser observado em  $y = D$ .

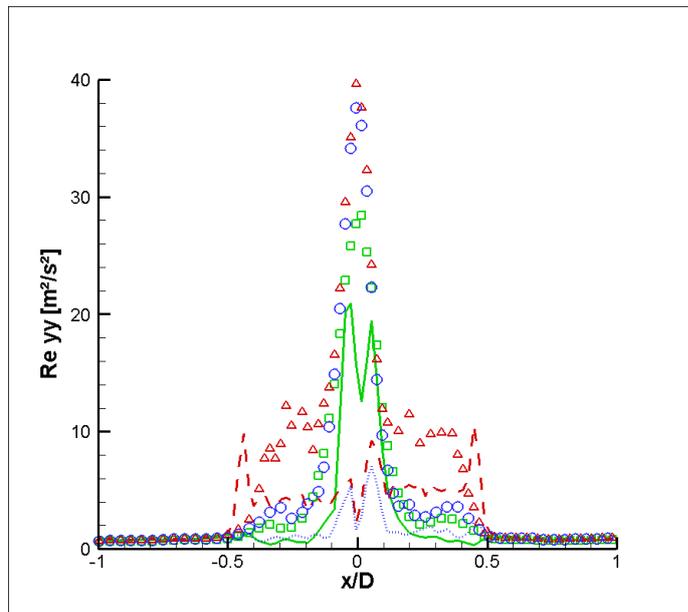


Figura 5.6: Perfis do componente  $yy$  do tensor de Reynolds para o caso H1. —  $y = D/6$  (64x64), - -  $y = D/6$  (32x32), ...  $y = D/6$  (32x32p), □  $y = D$  (64x64), △  $y = D$  (32x32), ○  $y = D$  (32x32p).

Os valores obtidos para o componente  $yy$  do tensor de Reynolds mostraram grande simetria em relação ao centro do jato em  $y = D$  porém, em  $y = D/6$  os valores nas duas fronteiras do jato apresentam uma diferença de até 40% entre si. Tal resultado é mais uma possível consequência da assimetria no escoamento.

A figura 5.7 mostra que os perfis do componente  $xx$  obtidos com a janela 32x32 com pós processamento exibem resultados similares aos da janela 64x64, o que indica que o pós processamento é capaz de reduzir a influência dos vetores espúrios detectados com a janela de 32x32 sem pós processamento. A maior diferença entre o resultado 32x32p e o 64x64 aparece na região de fronteira do jato em  $y = D/6$ . Esta é notadamente a região com menor presença de partículas, o que pode levar ao surgimento de vetores espúrios até mesmo com a utilização da maior janela de interrogação.

No que diz respeito aos perfis do componente  $xy$  do tensor de Reynolds, traçado na figura 5.8, o pós processamento filtra flutuações na região de recirculação nas duas posições de medição. Tais flutuações filtradas apresentam um caráter aleatório, típico da presença de grande número de vetores espúrios, o que pode ser explicado pelo baixo número de partículas presentes nesta região. No entanto, os extremos nas fronteiras do jato em  $y = D$ , mantiveram sua intensidade, indicando que, conforme era desejado, os filtros adotados remo-

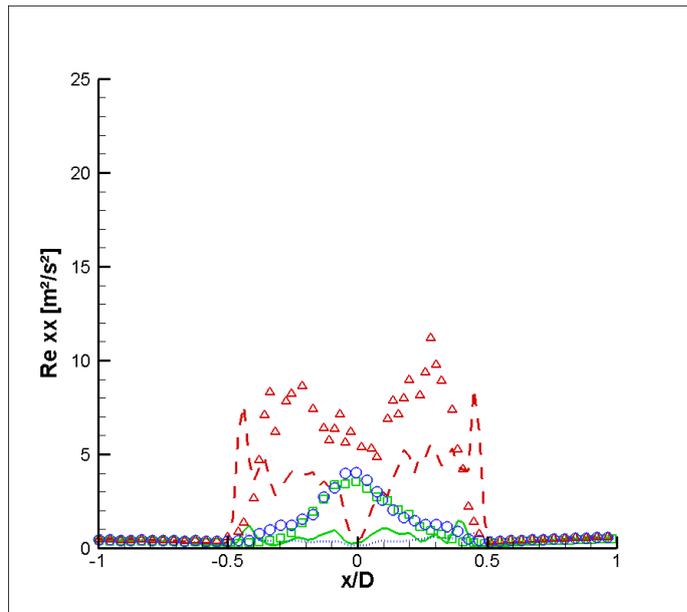


Figura 5.7: Perfis do componente  $xx$  do tensor de Reynolds para o caso H1.  $-\cdot-$   $y = D/6$  (64x64),  $- -$   $y = D/6$  (32x32),  $\dots$   $y = D/6$  (32x32p),  $\square$   $y = D$  (64x64),  $\triangle$   $y = D$  (32x32),  $\circ$   $y = D$  (32x32p).

vem as flutuações espúrias sem com isso reduzir a intensidade das flutuações realmente presentes no escoamento. Os resultados para este componente, bem como o resultados para o componente  $xx$ , apresentam uma boa simetria após aplicação dos filtros, principalmente em  $y = D$ .

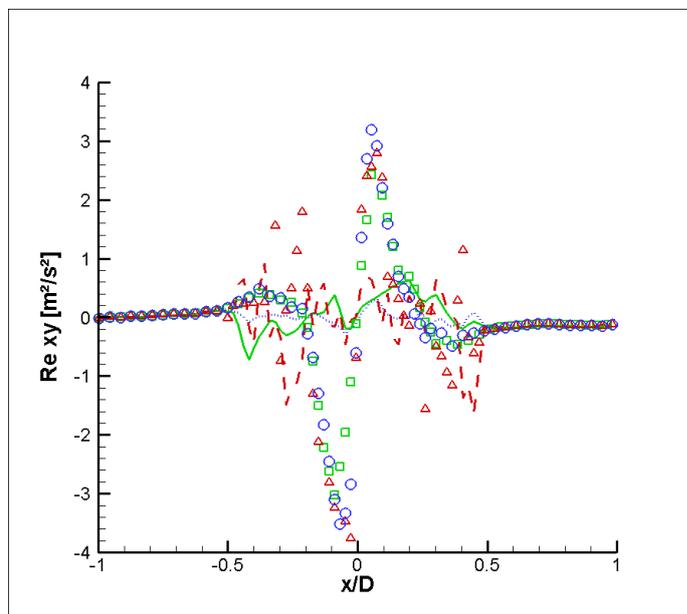


Figura 5.8: Perfis do componente  $xy$  do tensor de Reynolds para o caso H1.  $-\cdot-$   $y = D/6$  (64x64),  $- -$   $y = D/6$  (32x32),  $\dots$   $y = D/6$  (32x32p),  $\square$   $y = D$  (64x64),  $\triangle$   $y = D$  (32x32),  $\circ$   $y = D$  (32x32p).

A aplicação dos filtros descritos gera resultados semelhantes para o caso

H2. Nas figuras 5.9 e 5.10 são apresentadas as comparações dos diferentes parâmetros de pós processamento aplicados aos dois componentes da velocidade, com o mesmo padrão de resultado. Destaca-se o fato do escoamento apresentar uma maior simetria do componente  $U_y$  da velocidade na região de recirculação para  $y = D$ .

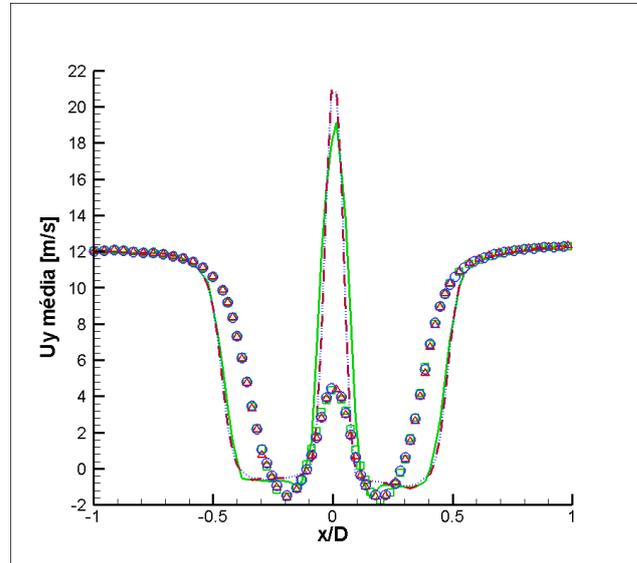


Figura 5.9: Perfis de velocidade na direção longitudinal do escoamento ( $U_y$ ) para o caso H2. —  $y = D/6$  (64x64), - -  $y = D/6$  (32x32), ...  $y = D/6$  (32x32p), □  $y = D$  (64x64), △  $y = D$  (32x32), ○  $y = D$  (32x32p).

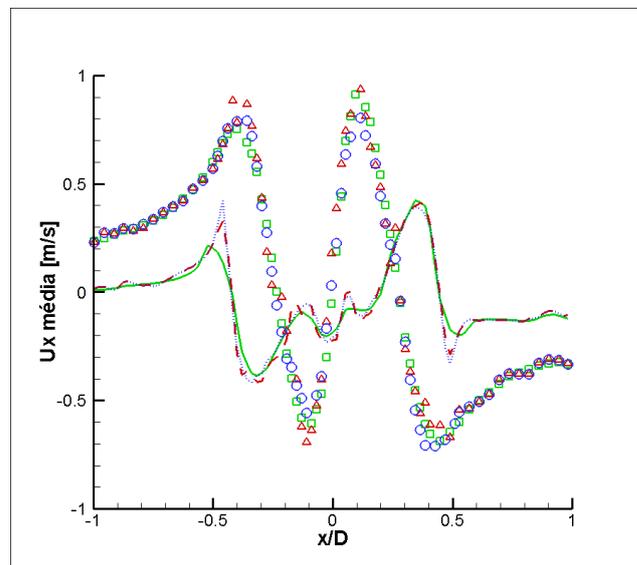


Figura 5.10: Perfis de velocidade na direção transversal do escoamento ( $U_x$ ) para o caso H2. —  $y = D/6$  (64x64), - -  $y = D/6$  (32x32), ...  $y = D/6$  (32x32p), □  $y = D$  (64x64), △  $y = D$  (32x32), ○  $y = D$  (32x32p).

Nas figuras 5.11, 5.12 e 5.13 estão representados os perfis dos três componentes do tensor de Reynolds. A utilização dos filtros resulta em um

efeito semelhante ao obtido para o caso H1, sendo que os resultados não filtrados dos componentes  $yy$  e  $xx$  para a janela de  $32 \times 32$  apresentam mais que o dobro da intensidade encontrada na região de recirculação no caso H1.

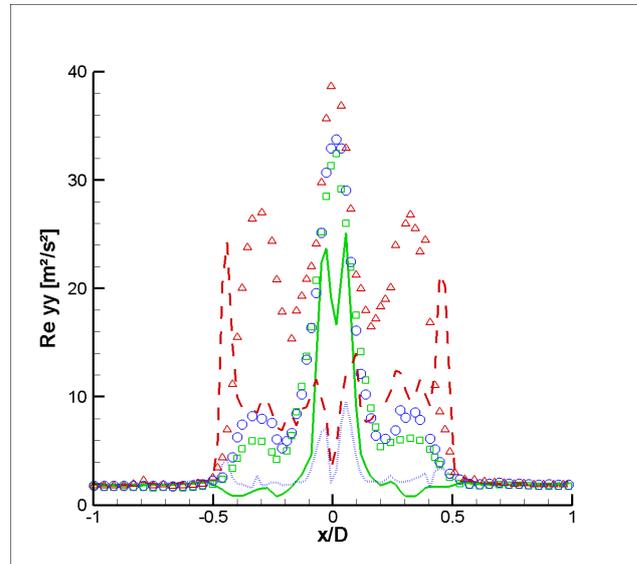


Figura 5.11: Perfis do componente  $yy$  do tensor de Reynolds para o caso H2.  $-$   $y = D/6$  (64x64),  $- -$   $y = D/6$  (32x32),  $\dots$   $y = D/6$  (32x32p),  $\square$   $y = D$  (64x64),  $\triangle$   $y = D$  (32x32),  $\circ$   $y = D$  (32x32p).

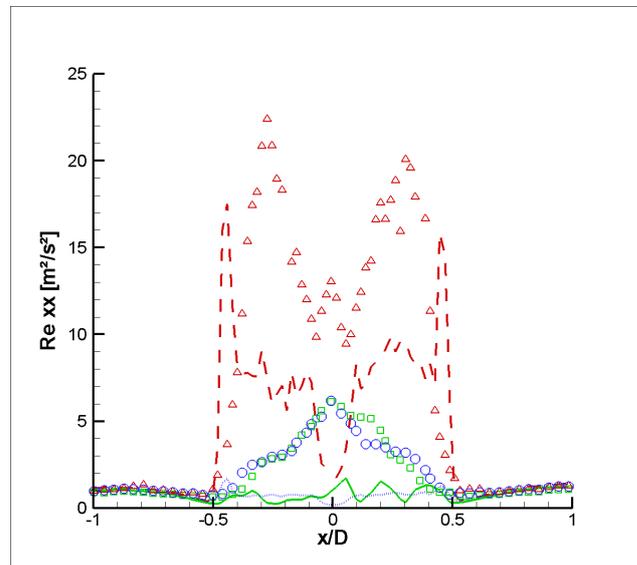


Figura 5.12: Perfis do componente  $xx$  do tensor de Reynolds para o caso H2.  $-$   $y = D/6$  (64x64),  $- -$   $y = D/6$  (32x32),  $\dots$   $y = D/6$  (32x32p),  $\square$   $y = D$  (64x64),  $\triangle$   $y = D$  (32x32),  $\circ$   $y = D$  (32x32p).

A análise dos resultados mostra que, para ambos os casos, a janela de  $64 \times 64$  *pixels* apresenta um menor número de vetores espúrios, mas, por outro lado, a sua baixa resolução prejudica a medição dos componentes do tensor de Reynolds, principalmente em regiões com grande gradiente de velocidade.

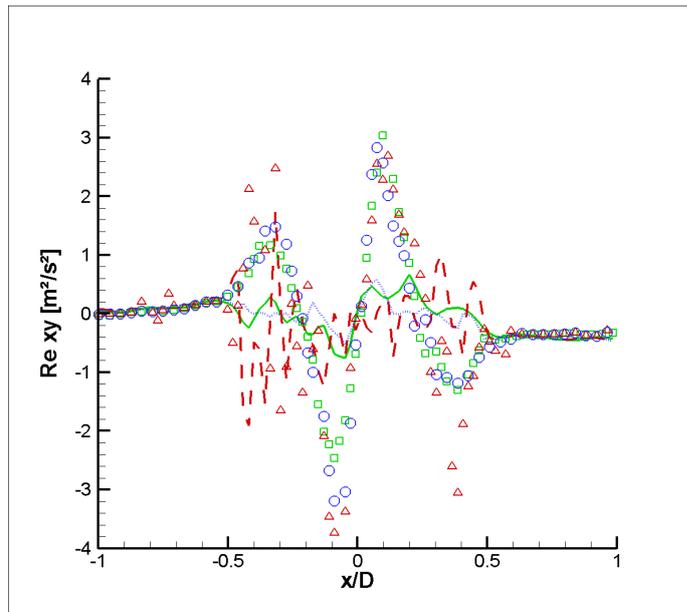


Figura 5.13: Perfis do componente  $xy$  do tensor de Reynolds para o caso H2. —  $y = D/6$  (64x64), - -  $y = D/6$  (32x32), ...  $y = D/6$  (32x32p), □  $y = D$  (64x64), △  $y = D$  (32x32), ○  $y = D$  (32x32p).

Já a janela de 32x32 *pixels* tem maior resolução para capturar os fenômenos turbulentos, no entanto este tamanho de janela leva ao surgimento de grande número de vetores espúrios. A presença destes vetores espúrios leva à elevação do valor medido dos componentes do tensor de Reynolds. A utilização de janelas de 32x32 com pós processamento possibilita a eliminação dos vetores espúrios com maiores módulos, melhorando significativamente a qualidade das medições dos componentes do tensor de Reynolds. Vale ressaltar que foram avaliados diversos parâmetros de pós-processamento e que os resultados apresentados correspondem à melhor combinação destes parâmetros. São estes os parâmetros de pós processamento selecionado para a análise dos resultados experimentais no restante deste trabalho.

## 5.2 Estudo de Malha Computacional

O modelo de turbulência adotado para o estudo de malha computacional é o  $K - \epsilon$  com lei de parede padrão. Outros modelos serão avaliados na seção seguinte. Nesta etapa os resultados obtidos com as diferentes malhas, descritas no capítulo 4.3, são comparados com os resultados experimentais do caso V1 obtidos por Caetano (2012). As condições de contorno de velocidade do ar e do combustível foram fornecidas por este autor, enquanto, as grandezas que caracterizam a turbulência (intensidade turbulenta -  $I$  e escala de comprimento da turbulência -  $l_t$ ) foram estimadas conforme metodologia apresentada no ca-

pítulo 4.4 e corrigidas iterativamente, resultando nas condições apresentadas na tabela 5.2. As demais condições de contorno encontram-se especificadas no capítulo 4.4.

Tabela 5.2: Sumário das condições de contorno adotadas para o caso V1.

	Entrada de combustível	Entrada de ar no anular
$U_x$	0	0
$U_y$	13,0 m/s	4,0 m/s
$U_z$	0	0
$l_t$	0,001m	0,01m
$I$	5%	5%

São apresentados perfis dos componentes  $x$  e  $y$  da velocidade, bem como dos componentes  $xx$ ,  $xy$  e  $yy$  do tensor de Reynolds em quatro linhas com 48 mm ( $0,8D$ ) de comprimento distantes 20, 40, 60 e 80 mm do corpo rombudo ( $y = D/3$ ,  $2D/3$ ,  $D$  e  $4D/3$  respectivamente) e em uma linha com 80 mm ( $4D/3$ ), percorrendo o centro do jato a partir de sua origem, conforme mostra a figura 5.14. Não foram avaliados resultados em  $y = D/6$  (como na seção anterior), pois quanto mais próximo do corpo rombudo, menor a quantidade de partículas e maior a influência da luz refletida pelo corpo. Sendo assim, esta posição foi considerada interessante para a avaliação dos métodos de pós-processamento, mas descartada para os próximos passos devido à maior incerteza associada.

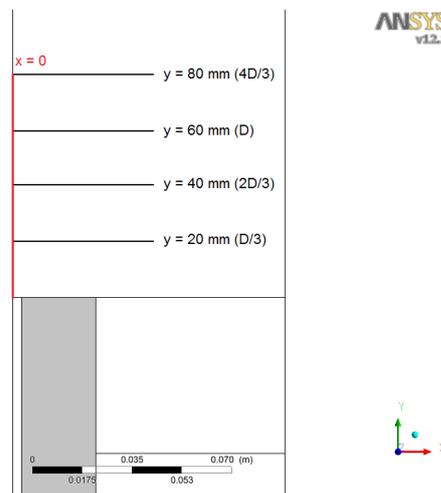
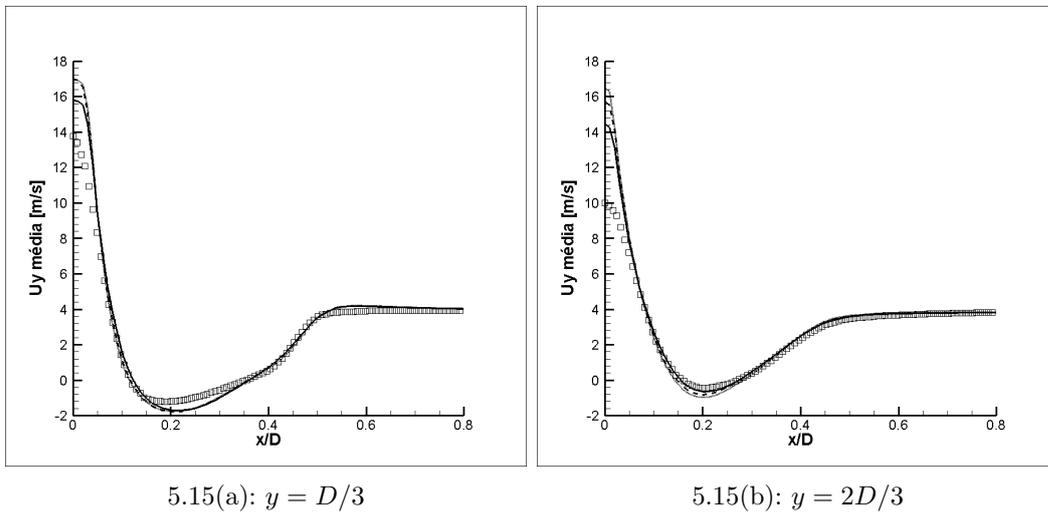


Figura 5.14: Linhas base para traçar os perfis de velocidade e componentes do tensor de Reynolds na presente seção.

Nas figuras 5.15 e 5.16 estão representados os componentes da velocidade na direção longitudinal ( $U_y$ ) obtidas nas 4 linhas transversais ao escoamento. Os resultados numéricos indicam velocidades no centro do jato superiores aos valores experimentais em todos os perfis. Estes resultados podem indicar que a

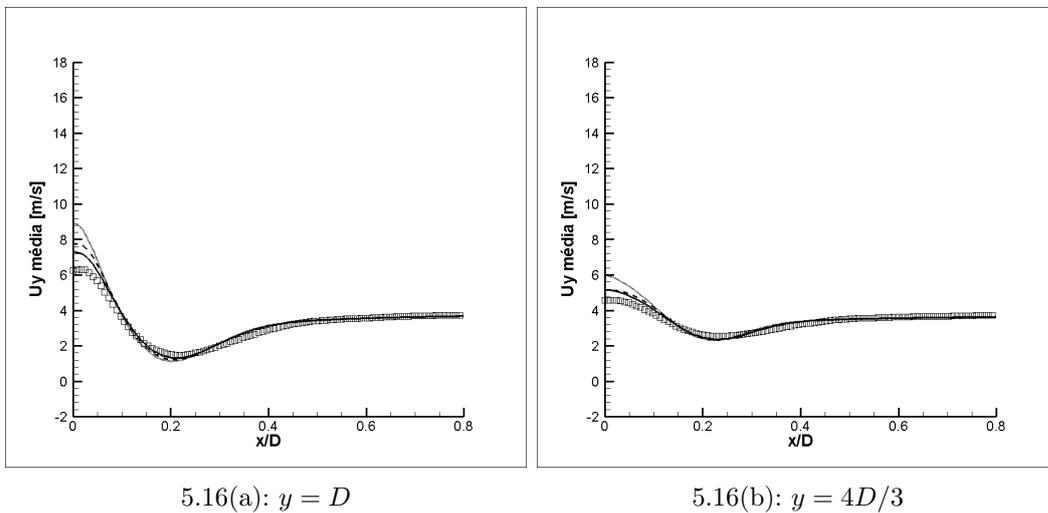
velocidade imposta como condição de entrada para o jato está superestimada, ou que a velocidade calculada no centro do jato tem um decaimento mais lento, devido à uma baixa taxa de mistura na fronteira do jato. Ao se afastar do centro a concordância aumenta, obtendo-se bons resultados para todas as 3 malhas avaliadas.



5.15(a):  $y = D/3$

5.15(b):  $y = 2D/3$

Figura 5.15: Perfis de velocidade na direção  $y$  para o caso V1 em  $y = D/3$  e  $y = 2D/3$ . — malha 1, - - malha 2, ... malha 3, □ experimental (Caetano, 2012).



5.16(a):  $y = D$

5.16(b):  $y = 4D/3$

Figura 5.16: Perfis de velocidade na direção  $y$  para o caso V1 em  $y = D$  e  $y = 4D/3$ . — malha 1, - - malha 2, ... malha 3, □ experimental (Caetano, 2012).

Para melhor avaliar a diferença encontrada na predição do componente  $y$  da velocidade no centro do jato, são apresentados, na figura 5.17, perfis deste componente ao longo da linha de centro do jato. Para  $y/D < 0,05$  os resultados experimentais são claramente inválidos, não permitindo a obtenção da velocidade na saída do jato. No entanto, estes perfis confirmam que  $U_y$

apresenta valores calculados superiores aos experimentais a partir de  $y/D = 0,05$  e mostram, ainda, que o centro do jato se mantém pouco perturbado até a distância  $y = 0,6D$ , enquanto os resultados experimentais indicam que o mesmo é perturbado desde a sua origem. Tal comportamento indica que a intensidade turbulenta pode estar subestimada na saída do jato, hipótese que será avaliada a seguir com auxílio dos perfis dos tensores de Reynolds. Nestes resultados fica claro que a malha 1 apresentou a melhor predição da velocidade no centro do jato, o que está de acordo com os perfis apresentados nas figuras 5.15 e 5.16.

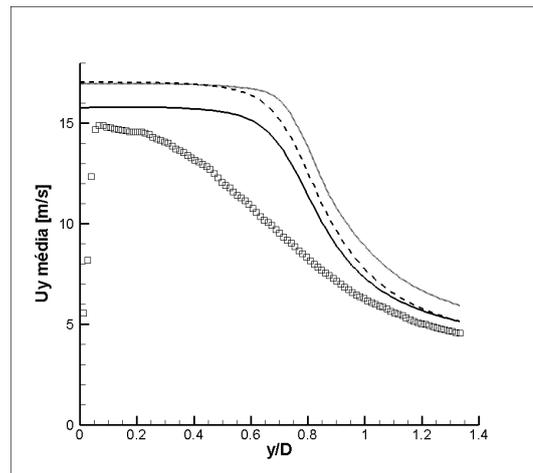


Figura 5.17: Evolução da velocidade na direção  $y$  ao longo da linha de centro para o caso V1. — malha 1, - - malha 2, ...malha 3, □ experimental (Caetano, 2012).

Nas figuras 5.18 e 5.19 está representado o componente transversal da velocidade ( $U_x$ ). Os resultados numéricos apresentam maior valor que os experimentais após a fronteira do corpo rombudo ( $x > D/2$ ), indicando que há um maior fluxo de ar da região do anular para o centro do jato. Já nas proximidades do jato ( $x \approx 0,05D$ ), os resultados das simulações apresentam valores menores, o que pode indicar um menor deslocamento do fluido do jato em direção radial, ou seja uma menor dispersão do jato. Tais resultados estão em concordância com os resultados obtidos para o componente  $y$  da velocidade. Em todas as posições, a velocidade calculada no centro do jato é nula, o que era esperado, devido à adoção da condição de simetria em um escoamento médio. No entanto, tal resultado não se repetiu nas medições, o que pode ser consequência (i) de assimetria no escoamento experimental, (ii) incertezas de medição ou ainda (iii) um deslocamento entre o centro do jato e a origem fixada no experimento. Ambas as malhas captaram a tendência do escoamento, com aproximadamente o mesmo erro, não sendo possível determinar qual a melhor malha com base em  $U_x$ .

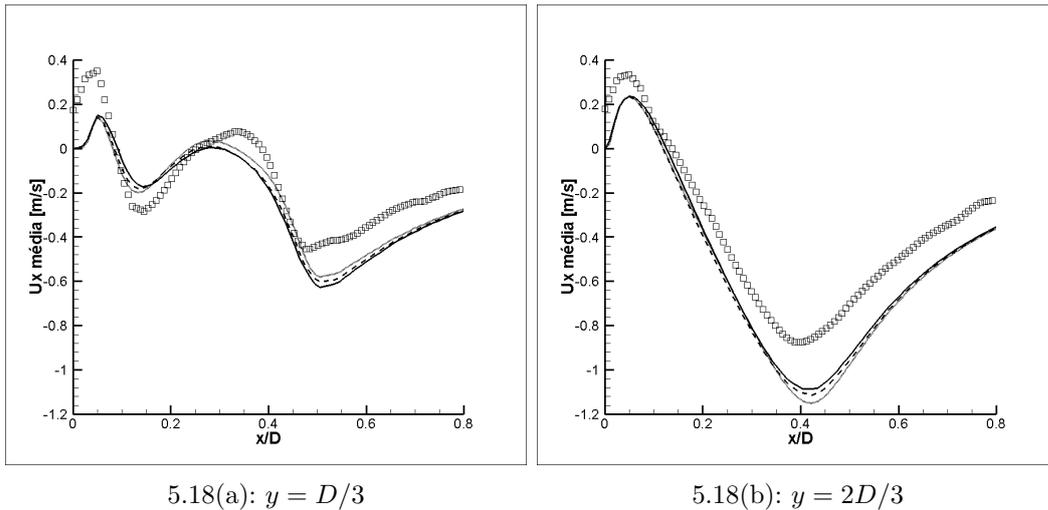


Figura 5.18: Perfis de velocidade na direção  $x$  para o caso V1 em  $y = D/3$  e  $y = 2D/3$ . — malha 1, - - malha 2, ... malha 3, □ experimental (Caetano, 2012).

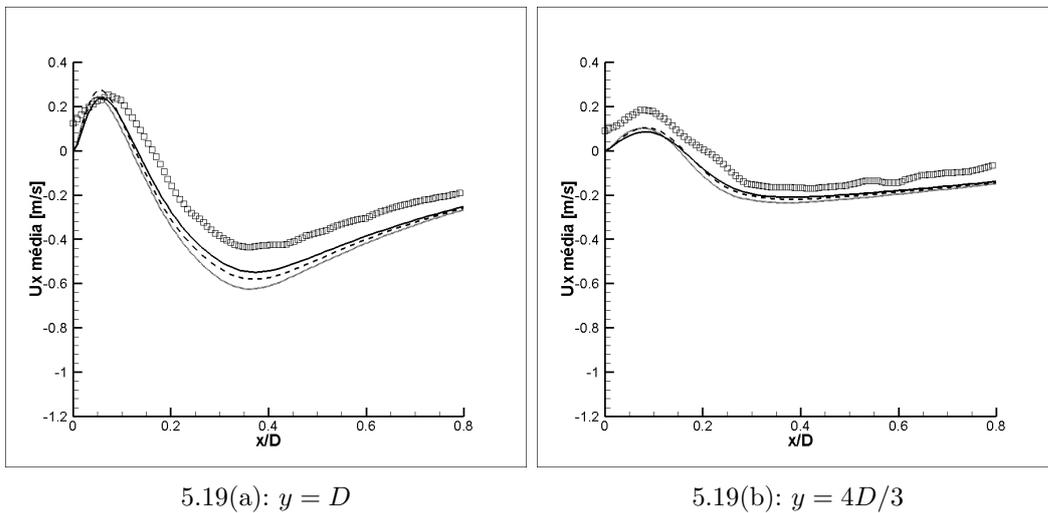


Figura 5.19: Perfis de velocidade na direção  $x$  para o caso V1 em  $y = D$  e  $y = 4D/3$ . — malha 1, - - malha 2, ... malha 3, □ experimental (Caetano, 2012).

A partir dos campos instantâneos medidos, Caetano (2012) calculou os componentes do tensor de Reynolds, como forma de caracterizar as flutuações turbulentas. As médias experimentais não contemplaram a terceira dimensão ( $z$ ), sendo assim foram calculados apenas os componentes  $xx$ ,  $xy$  e  $yy$  do tensor de Reynolds. Já os resultados numéricos foram obtidos com um modelo de duas equações, que utiliza a hipótese de Boussinesq descrita no capítulo 4.1.1, e sendo assim não calculam diretamente os componentes do tensor de Reynolds. No entanto, conhecendo as derivadas dos componentes da velocidade, a energia cinética turbulenta e a viscosidade turbulenta, propriedades estas calculadas pelos modelos  $K - \epsilon$ , é possível estimar os três componentes do tensor de Reynolds com auxílio da equação (4.13).

Nas figuras 5.20 e 5.21, são apresentados os perfis do componente  $yy$  do tensor de Reynolds. Este componente apresentou boa concordância entre os valores numéricos e experimentais na região de mistura para os dois primeiros perfis, com exceção da vizinhança do centro do jato,  $x/D < 0,05$ , onde os resultados numéricos subestimam os valores experimentais. Já em  $y = D$ , os resultados numéricos apresentam os maiores valores nesta região, enquanto os resultados experimentais decaem em relação ao perfil anterior, o que gera um erro de 100% para a malha 1 e ainda maior para as malhas 2 e 3. Em  $y = 4D/3$ , esta diferença se reduz para 50% para as três malhas. Já para  $x > D/4$ , a intensidade deste componente do tensor é subestimada, indicando que a modelagem numérica tem caráter mais dissipativa que o escoamento medido.

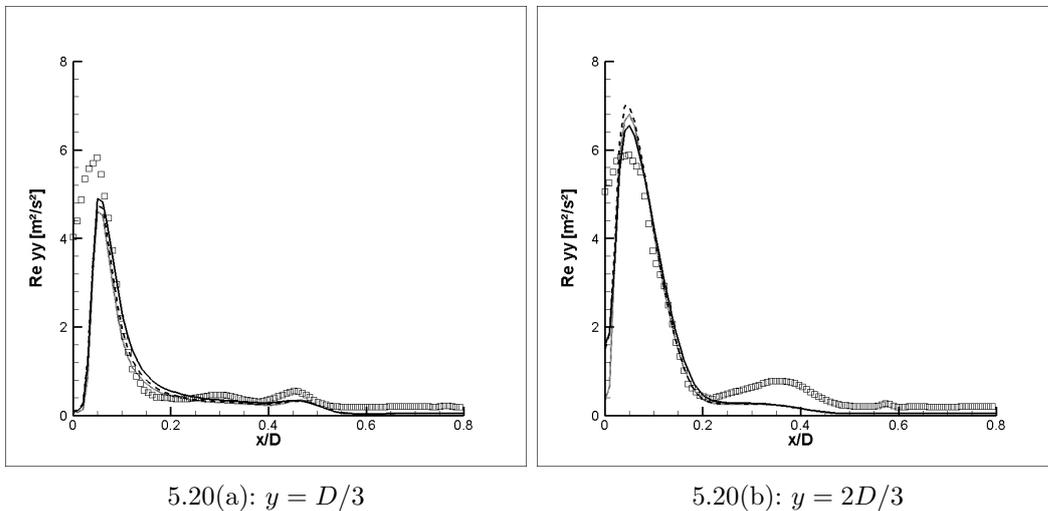


Figura 5.20: Perfis do componente  $yy$  do tensor de Reynolds para o caso V1 em  $y = D/3$  e  $y = 2D/3$ . — malha 1, - - malha 2, . . . malha 3, □ experimental (Caetano, 2012).

Conforme apresentado na figura 5.22, no centro do jato, o componente  $Re_{yy}$  tem valor zero calculado de sua saída ( $y = 0$ ) até  $y = 0,5D$ , onde ocorre um aumento brusco da intensidade. Após  $y = 0,7D$  o valor calculado deste componente é superior ao experimental chegando a mais que o dobro do valor em  $y = D$ . Neste ponto a malha 1 apresenta um desempenho um pouco melhor que as demais, por apresentar um menor extremo de intensidade do componente  $Re_{yy}$ . Este comportamento é um indicativo de que a simulação resulta em laminarização espúria do escoamento no duto que leva à entrada do jato na região de esteira.

Nas figuras 5.23 e 5.24 estão representados os perfis do componente  $xx$  do tensor de Reynolds. O valor calculado deste componente foi superestimado na região de mistura para todas as malhas, chegando a ser 3 vezes maior que

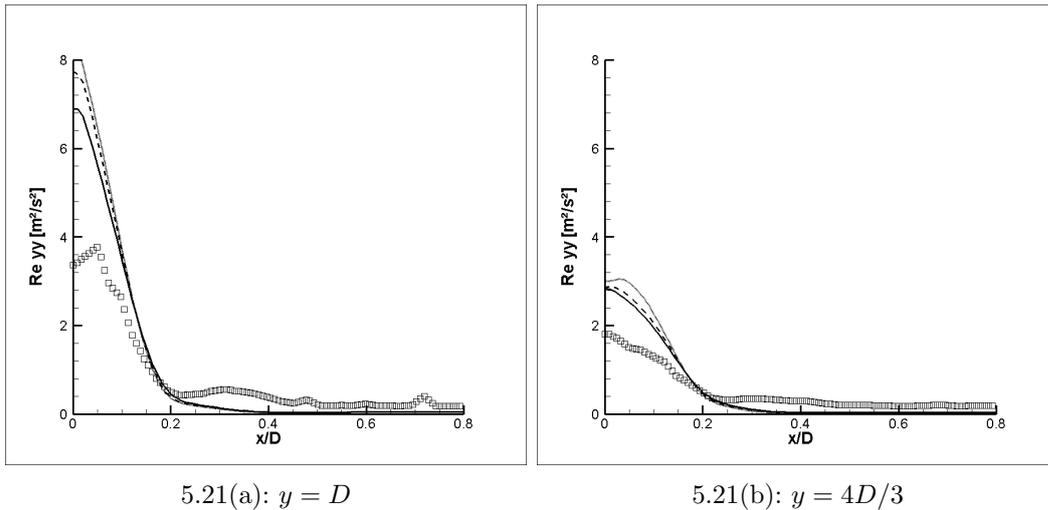


Figura 5.21: Perfis do componente  $yy$  do tensor de Reynolds para o caso V1 em  $y = D$  e  $y = 4D/3$ . — malha 1, - - malha 2, ... malha 3, □ experimental (Caetano, 2012).

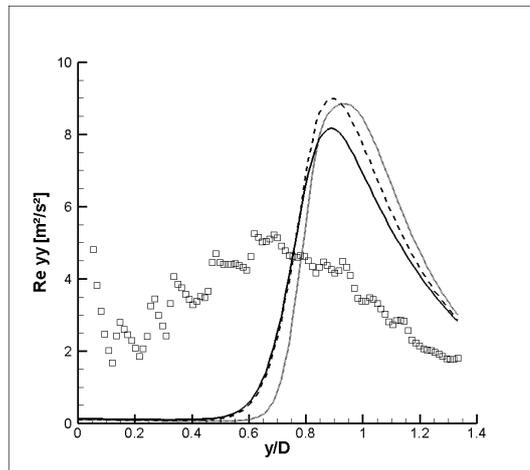


Figura 5.22: Evolução do componente  $yy$  do tensor de Reynolds ao longo da linha de centro para o caso V1. — malha 1, - - malha 2, ... malha 3, □ experimental (Caetano, 2012).

o valor medido em  $Y = 2D/3$ . A malha 1 apresentou resultados um pouco melhores em  $y = 2D/3$  e  $y = D$ . Já a malha 3 apresentou os piores resultado para os dois perfis mais a jusante do escoamento.

Conforme apresentado na figura 5.25, o comportamento do componente  $xx$  do tensor de Reynolds medido ao longo da linha de centro é muito similar ao do componente  $yy$ , o que indica a validade da hipótese de Boussinesq nos experimentos. No entanto este componente possui valores medidos próximos de zero na saída do jato que aumentam lentamente até atingir o seu máximo  $y/D = 0,75$ . Sendo assim, o erro calculado nas proximidades da saída do jato aparentemente é menor que o do componente  $yy$ . Porém, vale lembrar que

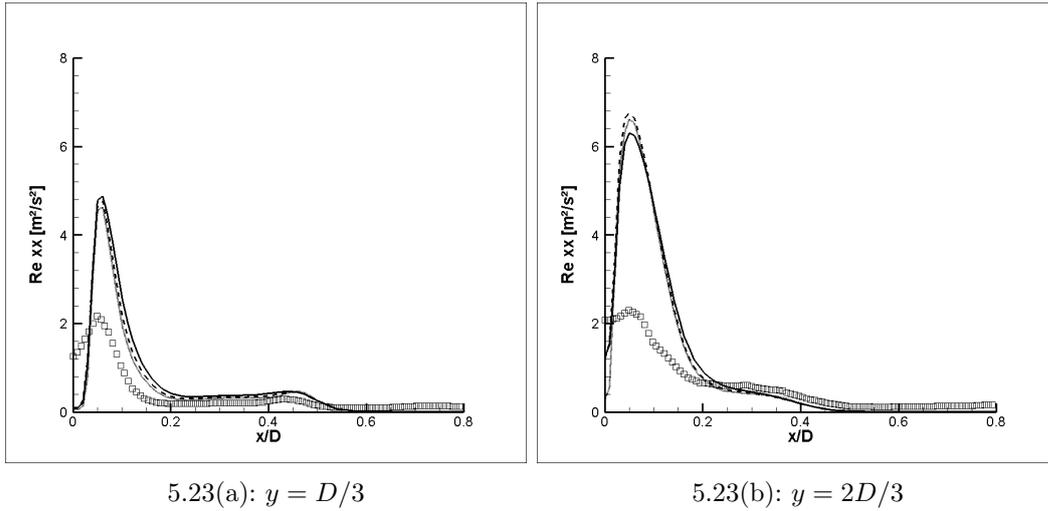


Figura 5.23: Perfis do componente  $xx$  do tensor de Reynolds para o caso V1 em  $y = D/3$  e  $y = 2D/3$ . — malha 1, - - malha 2, ... malha 3, □ experimental (Caetano, 2012).

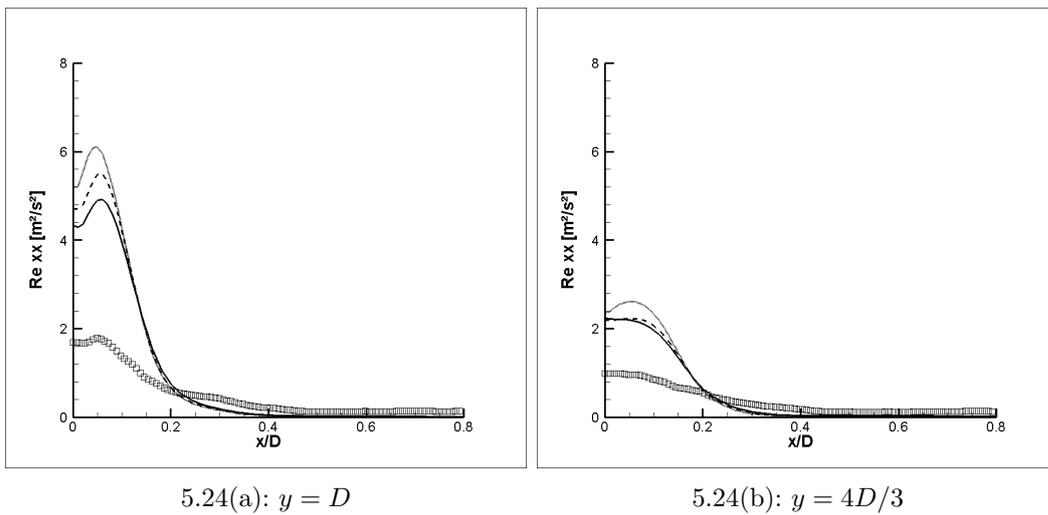


Figura 5.24: Perfis do componente  $xx$  do tensor de Reynolds para o caso V1 em  $y = D$  e  $y = 4D/3$ . — malha 1, - - malha 2, ... malha 3, □ experimental (Caetano, 2012).

as medições realizadas nas proximidades do corpo rombudo apresentam maior incerteza de medição, conforme pode ser constatado pela evolução de  $U_y$  na linha de centro (figura 5.17), impossibilitando uma análise precisa nesta região.

Os perfis do componente  $xy$  do tensor de Reynolds apresentam comportamento similar ao do componente  $xx$  na região de mistura do jato, porém com erro relativo menor, conforme pode ser visto nas figuras 5.26 e 5.27. As medições experimentais apresentaram valores negativos entre  $x/D = 0,2$  e  $0,4$  e no centro do jato, já os resultados numéricos indicaram valores positivos próximos a zero nestas regiões. A malha 1 apresentou, novamente, resultados um pouco

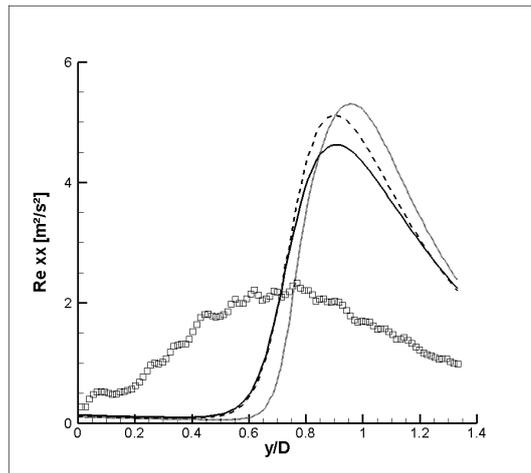
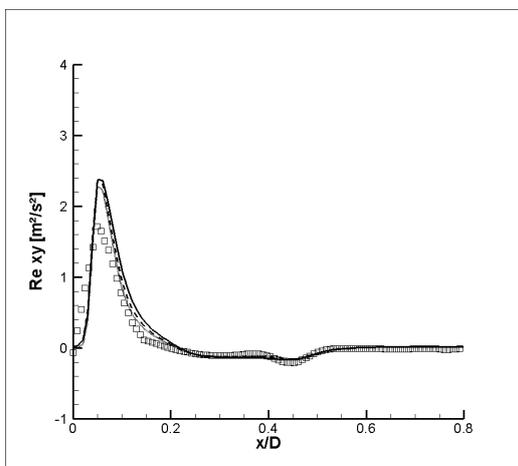
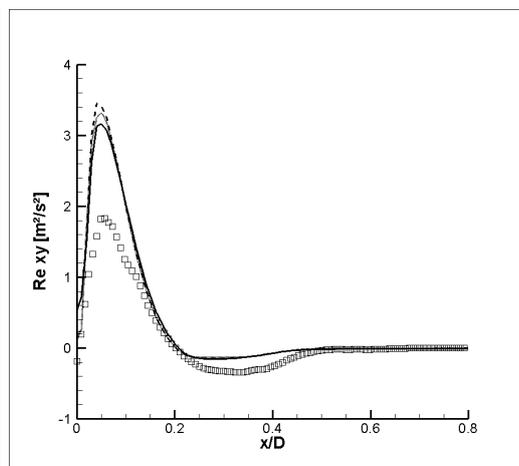


Figura 5.25: Evolução do componente  $xx$  do tensor de Reynolds ao longo da linha de centro para o caso V1. — malha 1, - - malha 2, ... malha 3, □ experimental (Caetano, 2012).

melhores que as demais malhas em  $y = 2D/3$  e  $y = D$ . Na região externa ao corpo rombudo, os valores calculados são iguais a zero assim, como os valores obtidos por Caetano (2012) nesta região, o que corresponde ao esperado por esta ser uma região com turbulência isotrópica.



5.26(a):  $y = D/3$



5.26(b):  $y = 2D/3$

Figura 5.26: Perfis do componente  $xy$  do tensor de Reynolds para o caso V1 em  $y = D/3$  e  $y = 2D/3$ . — malha 1, - - malha 2, ... malha 3, □ experimental (Caetano, 2012).

Conforme pode ser visto na figura 5.28, no centro do jato, o modelo de turbulência empregado não foi capaz de capturar as características isotrópicas da turbulência no decorrer de toda a linha de centro. Há uma boa concordância até  $y = 0,6D$ , que é o mesmo ponto onde os demais componentes do tensor de Reynolds apresentam um crescimento acentuado dos valores calculados. Na seção seguinte é apresentada a comparação dos modelos de turbulência, onde

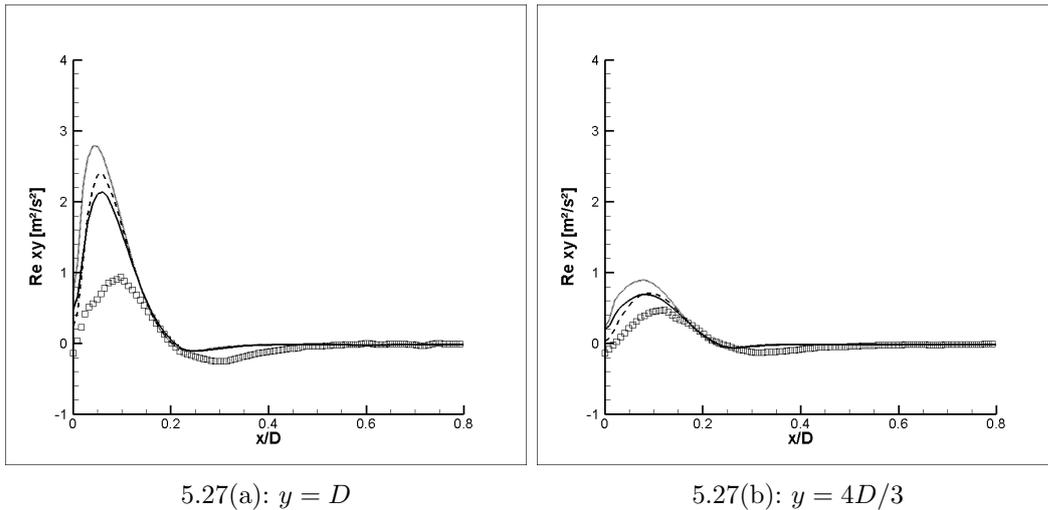


Figura 5.27: Perfis do componente  $xy$  do tensor de Reynolds para o caso V1 em  $y = D$  e  $y = 4D/3$ . — malha 1, - - malha 2, ... malha 3, □ experimental (Caetano, 2012).

é retomada a discussão sobre o motivo pelo qual este componente não é igual a zero em toda extensão da linha de centro, ao se empregar o modelo  $K - \epsilon$ .

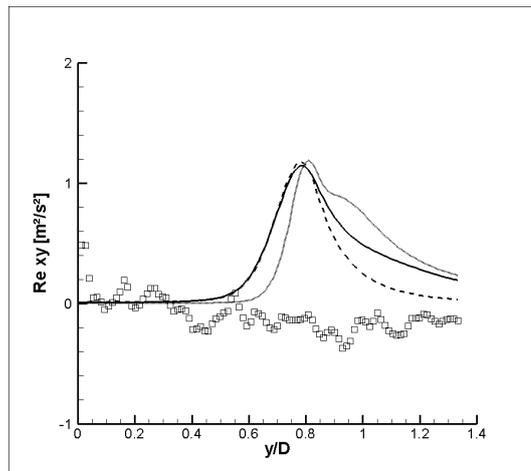


Figura 5.28: Evolução do componente  $xy$  do tensor de Reynolds ao longo da linha de centro para o caso V1. — malha 1, - - malha 2, ... malha 3, □ experimental (Caetano, 2012).

Em suma, as malhas empregadas levaram a uma boa concordância dos resultados numéricos com os experimentais na predição da velocidade na direção  $y$ . A exceção se deu no centro do jato, onde ocorreu uma laminarização do escoamento calculado no interior do duto que leva o combustível à superfície do corpo rombudo, conforme pode ser constatado nos perfis dos componentes do tensor de Reynolds. Tal laminarização faz com que a velocidade nesta região se conserve por uma maior distância. Nesta região a malha 1 foi a que apresentou a melhor concordância.

Uma possível causa desta laminarização do escoamento é o baixo número de elementos de malha na direção radial do duto que leva o combustível à saída do jato. A malha 1 e a malha 2 possuem 6 elementos nesta direção, enquanto a malha 3 possui 11 elementos na direção transversal e a 2 possui 6. Já a malha 1 possui 4 elementos na direção transversal e a 2 possui 6. Já a malha 3 possui 11 elementos no raio e os mesmos 6 elementos na direção transversal. A opção de limitar o número máximo de nós e de utilizar elementos tetraédricos nas malhas 2 e 3, com o intuito de realizar uma melhor transição entre as regiões mais relevantes do escoamento e as demais regiões que possuem malha menos refinada, não resultou em melhorias nos resultados, conforme foi visto nesta seção.

A malha 1 apresentou pequena vantagem na determinação dos componentes do tensor de Reynolds, principalmente em  $y = D$ , no entanto a determinação dos componentes do tensor de Reynolds está vinculada diretamente à escolha do modelo de turbulência, que será abordado com mais detalhes na seção seguinte.

A velocidade calculada na direção  $x$  com ambas as malhas obteve suficiente concordância com os resultados experimentais para os propósitos do presente trabalho, lembrando que são esperados erros experimentais relativamente maiores nesta direção que os encontrados na direção  $y$ , devido à menor velocidade nesta região. A análise deste componente não destacou nenhuma malha. Como a malha 1 apresentou resultados um pouco melhores para as demais propriedades do escoamento e menor custo computacional, a mesma é adotada nas próximas etapas deste trabalho.

### 5.3

#### Seleção do Modelo de Turbulência

Nesta seção são discutidos os resultados obtidos com o emprego da malha selecionada no capítulo anterior (malha 1) e de quatro modelos de turbulência ( $k-\epsilon$ ,  $k-\omega$ , SST  $k-\omega$  e RSM). Os resultados numéricos são comparados com os resultados dos casos V1 e V2, obtidos experimentalmente por Caetano (2012), para a escolha do modelo que melhor se adequa à configuração estudada.

Para o caso V1, as condições de contorno impostas são as mesmas descritas no estudo de malha (tabela 5.2). Já o caso V2 se difere pelas vazões de combustível e de ar do anular, conforme tabela 5.3.

Para avaliar a adequação dos modelos de turbulência aos resultados experimentais são traçados perfis dos componentes  $x$  e  $y$  da velocidade, bem como dos componentes  $xx$ ,  $xy$  e  $yy$  do tensor de Reynolds nas mesmas linhas utilizadas na seção anterior, figura 5.14.

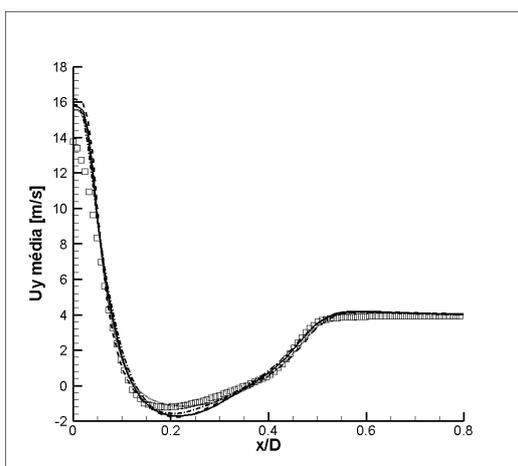
Tabela 5.3: Sumário das condições de contorno adotadas para o caso V2.

	Entrada de combustível	Entrada de ar no anular
$U_x$	0	0
$U_y$	4,2 m/s	8,0 m/s
$U_z$	0	0
$l_t$	0,001m	0,01m
$I$	2%	10%

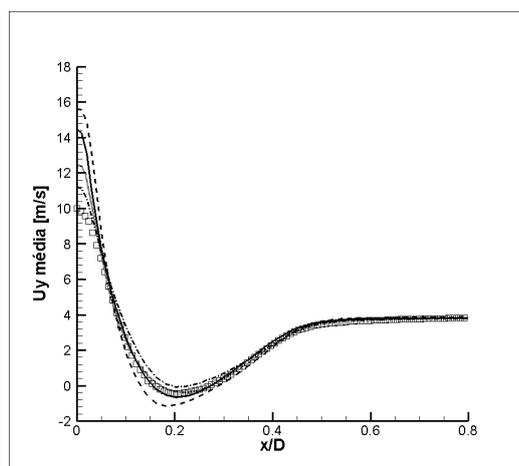
### 5.3.1

#### Caso V1

Nas figuras 5.29 e 5.30 pode se ver que os perfis do componente de velocidade na direção longitudinal ( $U_y$ ) apresentam valores muito elevados nas proximidades do centro do jato, nas primeiras duas estações de medição ( $y = D/3$  e  $2D/3$ ) para todos os modelos. Em  $y = D/3$ , o desempenho dos modelos é semelhante, mas em  $y = 2D/3$ , o modelo SST  $k - \omega$  apresenta resultados mais próximos aos experimentais, seguido pelo RSM,  $k - \epsilon$  e  $k - \omega$  respectivamente. Este comportamento se mantém em  $y = D$ , sendo que neste ponto é possível notar que o jato simulado com modelo  $k - \omega$  mantém elevadas velocidades (o dobro da experimental), enquanto os resultados calculados com os demais modelos são mais satisfatórios. O modelo  $k - \omega$  apresenta velocidade reduzida na região de esteira ( $0,1 \leq x/D \leq 0,3$ ), indicando uma maior recirculação nesta região, este comportamento pode ser visto nos três últimos perfis. No perfil mais afastado do corpo rombudo o modelo SST  $k - \omega$  apresenta velocidade no centro do jato similar à da estação de medição precedente. Há boa exatidão na predição de  $U_y$  com todos os modelos em  $x > 0,3D$ .



5.29(a):  $y = D/3$



5.29(b):  $y = 2D/3$

Figura 5.29: Perfis de Velocidade na direção  $y$  para o caso V1 em  $y = D/3$  e  $y = 2D/3$ . —  $k - \epsilon$ , --  $k - \omega$ , - . - SST  $k - \omega$ , ... RSM,  $\square$  Experimental (Caetano, 2012).

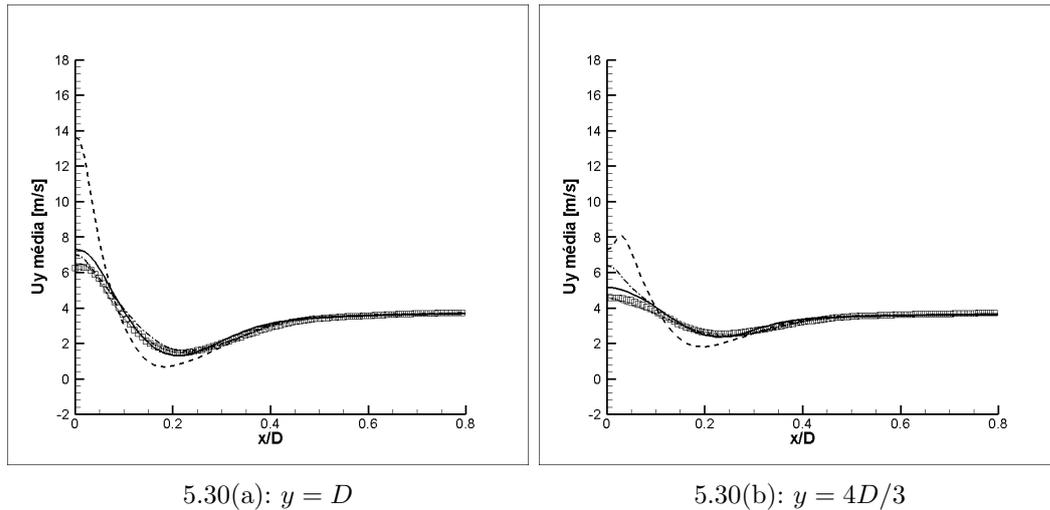


Figura 5.30: Perfis de Velocidade na direção  $y$  para o caso V1 em  $y = D$  e  $y = 4D/3$ . —  $k - \epsilon$ , --  $k - \omega$ , - . - SST  $k - \omega$ , ... RSM, □ Experimental (Caetano, 2012).

A evolução do componente longitudinal da velocidade no jato pode ser melhor avaliada ao longo da linha de centro, conforme é apresentado na figura 5.31. Nesta figura é possível constatar que o escoamento apresenta a mesma velocidade na saída do jato para os modelos  $k - \epsilon$  e RSM, enquanto os modelos  $k - \omega$  e SST  $k - \omega$  apresentam velocidades superiores. No início de sua evolução calculada,  $U_y$  permanece praticamente inalterada em  $x = 0$  por uma distância que varia de acordo com o modelo empregado. O primeiro modelo a exibir uma variação na velocidade é o modelo SST  $k - \omega$  (em  $x \approx 0,35D$ ), enquanto o ultimo é o modelo  $k - \omega$ , no qual  $U_y$  permanece praticamente inalterada até  $y = 0,8D$ , passando a diminuir lentamente até  $y = 1,2D$ , onde há uma queda abrupta de velocidade, atingindo um valor 20% maior que o experimental. A velocidade calculada com modelo SST  $k - \omega$  se aproxima do experimental em  $y = 0,7D$ , se mantendo assim até  $y = 0,9D$ , onde este modelo prevê que este componente passa a ter valor constante, o que não condiz com os resultados experimentais. O modelo RSM é o segundo a apresentar a redução de velocidade (em  $y \approx 0,5D$ ), passando a apresentar as mesmas velocidades medidas por Caetano (2012) a partir de  $y = D$ . O modelo  $k - \epsilon$  inicia a redução de velocidade aproximadamente  $0,2D$  após o modelo RSM, e o seu perfil segue praticamente paralelo ao obtido com este modelo atingindo a menor diferença em relação ao experimental ( $\approx 15\%$ ) a partir de  $y = D$ .

O componente  $x$  da velocidade tem um módulo consideravelmente menor que o da componente  $y$ , mas a exatidão na predição deste componente é fundamental para avaliar os mecanismos de mistura do combustível com o ar. Nas figuras 5.32 e 5.33 pode-se observar que todos os modelos conseguiram

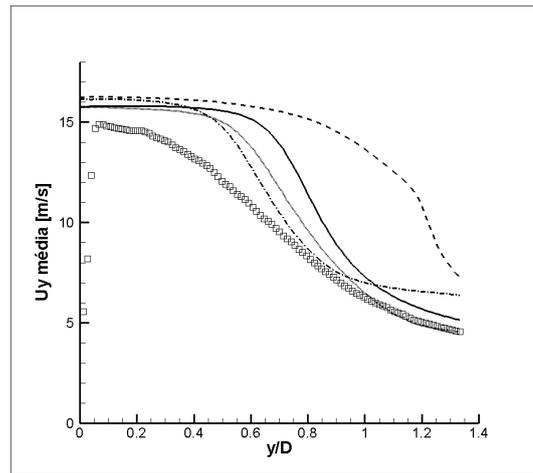


Figura 5.31: Evolução da velocidade na direção  $y$  ao longo da linha de centro para o caso V1. —  $k - \epsilon$ , --  $k - \omega$ , - . - SST  $k - \omega$ , . . . RSM, □ Experimental (Caetano, 2012).

captar a topologia do escoamento medido por Caetano (2012), com alguma variação no valor ou posições dos extremos de velocidade e com valores menores na região externa ao corpo rombudo ( $x > 0,5D$ ). No perfil mais próximo do corpo rombudo, os modelos  $k - \omega$  e SST  $k - \omega$  apresentam os piores resultados devido à dificuldades na predição do segundo e terceiro extremos de velocidade a partir do centro. Já em  $y = 2/3D$ , o modelo SST  $k - \omega$  apresenta o melhor resultado, enquanto que nos dois demais perfis ele apresenta a melhor concordância a partir da metade do raio do corpo rombudo, mas subestima o extremo de velocidade na fronteira do jato. Assim como no primeiro perfil, o modelo  $k - \omega$  apresenta os piores resultados, o que já era esperado por este modelo apresentar os piores resultados para a componente  $y$  da velocidade. Os modelos  $k - \epsilon$  e RSM apresentam resultados muito semelhantes nos dois últimos perfis, porém em  $y = 2/3D$ , o modelo RSM apresenta menor variação na comparação com os resultados experimentais em toda a linha. Em todas as posições, a velocidade  $x$  no centro do jato é nula e independente do modelo, o que já era esperado devido à condição de contorno de simetria.

Assim como foi feito para o estudo de malha, são avaliados os componentes do tensor de Reynolds, que são importantes para a descrição da mistura turbulenta do combustível com o oxidante e, conseqüentemente, para a determinação dos perfis de velocidade do jato e a posição da frente de chama. O primeiro componente do tensor de Reynolds a ser avaliado é o  $yy$  através dos perfis representados nas figuras 5.34 e 5.35. Este componente é melhor representado nas duas primeiras estações de medição pelos modelos SST  $k - \omega$  e  $k - \epsilon$ . Em  $y = D$ , o modelo  $k - \epsilon$  passa a superestimar o valor deste componente, enquanto o modelo  $k - \omega$  prevê com maior exatidão o valor máximo atingido,

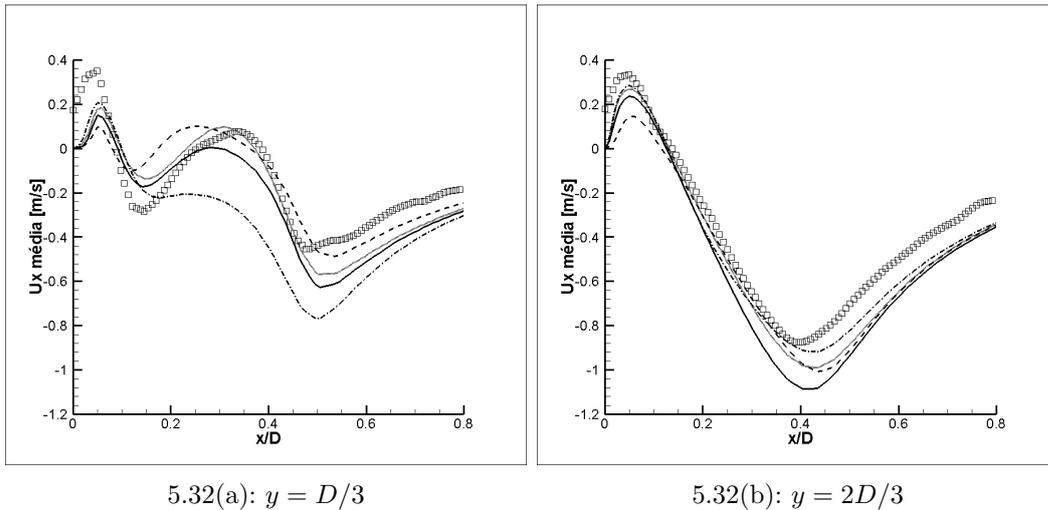


Figura 5.32: Perfis de velocidade na direção  $x$  para o caso V1 em  $y = D/3$  e  $y = 2D/3$ . —  $k - \epsilon$ , --  $k - \omega$ , - . - SST  $k - \omega$ , ... RSM, □ Experimental (Caetano, 2012).

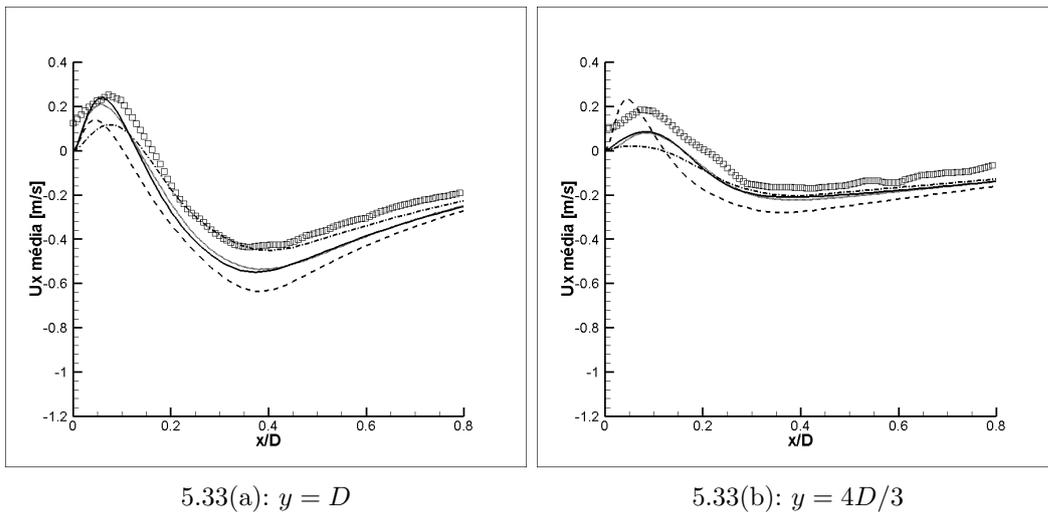


Figura 5.33: Perfis de velocidade na direção  $x$  para o caso V1 em  $y = D$  e  $y = 4D/3$ . —  $k - \epsilon$ , --  $k - \omega$ , - . - SST  $k - \omega$ , ... RSM, □ Experimental (Caetano, 2012).

mas apresenta intensidade muito baixa no centro do jato. O modelo SST  $k - \omega$  mantém o bom resultado em  $y = D$ , mas não apresenta a mesma exatidão no valor calculado em  $y = 4/3D$ , onde o valor no centro do jato é superestimado. Nesta ultima posição, os modelos que apresentam melhores resultados são o  $k - \epsilon$  e o RSM.

De uma forma geral, Os resultados calculados para  $Re_{yy}$ , com exceção do modelo  $k - \omega$  apresentam valores maiores que os experimentais na região de esteira e uma queda abrupta ao aproximar do centro do jato. Para entender melhor a influência dos modelos no comportamento deste componente no

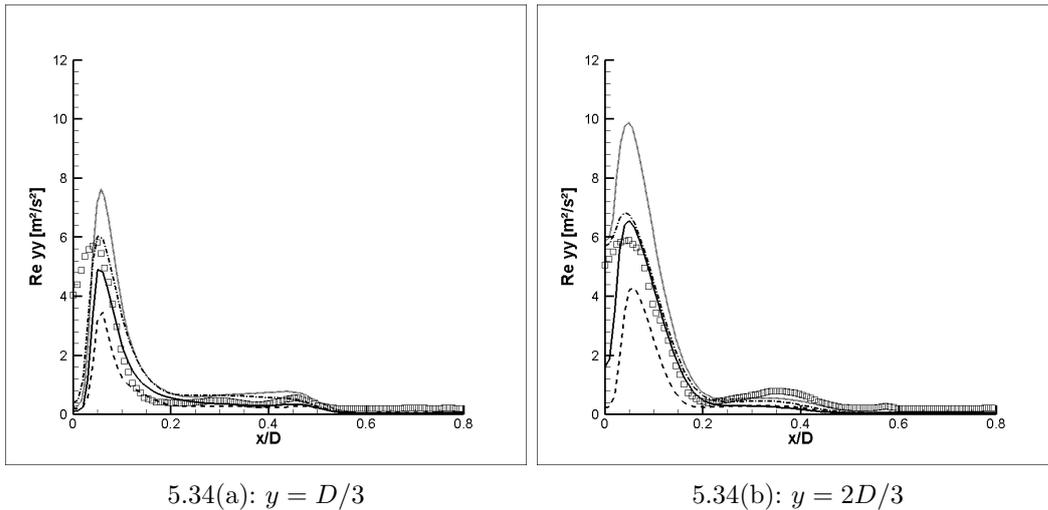


Figura 5.34: Perfis do componente  $yy$  do tensor de Reynolds para o caso V1 em  $y = D/3$  e  $y = 2D/3$ . —  $k - \epsilon$ , - -  $k - \omega$ , - . - SST  $k - \omega$ , ... RSM, □ Experimental (Caetano, 2012).

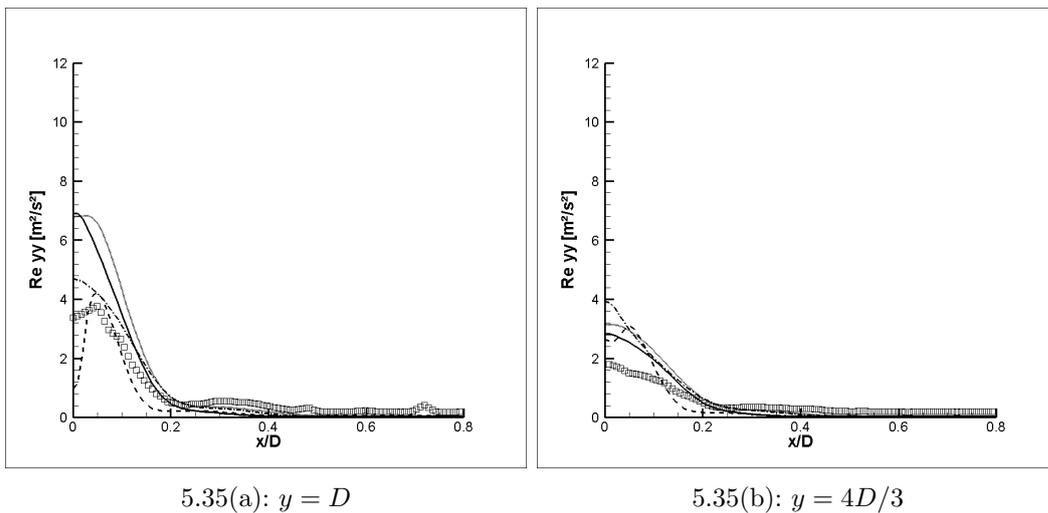


Figura 5.35: Perfis do componente  $yy$  do tensor de Reynolds para o caso V1 em  $y = D$  e  $y = 4D/3$ . —  $k - \epsilon$ , - -  $k - \omega$ , - . - SST  $k - \omega$ , ... RSM, □ Experimental (Caetano, 2012).

centro do jato, é traçado um perfil ao longo da linha de centro que está representado na figura 5.36. Nesta figura é possível traçar um paralelo entre a intensidade da turbulência e o decaimento de  $U_y$  ao longo do centro do jato (conforme figura 5.31). Todos os modelos prevêem um baixo valor para o componente  $yy$  do tensor de Reynolds na sua entrada, sendo que o  $k - \epsilon$  apresenta menor valor neste local. O valor calculado deste componente do tensor de Reynolds tem um aumento abrupto no mesmo ponto onde ocorre a redução da velocidade no centro do jato, sendo que o primeiro modelo a apresentar tal elevação foi o modelo SST  $k - \omega$ , enquanto o último foi o modelo

$k - \omega$ . O modelo que apresentou os resultados calculados mais próximos aos medidos até  $y = 1,2D$  foi o modelo SST  $k - \omega$ , sendo que a partir deste ponto este modelo se mostra pouco dissipativo, prevendo valores superiores aos calculados com os modelos  $k - \epsilon$  e RSM. Já o modelo  $k - \omega$ , subestimou o valor deste componente da origem até  $y = 1,2D$ , o que pode explicar seu desempenho insatisfatório no cálculo do componente  $y$  da velocidade no centro do jato. Nota-se que a discrepância entre os resultados numéricos e experimentais mostrada na figura 5.36 é fruto de um valor incorreto de  $Re_{yy}$  na entrada da esteira do corpo rombudo. Assim, não é possível selecionar o modelo de turbulência com base apenas nestes resultados.

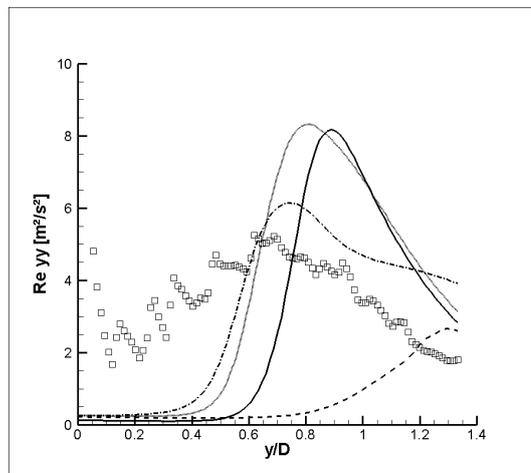


Figura 5.36: Evolução do componente  $yy$  do tensor de Reynolds ao longo da linha de centro para o caso V1. —  $k - \epsilon$ , --  $k - \omega$ , - . - SST  $k - \omega$ , ... RSM, □ Experimental (Caetano, 2012).

Nas figuras 5.37 e 5.38, estão representados os perfis do componente  $xx$  do tensor de Reynolds. Nos dois primeiros perfis, os modelos que melhor captam este componente são os modelos  $k - \omega$  e RSM, sendo que o primeiro apresenta dificuldades na predição dos resultados experimentais nos dois últimos perfis. Em  $y = D$ , o modelo SST  $k - \omega$  apresenta resultados próximos ao RSM, porém aparentemente este modelo prevê pouca dissipação neste ponto, levando a uma superestimação do valor de  $Re_{xx}$  em  $y = 4D/3$ .

No centro do jato, figura 5.39, todos os modelos prevêm uma baixa intensidade para o componente  $xx$  do tensor de Reynolds na sua entrada. Assim como o ocorrido com o componente  $yy$ , o primeiro modelo a apresentar uma elevação no valor do componente  $xx$  foi o modelo SST  $k - \omega$ , enquanto o último foi o modelo  $k - \omega$ . No entanto, o modelo SST  $k - \omega$  superestiu o valor calculado deste componente a partir de  $y/D \approx 0,5$ . Para este componente, nenhum modelo apresentou resultados satisfatórios na linha de centro, no entretanto o modelo RSM foi o que melhor reproduziu os resultados experimentais.

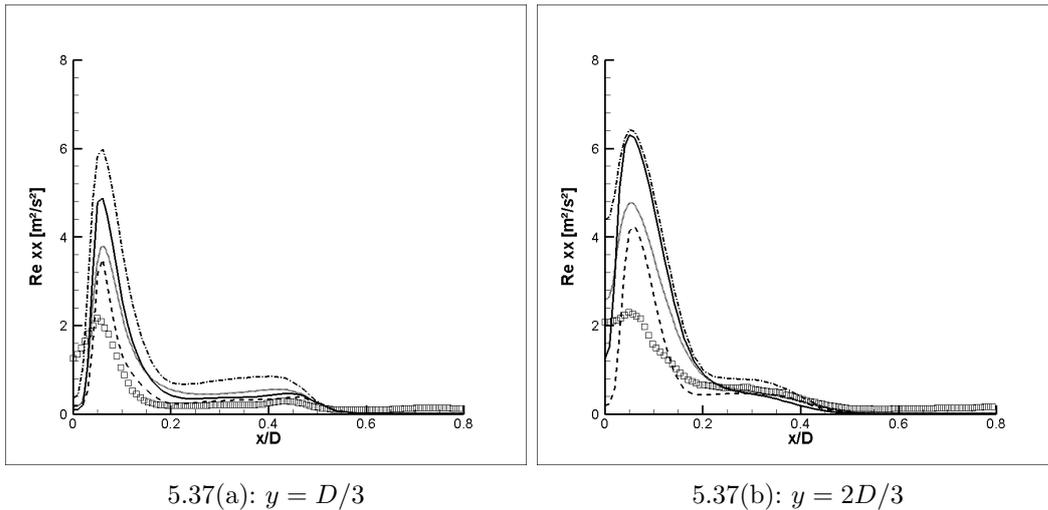


Figura 5.37: Perfis do componente  $xx$  do tensor de Reynolds para o caso V1 em  $y = D/3$  e  $y = 2D/3$ . —  $k - \epsilon$ , --  $k - \omega$ , - . - SST  $k - \omega$ , ... RSM, □ Experimental (Caetano, 2012).

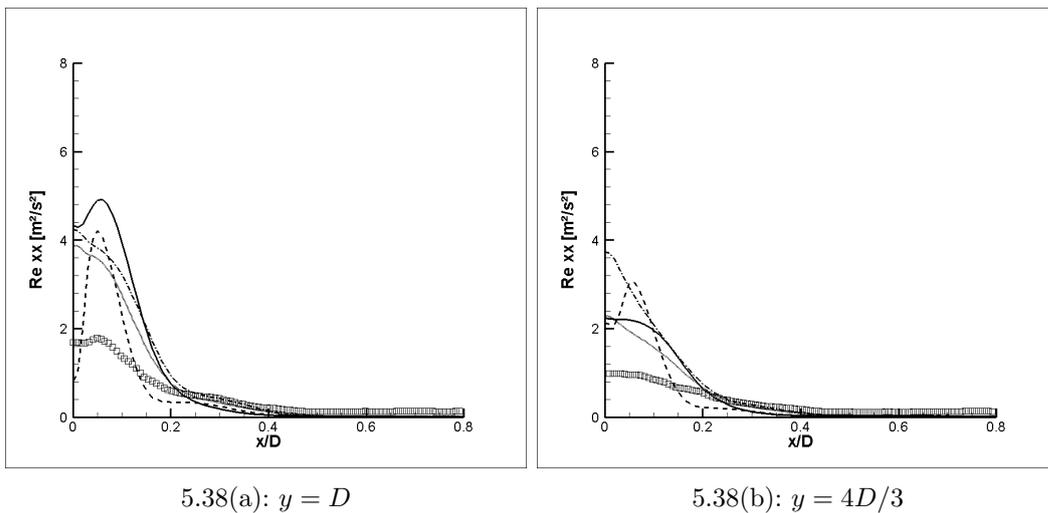


Figura 5.38: Perfis do componente  $xx$  do tensor de Reynolds para o caso V1 em  $y = D$  e  $y = 4D/3$ . —  $k - \epsilon$ , --  $k - \omega$ , - . - SST  $k - \omega$ , ... RSM, □ Experimental (Caetano, 2012).

Conforme pode ser visto nas figuras 5.40 e 5.41, todos os modelos apresentaram boa concordância do componente  $xy$  do tensor de Reynolds com os valores experimentais na região externa ao corpo rombudo. Já na região de esteira, o modelo  $k - \omega$  apresentou valores calculados muitos semelhantes aos medidos por Caetano (2012) nos dois perfis mais próximos do corpo rombudo e valores muito diferentes nos demais. Em  $y = D$ , o modelo SST  $k - \omega$  e no ultimo perfil os modelos RSM e  $k - \epsilon$  apresentam a melhor concordância com os resultados experimentais.

No centro do jato, era esperado que o componente  $xy$  do tensor de

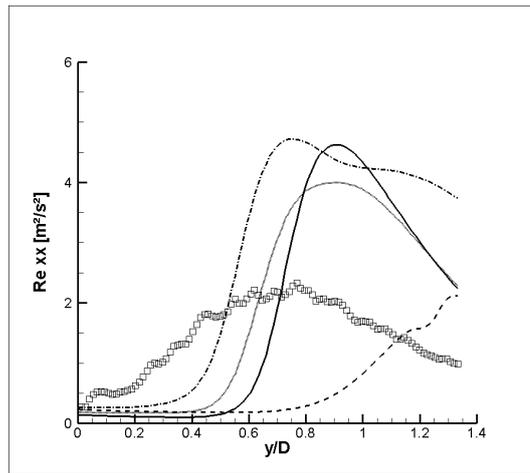
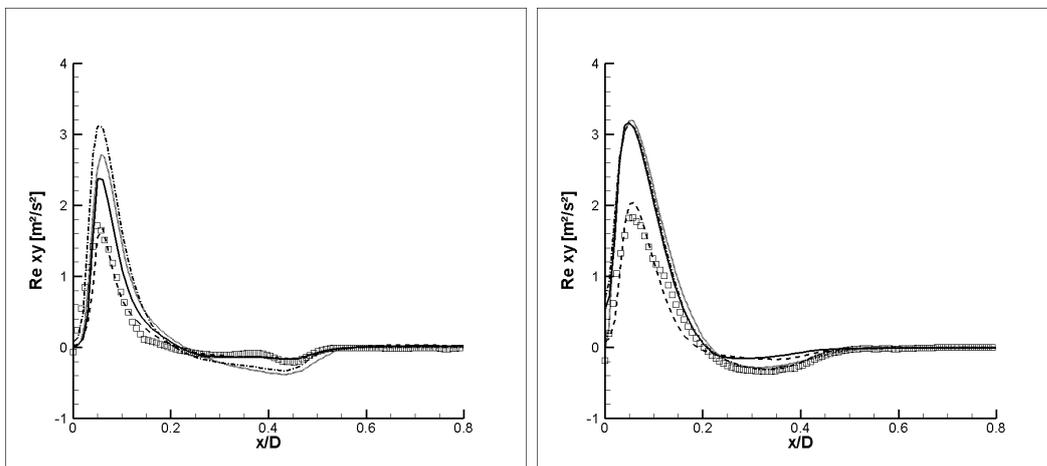


Figura 5.39: Evolução do componente  $xx$  do tensor de Reynolds ao longo da linha de centro para o caso V1. —  $k - \epsilon$ , --  $k - \omega$ , - . - SST  $k - \omega$ , ... RSM, □ Experimental (Caetano, 2012).



5.40(a):  $y = D/3$

5.40(b):  $y = 2D/3$

Figura 5.40: Perfis do componente  $xy$  do tensor de Reynolds para o caso V1 em  $y = D/3$  e  $y = 2D/3$ . —  $k - \epsilon$ , --  $k - \omega$ , - . - SST  $k - \omega$ , ... RSM, □ Experimental (Caetano, 2012).

Reynolds tivesse valor nulo devido à simetria axial do escoamento estudado. No entanto, pode-se ver pela figura 5.42 que os modelos a duas equações calcularam valores não nulos para este componente. Para tais modelos, o componente  $Re_{xy}$  é diretamente relacionado à taxa de deformação média do escoamento, que por sua vez é fortemente influenciada pela condição de contorno em  $x=0$ . Assim, é difícil selecionar o modelo de turbulência mais adequado com base nesta propriedade do escoamento.

Os baixos valores de  $Re_{yy}$  e  $Re_{xx}$  calculados no centro do jato no início de seu desenvolvimento, aparentemente, são consequência de problemas na confecção das malhas, conforme foi exposto na seção anterior. No entanto, a

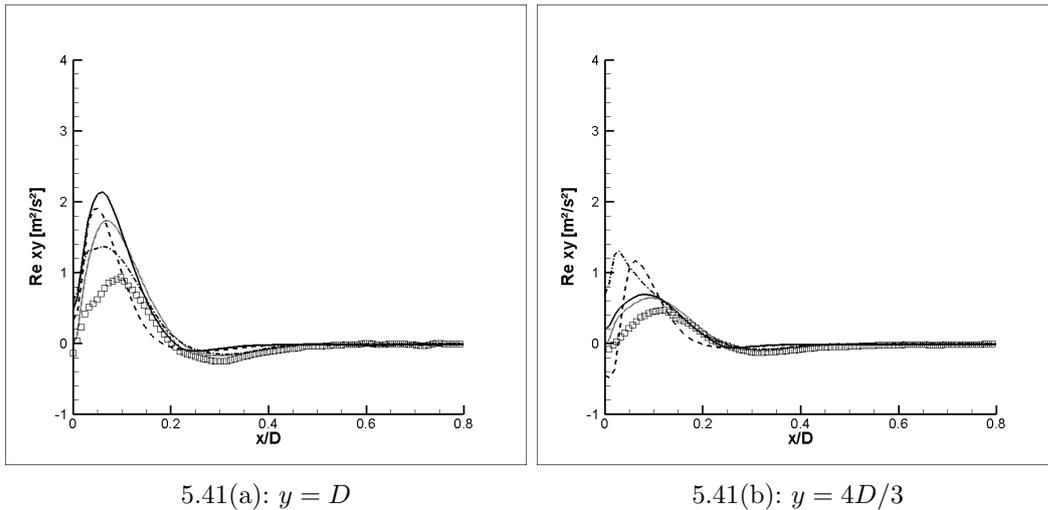


Figura 5.41: Perfis do componente  $xy$  do tensor de Reynolds para o caso V1 em  $y = D$  e  $y = 4D/3$ . —  $k - \epsilon$ , --  $k - \omega$ , - . - SST  $k - \omega$ , ... RSM, □ Experimental (Caetano, 2012).

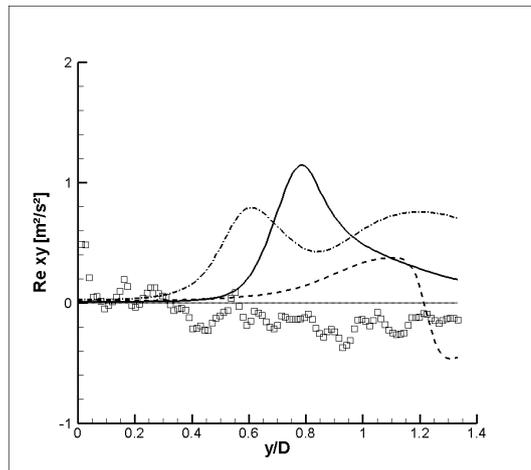


Figura 5.42: Evolução do componente  $xy$  do tensor de Reynolds ao longo da linha de centro para o caso V1. —  $k - \epsilon$ , --  $k - \omega$ , - . - SST  $k - \omega$ , ... RSM, □ Experimental (Caetano, 2012).

forma como a turbulência se desenvolve, e como ela altera a velocidade do jato, é determinada pelo modelo de turbulência adotado. O modelo  $k - \omega$  não apresenta resultados satisfatórios, sendo o primeiro a ser descartado para as etapas seguintes.

O modelo SST  $k - \omega$  é o que melhor descreveu o aumento da turbulência e a redução da velocidade do jato logo após a sua saída do corpo rombudo. Tal comportamento poderia ser esperado, uma vez que este modelo foi desenvolvido com o intuito de melhorar a predição de pontos de deslocamento em aerofólios utilizando-se modelos de duas equações. No entanto, este modelo apresenta resultados ruins para o componente longitudinal da velocidade

e para os componentes do tensor de Reynolds em  $y = 4/3D$ , que é uma região considerada importante por ser uma candidata à região de ancoramento de chama em um escoamento reativo com as mesmas vazões do caso V1.

Já o modelo RSM apresenta boa predição dos perfis do componente longitudinal da velocidade e do componente  $xx$  do tensor de Reynolds após  $y = D$  e é o único capaz de prever com exatidão o comportamento de  $Re_{xy}$  no centro do jato, sendo potencialmente o melhor modelo para as simulações com combustão. No entanto, tal modelo apresenta o maior custo computacional dentre os modelos avaliados e necessita de receber, como condição inicial, o resultado obtido com um outro modelo para atingir a convergência. Sendo assim, optou-se pelo estudo de um segundo caso de validação (caso V2), comparando apenas os modelos SST  $k - \omega$ , RSM e  $k - \epsilon$ .

### 5.3.2

#### Caso V2

O caso V2 tem como principal característica o fato da velocidade do escoamento anular ser maior do que a velocidade do jato, com isso, o escoamento passa a ser dominado pela zona de recirculação, conforme pode ser visto nos perfis do componente  $y$  da velocidade apresentados nas figuras 5.43 e 5.44. Nesta figura é possível ver que os modelos apresentam bons resultados na predição do escoamento na região do anular ( $x > 0,5D$ ), mas que o modelo  $k - \epsilon$  apresenta velocidades negativas em  $x = 0$ , logo no primeiro perfil, o que indica que nesta região o jato já havia se dispersado pela recirculação. O modelo RSM apresenta bons resultados, com exceção da região próxima ao centro do jato, onde apresenta maior velocidade no primeiro perfil, mas exibe velocidades menores que as medidas experimentais nos demais perfis. Já o modelo SST  $k - \omega$  não apresenta boa concordância em  $y = D/3$ , mas apresenta resultados muito próximos aos calculados com o modelo RSM nos demais perfis.

Conforme apresentado nas figuras 5.45 e 5.46, os perfis do componente transversal da velocidade também são melhor capturados com o modelo RSM em  $y = D/3$ . Nos dois primeiros perfis existe boa concordância na região do anular, o que indica que os modelos captam bem o escoamento de ar do anular em direção ao jato. Já nos dois últimos perfis, os modelos  $k - \epsilon$  e RSM apresentam maiores velocidades em direção ao centro na região anular. Por outro lado, o modelo SST  $k - \omega$  apresenta boa concordância com as medições experimentais nestes dois últimos perfis, mesmo tendo calculado um valor extremo de velocidade muito superior ao experimental no primeiro perfil. Nos três últimos perfis, os resultados experimentais indicam valores positivos próximos ao jato, no entanto os resultados numéricos tem sinal

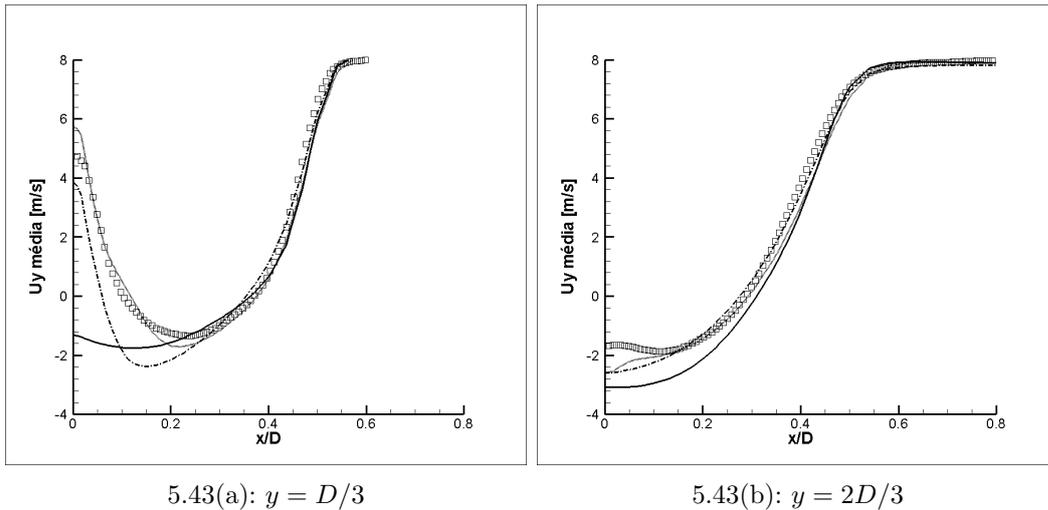


Figura 5.43: Perfis de velocidade na direção  $y$  para o caso V2 em  $y = D/3$  e  $y = 2D/3$ . —  $k - \epsilon$ , - - SST  $k - \omega$ , ... RSM,  $\square$  Experimental (Caetano, 2012).

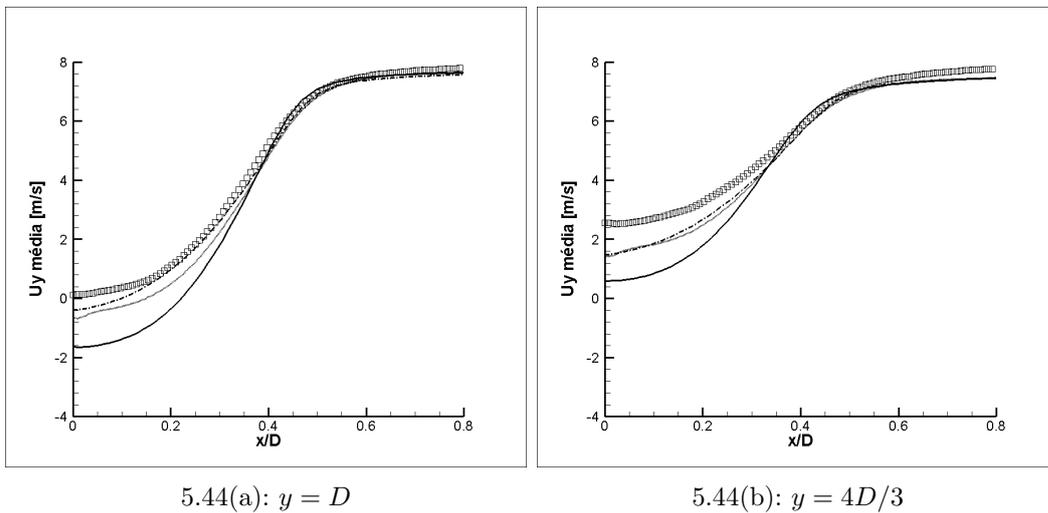


Figura 5.44: Perfis de velocidade na direção  $y$  para o caso V2 em  $y = D$  e  $y = 4D/3$ . —  $k - \epsilon$ , - - SST  $k - \omega$ , ... RSM,  $\square$  Experimental (Caetano, 2012).

oposto, indicando que há escoamento em direção ao jato. Outro ponto a ser observado é que este componente de velocidade apresenta valores medidos diferentes de zero para os dois últimos perfis no centro do jato, o que indica assimetria do escoamento, tal comportamento não se repete nas simulações.

O comportamento do componente  $yy$  do tensor de Reynolds, apresentado nas figuras 5.47 e 5.48, é melhor capturado pelo modelo  $k - \epsilon$  no primeiro perfil para  $x/D > 0,05$ . Nos demais perfis os modelos RSM e SST  $k - \omega$  apresentam melhores resultados, se aproximando dos valores experimentais. No entanto, os modelos RSM e SST  $k - \omega$  não são bem sucedidos na predição do valor deste componente na região do jato ( $x/D < 0,05$ ) em  $y = D/3$  e  $2D/3$ , o que pode ser decorrente da menor intensidade da turbulência na entrada

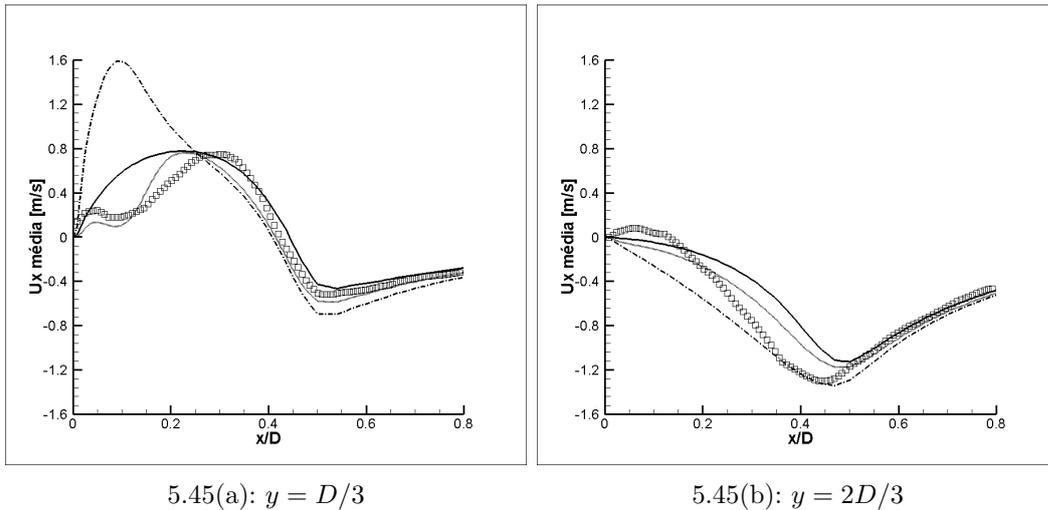


Figura 5.45: Perfis de velocidade na direção  $x$  para o caso V2 em  $y = D/3$  e  $y = 2D/3$ . —  $k - \epsilon$ , - - SST  $k - \omega$ , ... RSM, □ Experimental (Caetano, 2012).

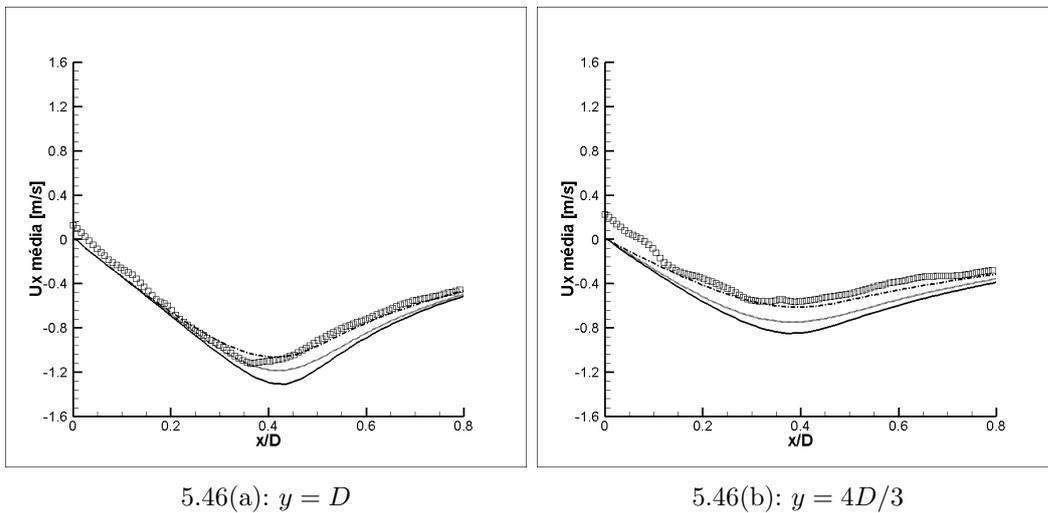


Figura 5.46: Perfis de velocidade na direção  $x$  para o caso V2 em  $y = D$  e  $y = 4D/3$ . —  $k - \epsilon$ , - - SST  $k - \omega$ , ... RSM, □ Experimental (Caetano, 2012).

do jato, conforme já havia sido detectado para o caso V1. Todos os modelos apresentaram menores valores do que os medidos para  $Re_{yy}$  no escoamento anular ( $y > D/2$ ). Nota-se que foi avaliado o efeito da escolha de diferentes valores de intensidade turbulenta e de comprimento de escala da turbulência prescritos na condição de contorno do anular. Se constatou que os valores que se deve prescrever para reproduzir o valor desta componente do tensor de Reynolds no escoamento anular não são fisicamente coerentes. Este é um indicativo de que os problemas de laminarização do escoamento atribuídos à malha do duto do combustível podem estar se repetindo na entrada do anular, região esta onde a malha é menos refinada.

Conforme pode ser visto nas figuras 5.49 e 5.50, os modelos apresentados

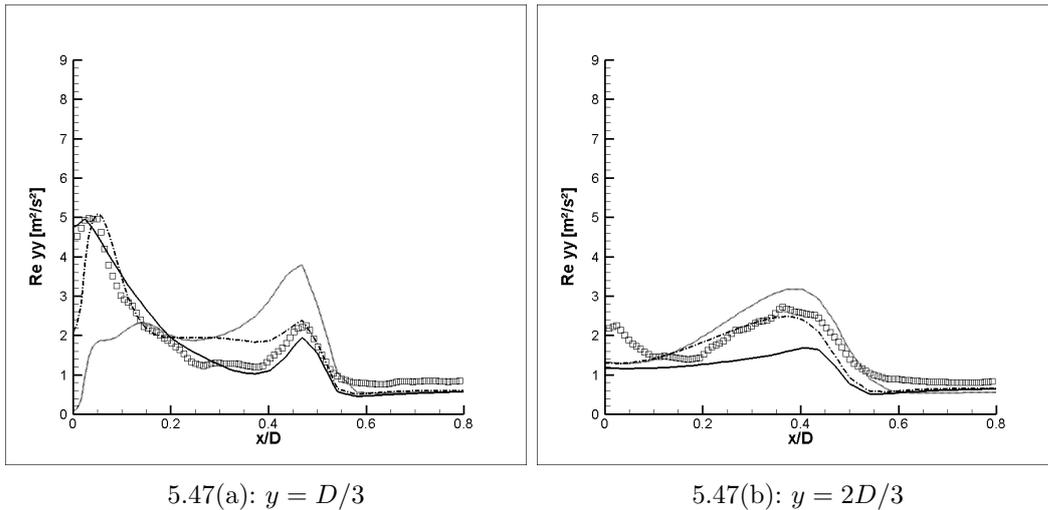


Figura 5.47: Perfis do componente  $yy$  do tensor de Reynolds para o caso V2 em  $y = D/3$  e  $y = 2D/3$ . —  $k - \epsilon$ , - - SST  $k - \omega$ , ... RSM, □ Experimental (Caetano, 2012).

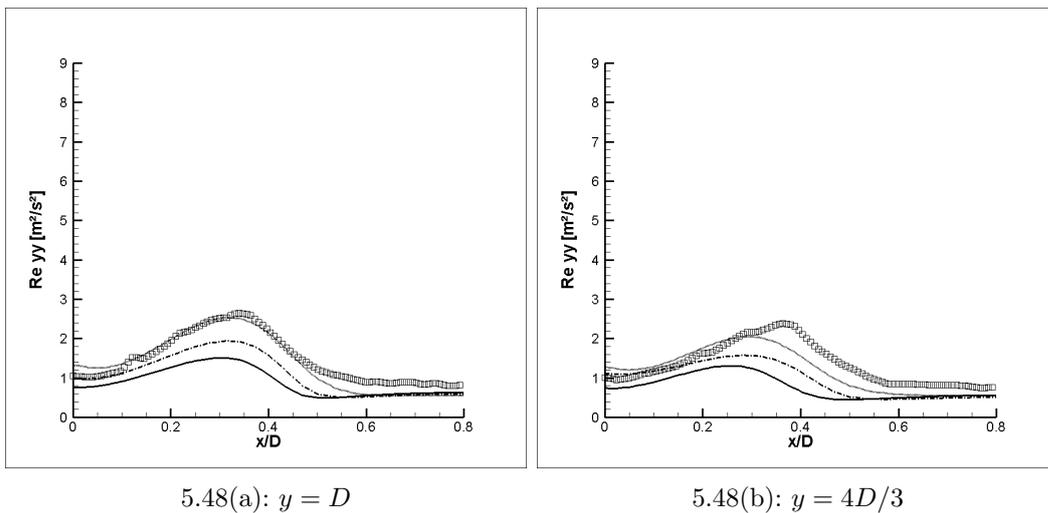
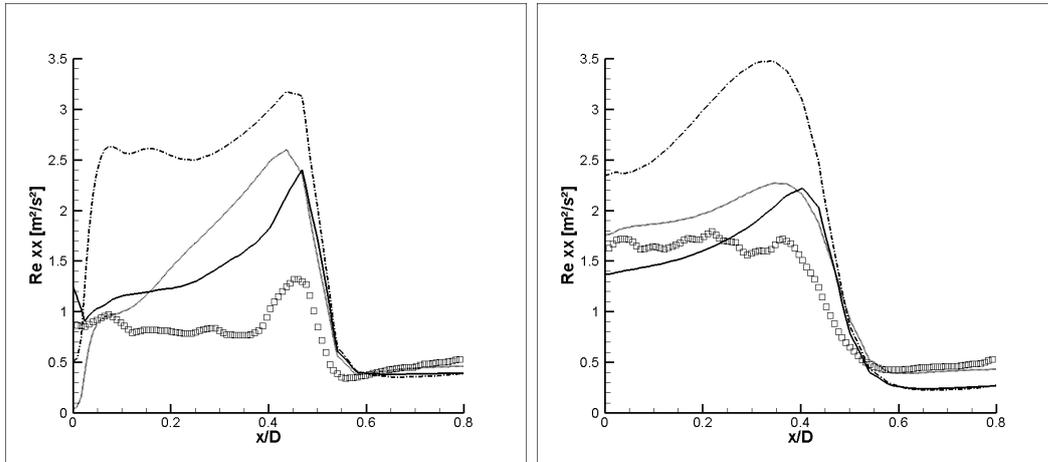


Figura 5.48: Perfis do componente  $yy$  do tensor de Reynolds para o caso V2 em  $y = D$  e  $y = 4D/3$ . —  $k - \epsilon$ , - - SST  $k - \omega$ , ... RSM, □ Experimental (Caetano, 2012).

superestimam o componente  $xx$  do tensor de Reynolds na região de esteira em  $y = D/3$ , enquanto os modelos SST  $k - \omega$  e RSM subestimam este componente nas proximidades do jato ( $x/D < 0,05$ ). Em  $y = 2D/3$  os modelos  $k - \epsilon$  e RSM apresentam resultados mais próximos aos experimentais, enquanto os valores calculados com o modelo SST  $k - \omega$  permanecem muito superiores aos experimentais. Nos dois perfis seguintes, os modelos subestimam este componente do tensor de Reynolds para  $x < 0,3D$ , sendo que os melhores resultados até  $x = 0,15D$  são os calculados com o modelo SST  $k - \omega$ , que por outro lado superestima os valores experimentais a partir deste ponto até

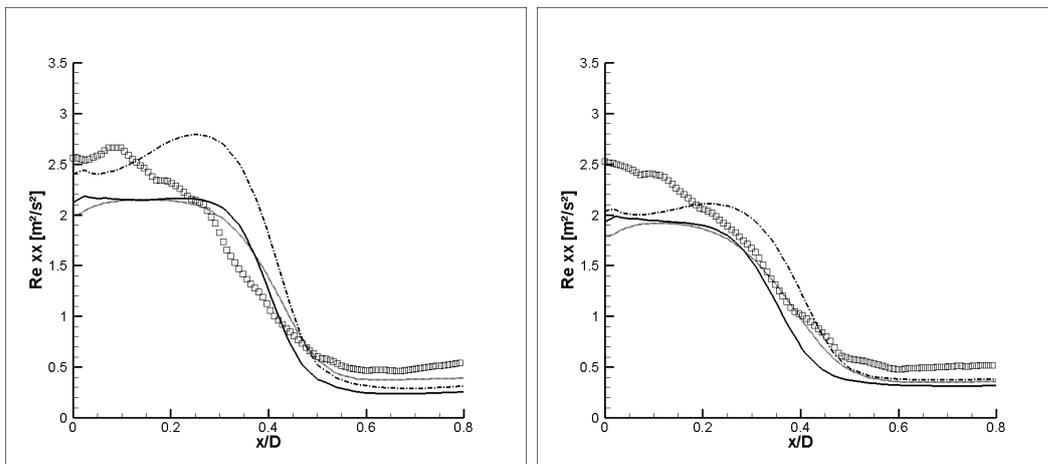
$x = 0,45D$ . Os valores de  $Re_{xx}$  calculados em toda a região anular com os modelos  $k - \epsilon$  e SST  $k - \omega$  são inferiores aos medidos por Caetano (2012).



5.49(a):  $y = D/3$

5.49(b):  $y = 2D/3$

Figura 5.49: Perfis do componente  $xx$  do tensor de Reynolds para o caso V2 em  $y = D/3$  e  $y = 2D/3$ . —  $k - \epsilon$ , - - - SST  $k - \omega$ , ... RSM, □ Experimental (Caetano, 2012).



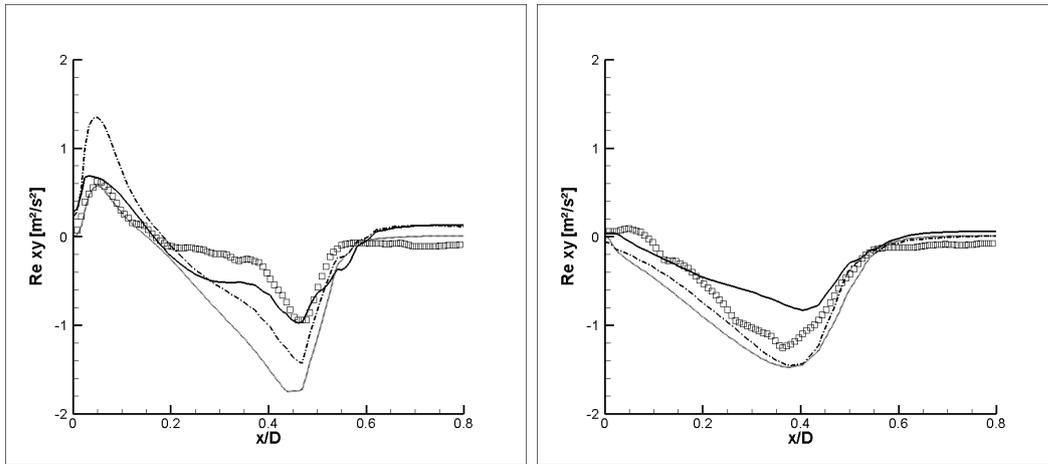
5.50(a):  $y = D$

5.50(b):  $y = 4D/3$

Figura 5.50: Perfis do componente  $yy$  do tensor de Reynolds para o caso V2 em  $y = D$  e  $y = 4D/3$ . —  $k - \epsilon$ , - - - SST  $k - \omega$ , ... RSM, □ Experimental (Caetano, 2012).

O modelo RSM conseguiu prever com exatidão o comportamento do componente  $xy$  do tensor de Reynolds, conforme apresentado nas figuras 5.51 e 5.52. A exceção se dá em  $y = D/3$ , onde este modelo calcula maior valor no intervalo  $0,2D < x < 0,55D$ , sendo que nesta região o modelo  $k - \epsilon$  apresenta a melhor concordância. A partir de  $y = 2D/3$ , os valores calculados com o modelo  $k - \epsilon$  na região de esteira ( $x < 0,5D$ ) tem menor módulo que os valores

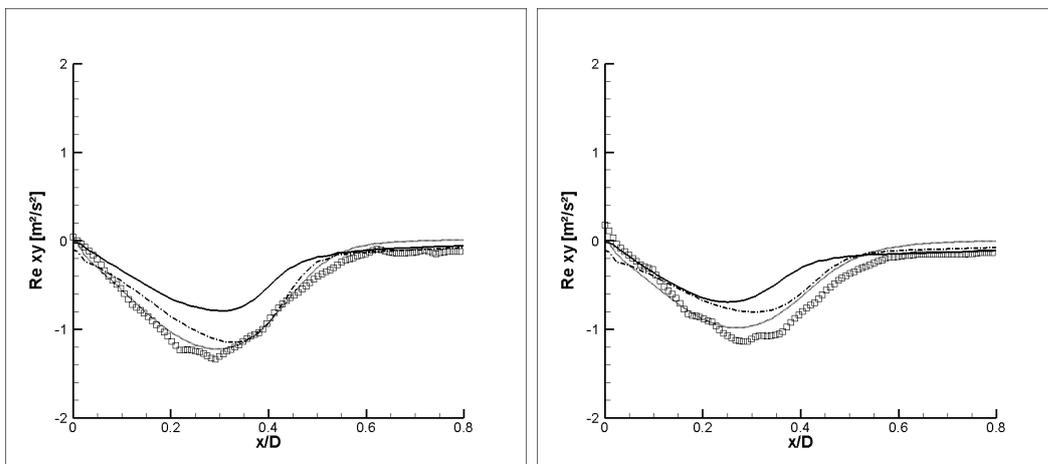
experimentais, enquanto os calculados com o modelo SST  $k - \omega$  são muito próximos dos calculados com o modelo RSM e dos medidos experimentalmente.



5.51(a):  $y = D/3$

5.51(b):  $y = 2D/3$

Figura 5.51: Perfis do componente  $xy$  do tensor de Reynolds para o caso V2 em  $y = D/3$  e  $y = 2D/3$ . —  $k - \epsilon$ , - - - SST  $k - \omega$ , ... RSM, □ Experimental (Caetano, 2012).



5.52(a):  $y = D$

5.52(b):  $y = 4D/3$

Figura 5.52: Perfis do componente  $xy$  do tensor de Reynolds para o caso V2 em  $y = D$  e  $y = 4D/3$ . —  $k - \epsilon$ , - - - SST  $k - \omega$ , ... RSM, □ Experimental (Caetano, 2012).

A evolução do componente  $y$  da velocidade e dos componentes  $yy$ ,  $xx$  e  $xy$  do tensor de Reynolds ao longo do centro do jato estão representados nas figuras 5.53 e 5.54. Os resultados com os modelos SST  $k - \omega$  e RSM apresentam comportamento similar ao encontrado para o caso V1, onde a baixa turbulência do jato em sua saída leva à manutenção da velocidade constante no centro do jato, até aproximadamente  $y = 0,4$  e  $0,5D$  respectivamente. No caso V2, todos os modelos preveem uma queda brusca de  $U_y$  que vai de 6 m/s (SST  $k - \omega$  e

RSM) ou 5 m/s ( $k - \epsilon$ ) a  $-3$  m/s em poucos milímetros, acompanhado de um aumento brusco no valor dos componentes  $xx$  e  $yy$  do tensor de Reynolds. Tal queda brusca indica que o jato se depara com a região de recirculação formada na esteira do corpo rombudo que engolfa este jato. Além disso, a região onde a componente longitudinal da velocidade medida por Caetano (2012) é negativa vai de 0,6 a 1D, enquanto a calculada tem extensão três vezes maior para o modelo  $k - \epsilon$  e aproximadamente duas vezes maior para os demais modelos.

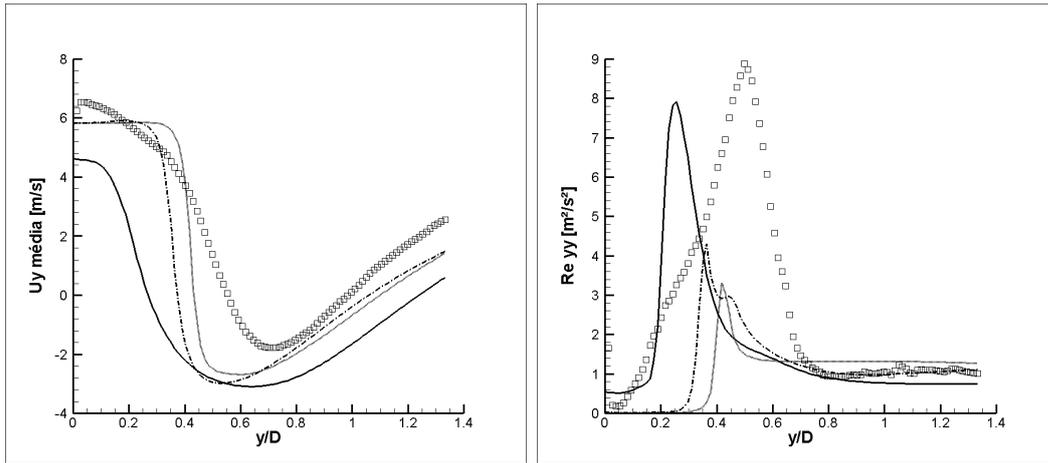


Figura 5.53: Evolução do componente  $y$  da velocidade e do componentes  $yy$  do tensor de Reynolds ao longo do centro do jato para o caso V2. —  $k - \epsilon$ , - - - SST  $k - \omega$ , ... RSM, □ Experimental (Caetano, 2012).

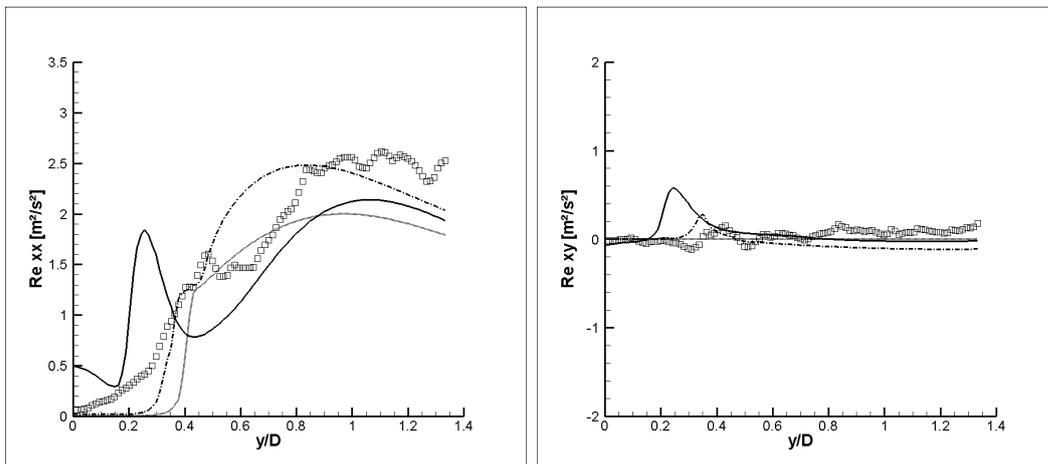


Figura 5.54: Evolução dos componentes  $xx$  e  $xy$  do tensor de Reynolds ao longo do centro do jato para o caso V2. —  $k - \epsilon$ , - - - SST  $k - \omega$ , ... RSM, □ Experimental (Caetano, 2012).

O modelo RSM foi o que apresentou o menor desvio na localização dos extremos dos componentes  $yy$  e  $xx$  do tensor de Reynolds, mas por outro lado, subestimou o valor do máximo de  $Re_{xx}$  em 20% e de  $Re_{yy}$  em 70%. O modelo

SST  $k - \omega$  obteve desempenho semelhante, mas antecipou o aparecimento do maior valor do componente  $yy$  e obteve uma melhor predição do aumento do valor do componente  $xx$ . O modelo  $k - \epsilon$  apresenta valores maiores para os componentes do tensor de Reynolds na saída do jato e  $U_y$  30% menor que o obtido experimentalmente. Tal comportamento indica que o escoamento previsto com a utilização do modelo  $k - \epsilon$  amplia a influência da região de recirculação sobre o jato, fazendo com que o mesmo seja absorvido pela região de recirculação muito antes do que o medido experimentalmente. Assim como no caso V1, o componente  $xy$  do tensor de Reynolds calculados com os modelos  $k - \epsilon$  e SST  $k - \omega$  não possuem valor zero ao longo da linha de centro.

A elevada inexatidão no cálculo da componente longitudinal da velocidade no caso V2 com o modelo  $k - \epsilon$ , mostra as limitações deste modelo em prever escoamentos com elevada curvatura das linhas de corrente. Tal limitação leva a descartar o uso deste modelo nas próximas etapas do trabalho.

Os modelos SST  $k - \omega$  e RSM apresentam resultados similares no caso V2, com exceção dos componentes  $x$  e  $y$  da velocidade no primeiro perfil e do componente  $xx$  do tensor de Reynolds nos dois primeiros perfis, onde o modelo RSM conseguiu calcular valores muito mais próximos dos experimentais. Avaliando conjuntamente os casos V1 e V2, pode-se concluir que o modelo RSM apresenta os melhores resultados para uma gama maior de condições de contorno, sendo este o modelo escolhido para aplicação no restante deste trabalho.

## 5.4

### Casos com combustão

Nesta seção são discutidos os resultados dos casos reativos H1 e H2. Inicialmente, são analisados os resultados experimentais tratados com os parâmetros de pós processamento estudados na seção 5.1. Posteriormente, os resultados numéricos são confrontados com os experimentais. Nesta seção são adotados a malha e o modelo de turbulência selecionados nas seções 5.2 e 5.3 e, para a combustão, é adotado o modelo de elementos de chama descrito no capítulo 4.2.1. Por fim, as chamas estudadas serão classificadas de acordo com os diagramas propostos por Huang e Lin (1994) e Caetano *et al.* (2009).

#### 5.4.1

##### Resultados experimentais

Nesta seção são discutidos, conjuntamente, os resultados obtidos dos campos de velocidade e de intensidade de fluorescência do OH, que é indicativa da concentração de OH e, conseqüentemente, da posição da frente de chama. Os

valores de intensidade de fluorescência do OH foram normalizados pelos valores mínimos e máximos encontrados em cada caso, impossibilitando uma comparação quantitativa direta. Os níveis adotados para representar a concentração de OH normalizada encontram-se na figura 5.55. Valores de intensidade normalizada de fluorescência de OH inferiores a 0,1 serão desconsiderados para a localização da frente de chama, pois tais valores podem ser provenientes de ruído de fundo, luz difusa ou outras incertezas de medição. Sendo assim, considera-se que a espessura de frente de chama é definida pela espessura da zona onde a intensidade de fluorescência de OH é maior que 0,1.

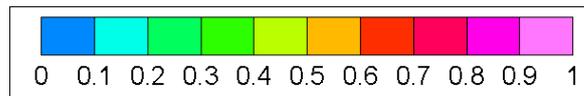


Figura 5.55: Níveis de fluorescência de OH normalizada

### Estrutura do escoamento

Nas figuras 5.56 e 5.57 são apresentados três campos de vetores de velocidade e a fluorescência do OH em 3 diferentes instantes, bem como a fluorescência do OH e as linhas de corrente para o escoamento médio, sendo que a escala de cores adotada nos casos instantâneos é diferente da adotada para o caso médio. Nos campos instantâneos é possível constatar que o OH é detectado em duas regiões que partem das bordas do corpo rombudo e se prolongam até o fim da janela de medições, sem sofrer interrupções, indicando que não há extinções localizadas da frente de chama. Este comportamento é típico de frentes de chama encontradas em chamas de difusão, onde o combustível proveniente do jato central se encontra com o oxidante apenas na frente de chama. A espessura da frente de chama se mantém próxima de 1 mm, apresentando alargamentos localizados que chegam a 4 mm. A posição destes alargamentos varia, bem como a posição de cada uma das frentes de chamas instantâneas, seguindo as flutuações do escoamento. A região onde o OH é detectado no escoamento médio apresenta um alargamento até  $y \approx 1,2D$ , que corresponde à região onde há maior oscilação da frente de chama, conforme pode ser visto nos campos instantâneos. A maior concentração de OH no campo médio é encontrada em  $y/D \approx 0,4$ , enquanto nos campos instantâneos a maior intensidade de fluorescência encontram-se no centro das frentes de chamas, com sua posição variando no eixo  $y$  entre  $0,4D$  e  $1,2D$ .

O exame do campo de vetores velocidade nas figuras 5.56 e 5.57 mostra que o jato de combustível mantém sempre a sua posição central e termina com a formação de uma região de recirculação. O ponto de término do jato

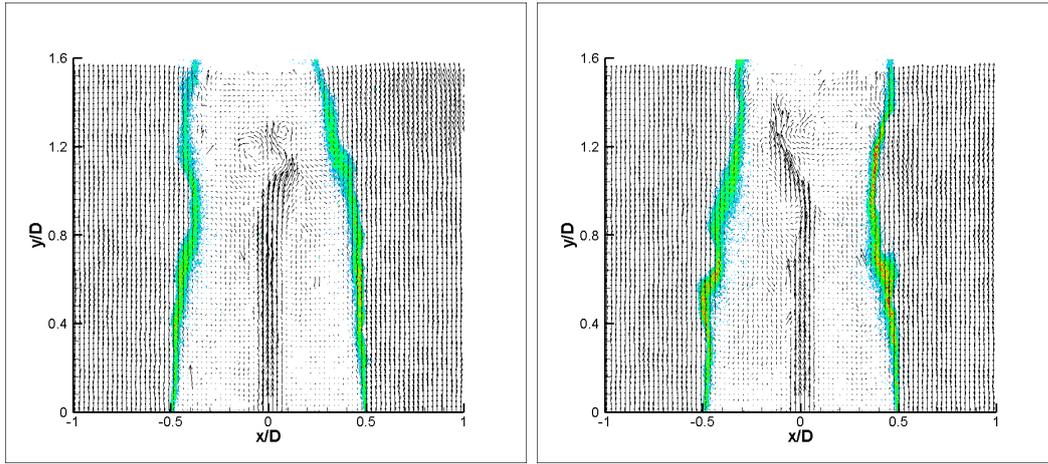
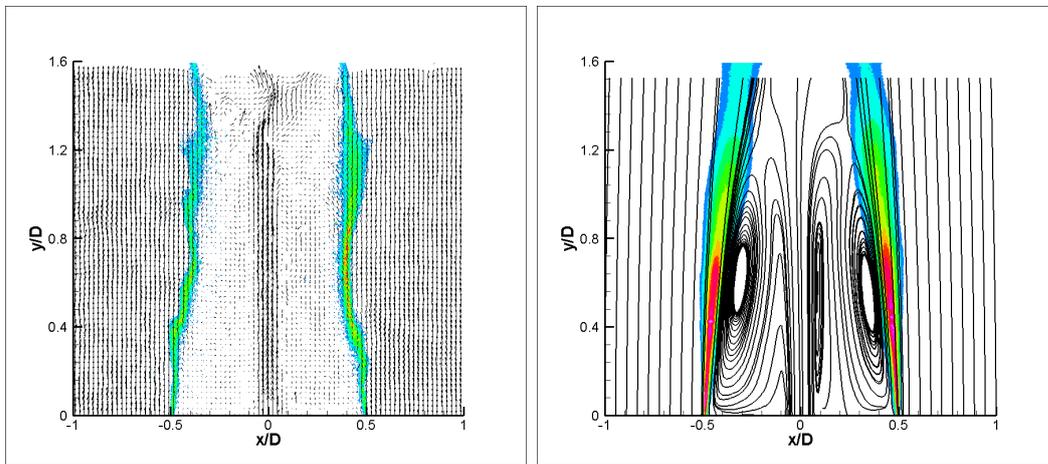


Figura 5.56: Campo de vetores velocidade e de fluorescência de OH para duas medições instantâneas obtidas para o caso H1.



5.57(a): medição instantânea

5.57(b): escoamento médio

Figura 5.57: Campo de vetores velocidade e de fluorescência de OH para uma medições instantâneas (a) e linhas de corrente e campo de fluorescência média de OH para o escoamento médio (b), obtidas para o caso H1.

( $U_j < 0$ ) oscila entre  $y = 1,1D$  e  $y = 1,6D$ , tal variação é acompanhada da variação do campo de velocidade na região de mistura do jato, refletindo-se na posição da frente de chama. O escoamento médio apresenta assimetria nas proximidades do jato, a qual é visualizada pelo surgimento de uma segunda região de recirculação apenas à direita do jato. Não pode ser totalmente descartada a possibilidade desta região de recirculação ser fruto da pequena quantidade de partículas traçadoras nesta região. Outra explicação possível seria a existência de uma pequena assimetria do jato do combustível, do ar do anular ou mesmo do exaustor de ar do laboratório. Esclarecer este ponto necessitaria de um exame mais aprofundado da quantidade de vetores espúrios rejeitados e da infraestrutura laboratorial, o que sairia do escopo do presente

estudo.

Nas figuras 5.58 e 5.59 são apresentados os campos de vetores velocidade e fluorescência de OH para o caso H2, que difere do caso H1 pela maior velocidade do anular (12 m/s contra 8,2 m/s do caso H1). Esta variação na velocidade do anular é sentida pelo jato que passa a ser integralmente disperso na zona de recirculação entre  $y = 0,8D$  e  $y = 1,1D$ . Com isso, a chama passa a oscilar mais para  $y/D > 1,1$ , sendo que, em alguns momentos, surgem extinções localizadas nesta região. Há antecipação da queima que é refletida no aumento na intensidade da fluorescência nas proximidade do corpo rombudo, uma vez que a espessura da frente de chama medida no escoamento instantâneo é praticamente a mesma nos dois casos. Há também o surgimento de dobras acentuadas da frente de chama, como a vista em na figura 5.59 (a).

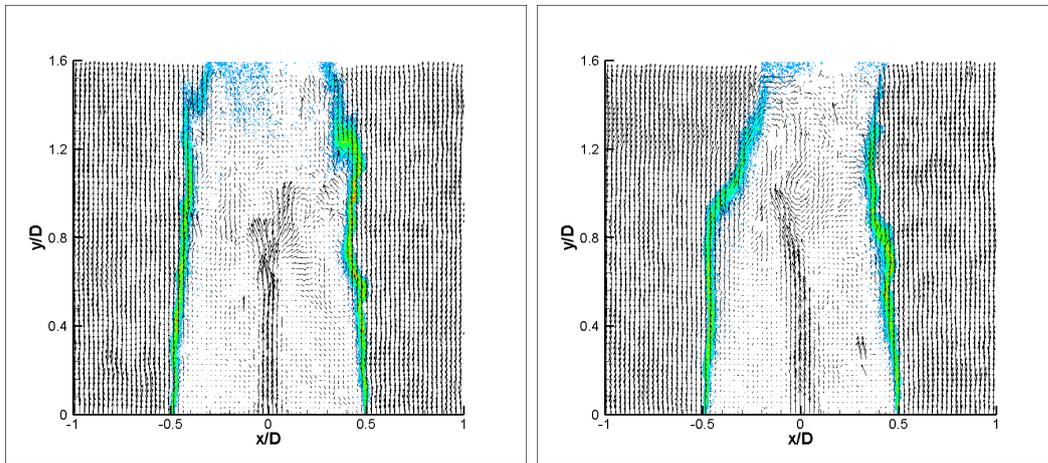


Figura 5.58: Campo de vetores velocidade e de fluorescência de OH para duas medições instantâneas obtidas para o caso H2.

No campo médio, tal como mostrado na figura 5.59 (b), persiste a assimetria nas proximidades do jato, com o surgimento de uma região de recirculação à sua direita. Neste caso há o alongamento das regiões de recirculação, com o surgimento de um terceiro grande vórtice médio centrado em  $y = 1,15D$  a esquerda e em  $y = 1,3D$  a direita do jato. Nota-se que a este terceiro vórtice está associada a presença de um ponto de estagnação, situado em  $x = 0$  e  $y/D = 1,15$ . É possível que a região de recirculação média situada a jusante das duas anteriores também seja um artefato causado pela baixa concentração de partículas traçadoras e pela forte intensidade turbulenta do escoamento nesta região. A maior intensidade da zona de recirculação é responsável por reduzir o comprimento da chama, sendo que no lado direito há baixa presença de OH (intensidade menor que 0,1) a partir de  $y = 1,5D$ . O aumento da largura da região com presença de OH no campo médio, principalmente a partir de  $y = 0,8D$ , é decorrente do aumento da flutuação da posição da frente de

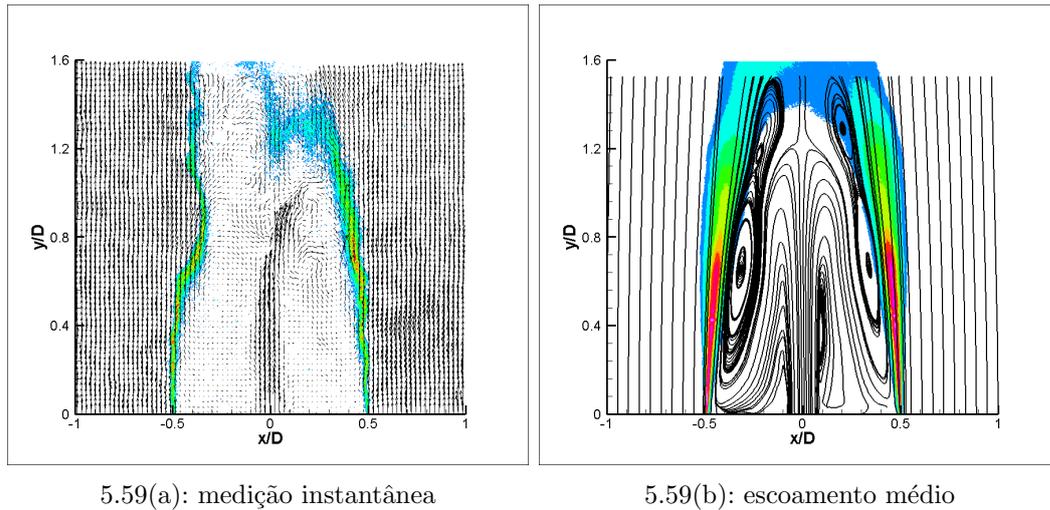


Figura 5.59: Campo de vetores velocidade e de fluorescência de OH para uma medições instantâneas (a) e linhas de corrente e campo de fluorescência média de OH para o escoamento médio (b), obtidas para o caso H2.

chama, a qual é gerada pelo aumento da intensidade turbulenta da zona de recirculação. Este ponto será confirmado mais adiante com o auxílio dos perfis de velocidade e dos componentes do tensor de Reynolds. A intensidade de OH do campo médio indica que a chama se fecha no topo da janela de observação. No entanto, a observação dos campos instantâneos não mostra a chama se fechando no topo da região observada, mas sim a presença de grande flutuação nesta região. Sendo assim, pode-se inferir que o campo médio indica que no topo da região de recirculação há possibilidade de haver chama em todo o intervalo  $-0,5 < x/D < 0,5$  sem que mesma ocupe necessariamente esta região em um determinado instante de tempo.

### Análise quantitativa

Uma comparação quantitativa da influência da variação da velocidade do escoamento de ar anular sobre a topologia do escoamento é obtida através da análise de quatro perfis de velocidades, componentes do tensor de Reynolds e intensidade de fluorescência nas mesmas posições adotadas no estudo de malha e na seleção dos modelos de turbulência (figura 5.14).

Na figura 5.60 estão representados os perfis da componente longitudinal da velocidade. Em ambos os casos a velocidade no anular permanece inalterada e com boa simetria em toda a região de observação. O centro do jato apresenta a mesma velocidade na primeira estação de medição em ambos os casos, no entanto, há um decréscimo de velocidade muito mais acentuado no caso H2, sendo que neste caso a velocidade em  $y = 4D/3$  apresenta valor negativo, indicando que nesta região ocorre forte mistura no escoamento. Para o intervalo

$0, 1 \leq |x/D| \leq 0, 4$  é possível constatar o surgimento de assimetria no primeiro perfil. No decorrer do escoamento, tal assimetria é reduzida sendo que, para o caso H2, esta redução é mais importante, indicando que a maior velocidade do anular tende a reduzir a influência da assimetria do escoamento.

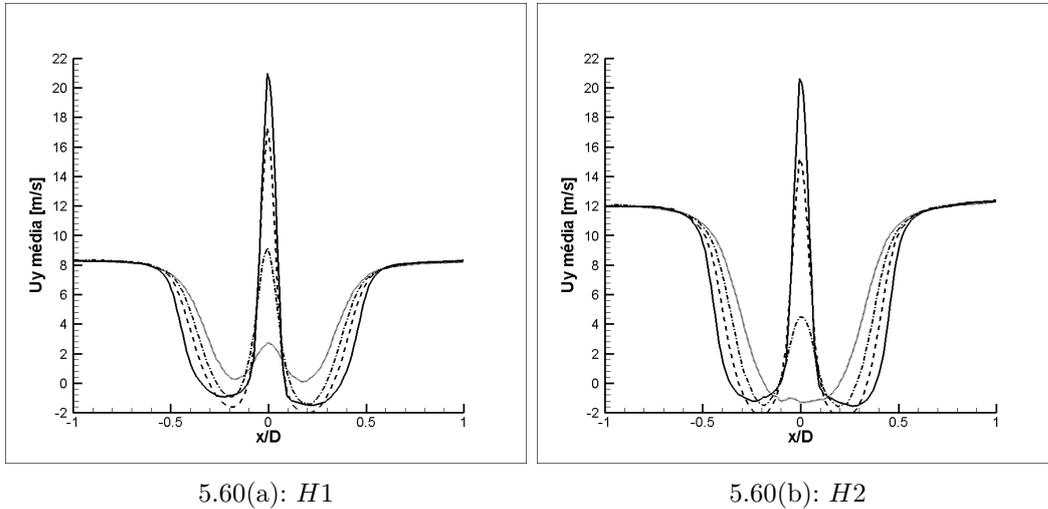


Figura 5.60: Perfis médios de velocidade na direção  $y$  para os casos H1 e H2. —  $y = D/3$ , - -  $y = 2D/3$ , - . -  $y = D$ , ...  $y = 4D/3$ .

Tal como mostrado na figura 5.61, a influência do escoamento é mais sentida no campo de velocidade transversal. Em um escoamento axissimétrico seria esperado que esta componente fosse nula ao longo do eixo de simetria, no entanto, a mesma apresenta valores negativos nos três primeiros perfis para ambos os casos. Além disso, era esperado que o lado direito e o lado esquerdo exibissem o mesmo comportamento, mas com sinais inversos, o que não foi constatado nas medições. Comparando os dois casos, é possível verificar que a evolução deste componente de velocidade é similar do lado esquerdo do jato, mas que no caso H2 o módulo é maior. Uma redução acentuada deste componente é observada no caso H2 a direita do jato ( $0 < x/D < 0, 3$ ) em  $y = 4D/3$ .

Na figura 5.62 é apresentada a evolução do componente  $yy$  do tensor de Reynolds. Ambos os casos exibem comportamento similar, no entanto, o caso H2, por corresponder à maior velocidade no anular apresenta maior intensidade turbulenta no escoamento anular. Isto resulta em maior valor deste componente do tensor de Reynolds. A maior intensidade de flutuações turbulentas, na região compreendida entre o centro do jato e a borda do corpo rombudo, favorece o transporte dos reagentes para a chama, o que pode acelerar a sua queima. Nos dois primeiros perfis é possível constatar uma grande assimetria nas proximidades do jato, o que está de acordo com a assimetria encontrada para os campos de velocidade média.

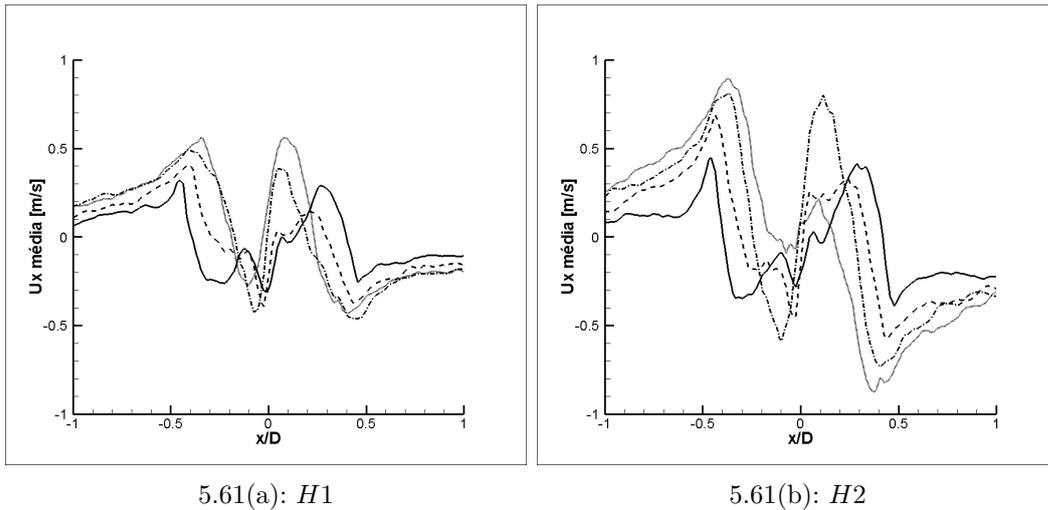


Figura 5.61: Perfis médios de velocidade na direção  $x$  para os casos H1 e H2.  $\text{— } y = D/3$ ,  $\text{-- } y = 2D/3$ ,  $\text{-.- } y = D$ ,  $\text{... } y = 4D/3$ .

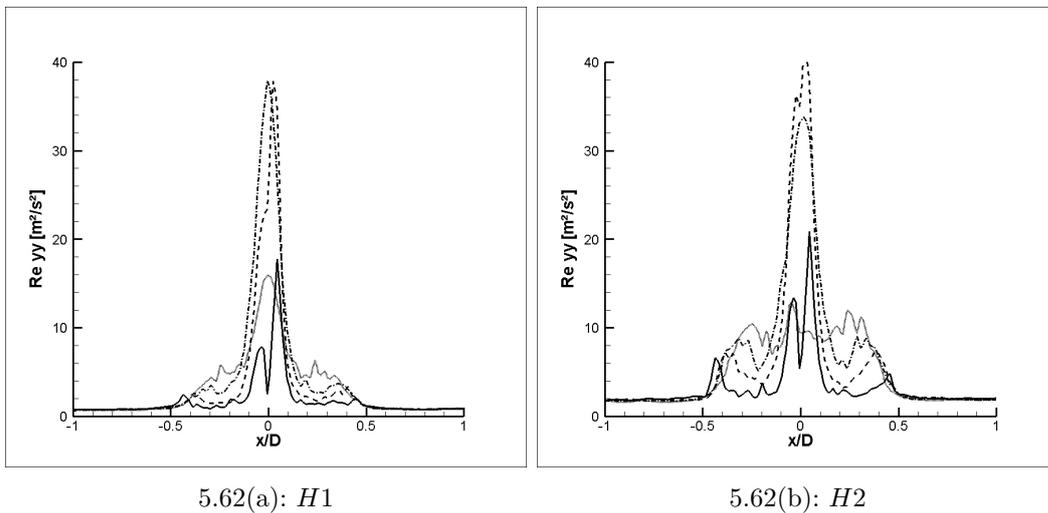


Figura 5.62: Perfis do componente  $yy$  do tensor de Reynolds para os casos H1 e H2.  $\text{— } y = D/3$ ,  $\text{-- } y = 2D/3$ ,  $\text{-.- } y = D$ ,  $\text{... } y = 4D/3$ .

O componente  $xx$  do tensor de Reynolds também apresenta maior intensidade para o caso H2, conforme pode ser visto na figura 5.63. Constatase também que, no segundo caso, há um aumento mais rápido do valor deste componente no centro do jato, indicando que o escoamento externo exerce maior influência sobre o desenvolvimento do jato neste caso. Ao contrário do observado para o componente  $yy$  e para os componentes de velocidade, este componente apresenta boa simetria.

Assim como ocorreu para o componente  $xx$  do tensor de Reynolds, o componente  $xy$  apresentou boa simetria nas proximidades do jato, no entanto, no lado direito, o escoamento anular apresenta valores diferentes de zero (-0,2 para o caso H1 e -0,4 para o H2), porém com derivada nula, conforme pode

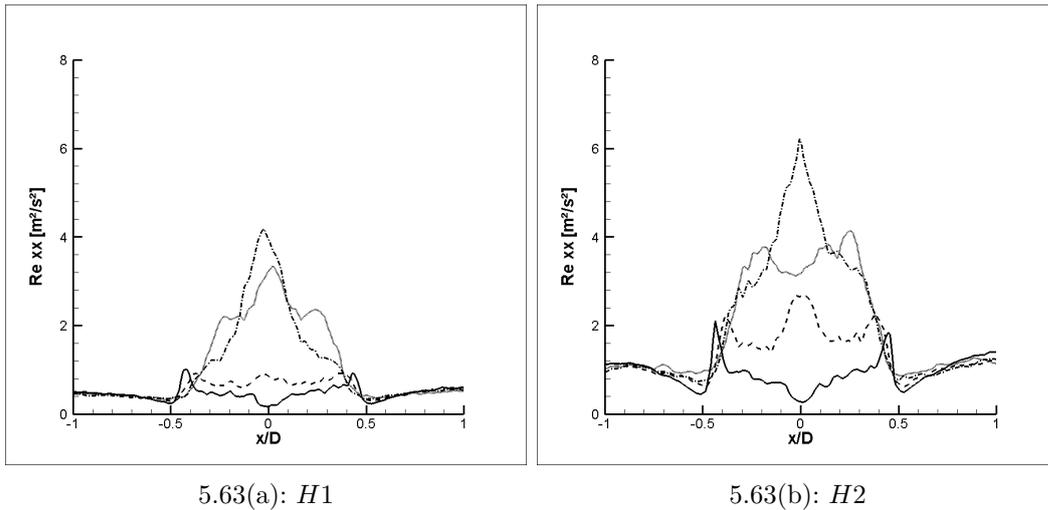


Figura 5.63: Perfis do componente  $xx$  do tensor de Reynolds para os casos H1 e H2.  $\text{— } y = D/3, \text{ -- } y = 2D/3, \text{ \dots } y = D, \text{ - \cdot - } y = 4D/3$ .

ser visto na figura 5.64. Em todos os perfis, o transporte turbulento, isto é o negativo da derivada deste componente do tensor de Reynolds, aponta para o centro do jato em suas proximidades ( $0, 1 \leq |x/D| \leq 0, 2$ ), invertendo-se em seguida e mudando de sentido novamente em  $x \approx 0, 4D$  no caso H1 e  $x \approx 0, 44D$  no caso H2. Constata-se, também, que o valor máximo deste componente ocorre em  $y = D$  no caso H1 e em  $y = 2D/3$  no caso H2, sendo que neste ultimo há uma maior intensidade na região  $0, 2 \leq |x/D| \leq 0, 4$  nos dois últimos perfis.

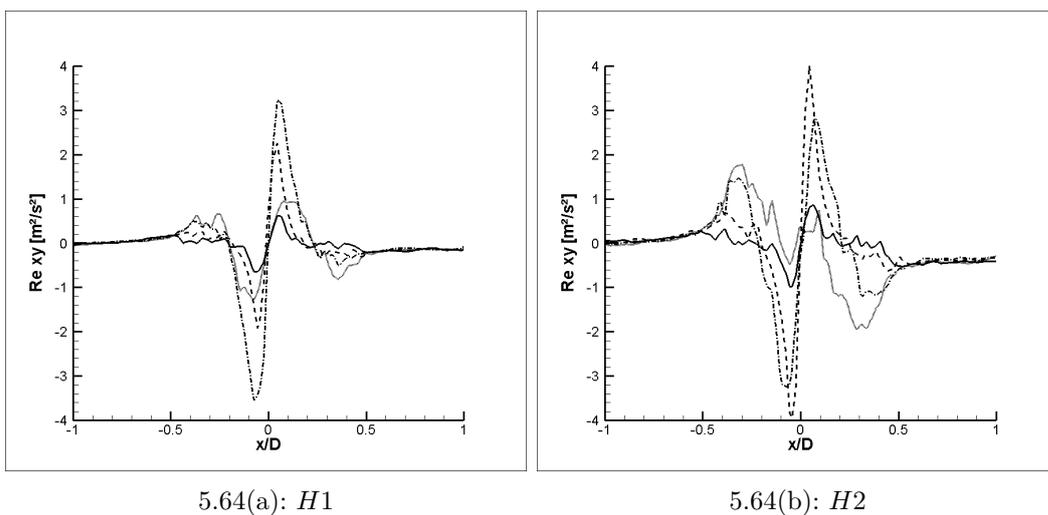


Figura 5.64: Perfis do componente  $xy$  do tensor de Reynolds para os casos H1 e H2.  $\text{— } y = D/3, \text{ -- } y = 2D/3, \text{ \dots } y = D, \text{ - \cdot - } y = 4D/3$ .

## Luminescência do OH

A análise da evolução dos perfis de luminescência do OH, mostrada na figura 5.65, permite constatar que a frente de chama média está ancorada na borda do corpo rombudo e tende a se aproximar do centro, a medida que avança a jusante do escoamento. Vale lembrar que não é possível realizar comparações diretas entre os dois casos, pois os valores de intensidade foram normalizados caso a caso. A maior intensidade de fluorescência é encontrada no primeiro perfil para H1 e no primeiro e segundo perfis para H2, decaindo em seguida. No caso H2 é detectado OH em toda a extensão do corpo rombudo, isto é,  $|x/D| \leq 0,5$ , no ultimo perfil, o que poderia indicar que a chama tem uma pequena probabilidade de se fechar nesta região, assim como ocorre com a chama de uma vela. No caso H1, os perfis  $y = D/3$  e  $y = D$  apresentam boa simetria, enquanto para o caso H2, apenas o perfil  $y = D$  apresenta tal característica.

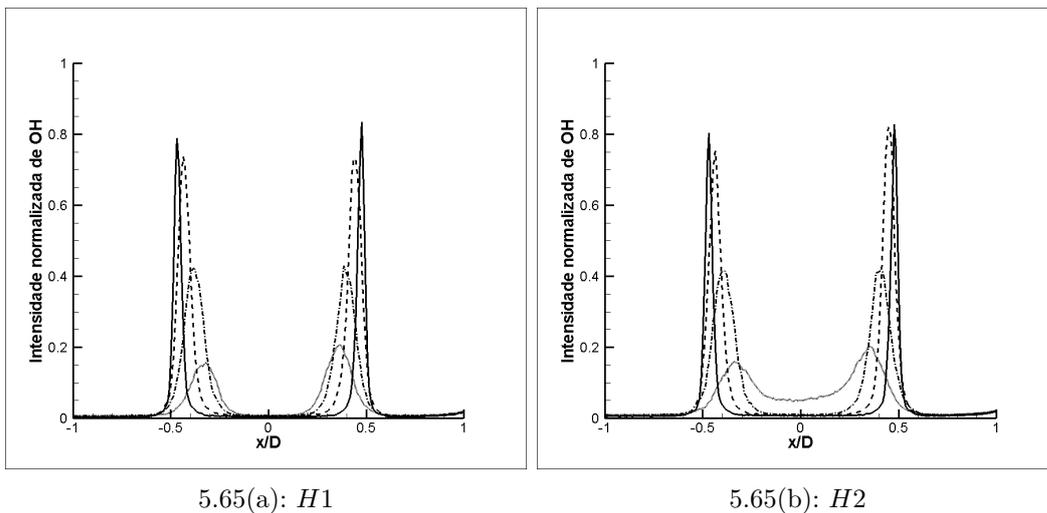


Figura 5.65: Perfis médios da intensidade de luminescência do OH para os casos H1 e H2. —  $y = D/3$ , --  $y = 2D/3$ , ...  $y = D$ , - . .  $y = 4D/3$ .

De uma forma geral, os dois casos estudados apresentam características muito próximas. Limitações de vazão de combustível e de ar no anular impediram que fossem estudados regimes diferentes para a combustão do hidrogênio com o ar.

### 5.4.2

#### Comparação numérico experimental

Nesta seção são discutidos os resultados numéricos obtidos para os casos reativos (H1 e H2), com base nos resultados experimentais médios apresentados

na seção anterior. O sumário das condições de contorno adotadas para os casos H1 e H2 encontra-se na tabela 5.4.

Tabela 5.4: Sumário das condições de contorno adotadas para o caso H1 e H2.

	Entrada de Combustível	Entrada de Ar no Anular	
		H1	H2
$U_x$	0	0	0
$U_y$	15,15 m/s	8,2 m/s	12 m/s
$U_z$	0	0	0
$l_t$	$1.10^{(-4)}\text{m}$	$1.10^{(-4)}\text{m}$	0,01m
$I$	2%	10%	10%

Inicialmente é feita uma comparação qualitativa dos campos de OH e das linhas de corrente médias para o caso H1, tal como mostrado na figura 5.66. O campo de fração mássica foi normalizado e representado com o mesmo padrão de cores do campo normalizado de fluorescência de OH, mas a comparação deve ser qualitativa, uma vez que estão sendo comparadas duas grandezas normalizadas relacionadas, porém diferentes. Nesta figura fica claro que a topologia do escoamento obtido numericamente difere substancialmente da experimental. Os resultados experimentais indicam a formação de dois vórtices contra-rotativos que se estendem do corpo rombudo até aproximadamente  $y/D = 1,3$ . Já os resultados numéricos indicam que o vórtice mais próximo ao jato tem um comprimento menor, terminando em  $y/D = 0,9$ , e é centrado em  $y/D = 0,35$ , enquanto o experimental é centrado em  $y/D = 0,55$ . O vórtice mais externo alonga-se até  $y/D = 1,4$ , com o aparecimento de um terceiro núcleo em  $y = D$ . Além disso, dois pontos de estagnação estão presentes no resultado calculado, em  $y/D = 0,9$  e  $y/D = 1,4$ . Entre esses pontos ocorre reversão do sentido do escoamento.

Esta topologia calculada faz com que o escoamento proveniente do jato seja englobado pela região de recirculação antes de  $y = D$ , enquanto os resultados experimentais indicam que as linhas de corrente próximas ao centro do jato ultrapassam esta região com curvatura que acompanha a superfície externa do vórtice mais próximo ao centro do jato. Esta estrutura do escoamento calculado tende a levar mais combustível para a base da chama, aumentando substancialmente a espessura da frente de chama nesta região. Além disso, esta estrutura promove uma maior curvatura da frente de chama, que atinge a linha de simetria em  $y/D = 0,9$  levando ao fechamento da chama média.

Para aprofundar o estudo da topologia do escoamento são traçados os perfis numéricos e experimentais dos componentes médios da velocidade e do tensor de Reynolds. Na figura 5.67 são apresentadas as duas componentes da

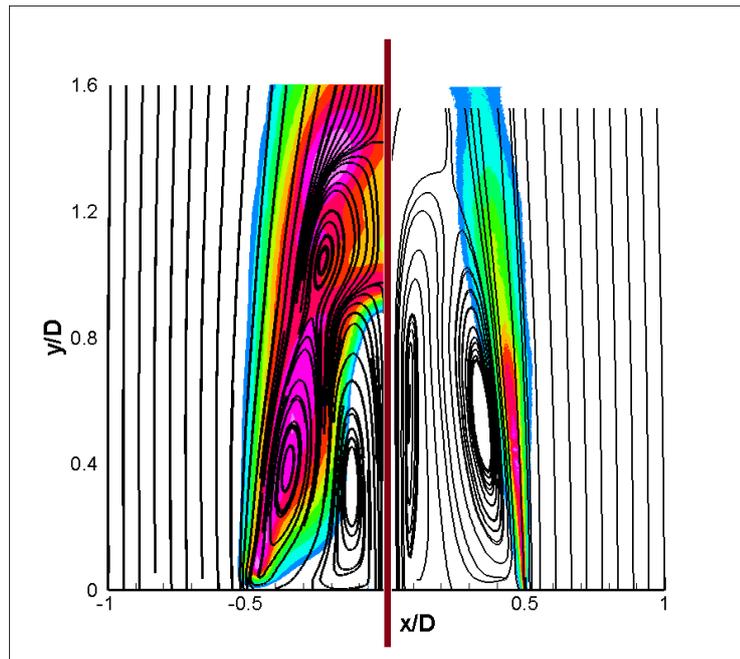


Figura 5.66: Comparação dos resultados obtidos para o caso H1. À esquerda, linhas de corrente e campo de fração mássica de OH obtidos numericamente, à direita, linhas de corrente e campo de fluorescência média de OH obtidos experimentalmente.

velocidade para o caso H1. Em  $y = D/3$  há uma boa concordância entre os valores calculados e os medidos para a componente longitudinal, sendo que o maior desvio é da ordem de 2 m/s em  $x/D = 0,1$ . Nesta mesma posição, a componente transversal calculada apresenta um comportamento bem distinto da experimental. Nas outras posições há uma redução acentuada da componente longitudinal da velocidade calculada no jato, isto é em  $x/D < 0,05$ , que não acompanha o resultado experimental, sendo que a maior diferença ocorre em  $y = D$ , onde o valor calculado é -0,4m/s enquanto o medido é 9,5m/s. A componente transversal mantém a pouca concordância com os valores experimentais, aproximando-se dos mesmos apenas em  $y = D$ . Tal resultado pode indicar uma imprecisão na modelagem, mas pode, também, ser fruto de erros na medição desta componente, devido ao seu baixo módulo e ao número reduzido de partículas no escoamento relativo.

Na figura 5.68 são apresentados os componentes  $yy$  e  $xx$  do tensor de Reynolds para o caso H1. Ambas as componentes calculadas apresentaram os mesmos valores medidos na região do anular ( $x/D > 0,5$ ) e valores muito diferentes dos experimentais nas demais regiões. A componente  $yy$  calculada apresenta boa concordância na primeira posição nas proximidades do jato ( $x/D < 0,1$ ), mas subestima os valores para os demais perfis, chegando a ser 13 vezes menor em  $y = D$ . A componente  $xx$  calculada apresenta valores

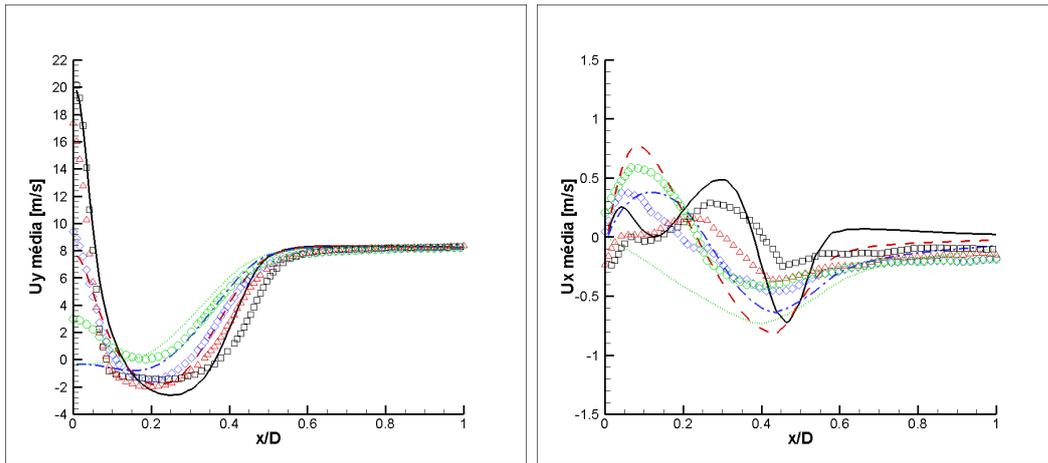


Figura 5.67: Perfis médios de velocidade na direção  $y$  e  $x$  para o casos H1. Numéricos: —  $y = D/3$ , - -  $y = 2D/3$ , - . -  $y = D$ , . . .  $y = 4D/3$ , experimentais  $\square$   $y = D/3$ ,  $\triangle$   $y = 2D/3$ ,  $\diamond$   $y = D$ ,  $\circ$   $y = 4D/3$ .

superestimados em até 10,5 vezes na região do corpo rombudo, nos dois primeiros perfis, e valores subestimados em até 3,2 vezes nas proximidades do jato nas duas últimas.

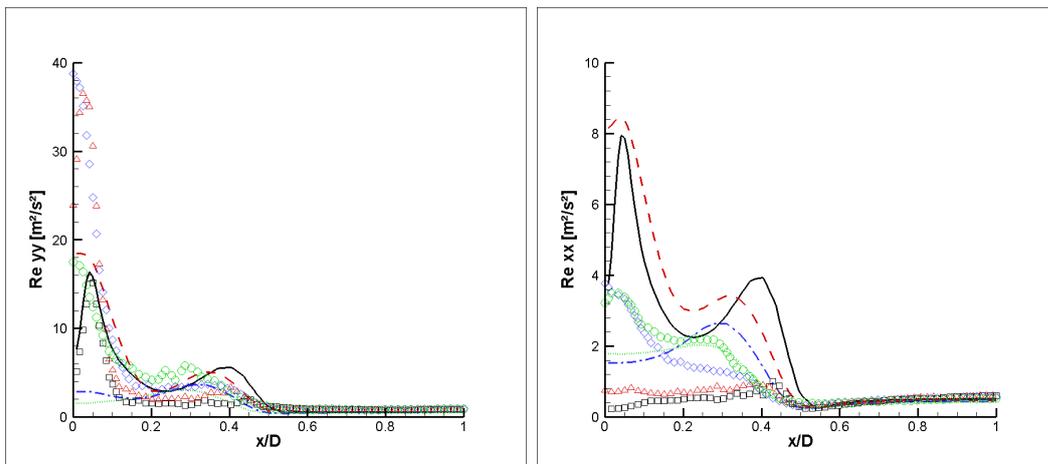


Figura 5.68: Perfis médios dos componentes  $yy$  e  $xx$  do tensor de Reynolds para o casos H1. Numéricos: —  $y = D/3$ , - -  $y = 2D/3$ , - . -  $y = D$ , . . .  $y = 4D/3$ , experimentais  $\square$   $y = D/3$ ,  $\triangle$   $y = 2D/3$ ,  $\diamond$   $y = D$ ,  $\circ$   $y = 4D/3$ .

Como ocorre para os componentes  $yy$  e  $xx$ , os valores calculados para o componente  $xy$  não apresentam boa concordância com os valores medidos, conforme pode ser visto na figura 5.69. As medições indicam que, no primeiro perfil, esta componente apresenta máximo de  $0,8 \text{ m}^2/\text{s}^2$  em  $x/D = 0,7$ , o valor do máximo aumenta até atingir  $3,2 \text{ m}^2/\text{s}^2$  em  $y = D$ , onde voltando a diminuir. Já os resultados numéricos indicam que a mesma apresenta seu módulo máximo no primeiro perfil, também em  $x/D = 0,7$ , com valor 5,8 vezes menor. Nas posições seguintes, há uma redução gradativa deste valor. As

medições apontam para valores próximos de zero no intervalo  $0,2 \leq x/D \leq 0,5$  nas três primeiras posições, enquanto os resultados numéricos indicam valores negativos com um máximo de  $-2,8 \text{ m}^2/\text{s}^2$  em  $y = D/3$ . Além da discordância de valor, há uma discordância na direção do transporte turbulento nos dois últimos perfis na região proximidades do jato, ou seja  $x/D \leq 0,1$ , sendo que as medições indicam que o transporte ocorre na direção da frente de chama, enquanto os resultados numéricos indicam que este componente é nulo em  $y = D$  e ocorrem em direção ao jato em  $y = 4D/3$ .

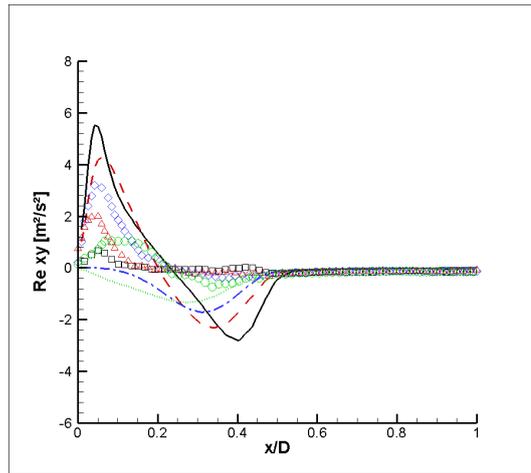


Figura 5.69: Perfis médios do componente  $xy$  do tensor de Reynolds para o casos H1. Numéricos: —  $y = D/3$ , - -  $y = 2D/3$ , - . -  $y = D$ , . . .  $y = 4D/3$ , experimentais  $\square$   $y = D/3$ ,  $\triangle$   $y = 2D/3$ ,  $\diamond$   $y = D$ ,  $\circ$   $y = 4D/3$ .

A supressão do transporte de quantidade de movimento, relacionado aos pequenos valores medidos dos componentes do tensor de Reynolds é condizente com a maior penetração do jato nos experimentos. Inversamente, são os valores elevados dos tensores de Reynolds calculados que explicam a estrutura do escoamento calculado, onde o jato se mistura rapidamente com a esteira.

Na figura 5.70 são apresentadas as linhas de corrente e os campos de fração mássica e de fluorescência de OH para o caso H2. Na linha central ( $x = 0$ ), a modelagem resulta em dois pontos de estagnação, porém apenas um foi observado experimentalmente. Os três vórtices presentes nos resultados experimentais também estão presentes nos resultados numéricos, porém os seus centros estão situados mais próximos ao corpo rombudo. Esta maior aproximação do corpo rombudo favorece a mistura nesta região, antecipando o processo de combustão, o que pode ser visto pela não detecção de OH a jusante de  $y = 1,5D$ . Assim como o ocorrido para o caso H1, a frente de chama obtida numericamente é mais larga que a experimental, comportamento este que é compatível com a maior mistura na proximidade do corpo rombudo. Além disso, a frente de chama calculada dobra-se antes, atingindo a linha de centro

$y/D = 0,7$ , enquanto os resultados experimentais indicam que este encontro ocorre apenas em  $y/D = 1,4$ .

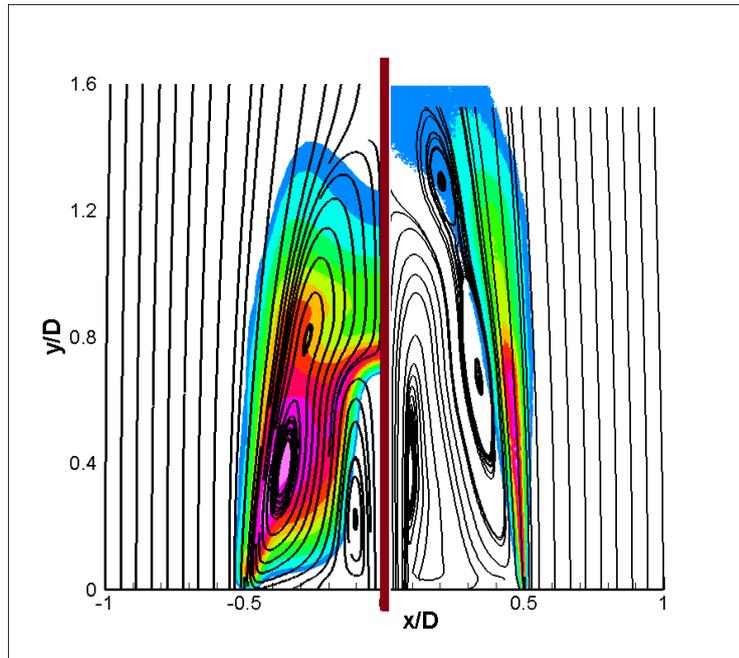


Figura 5.70: Comparação dos resultados obtidos para o caso H2. À esquerda, linhas de corrente e campo de fração mássica de OH obtidos numericamente, à direita, linhas de corrente e campo de fluorescência média de OH obtidos experimentalmente.

O caso H2 apresenta os mesmos padrões de discordância entre os valores obtidos numericamente e experimentalmente, conforme pode ser visto nas figuras 5.71, 5.72 e 5.73. As principais diferenças dos componentes de velocidade para o caso H1 é que o último perfil calculado de velocidade longitudinal apresenta boa concordância com o experimental enquanto há uma inversão no sentido do componente transversal da velocidade calculado para  $x/D < 0,3$  em  $y = 2D/3$  em relação ao valor medido. Para o componente  $xx$  do tensor de Reynolds, destaca-se que os valores calculados no último perfil não foram subestimados como ocorreu para o caso H1.

O componente  $xy$  do tensor de Reynolds (figura 5.73) calculado apresenta resultados diferentes do experimental, também, na região do escoamento anular. No entanto, esta diferença pode ser fruto de uma assimetria no escoamento experimental, conforme foi apresentado na seção 5.4.1. Na região de recirculação é mantido o mesmo padrão de discordância numérico-experimental encontrada para o caso H1, levando em conta o maior valor deste componente no caso H2. A maior diferença para o caso H1 encontra-se em  $y = 2D/3$ , onde os resultados numéricos para o caso H1 apresentaram melhor concordância com os experimentais para a região  $x/D \leq 0,2$ .

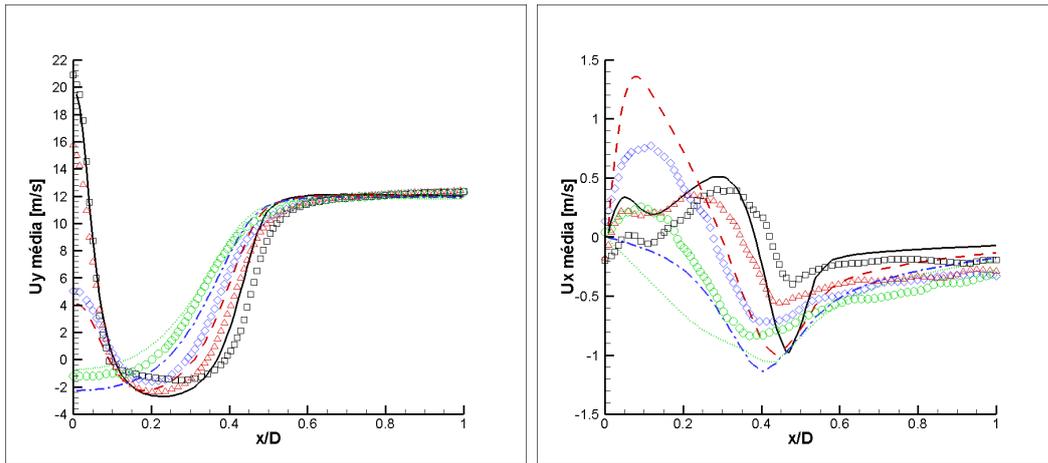


Figura 5.71: Perfis médios de velocidade na direção  $y$  e  $x$  para o casos H2. Numéricos: —  $y = D/3$ , - -  $y = 2D/3$ , - . -  $y = D$ , . . .  $y = 4D/3$ , experimentais  $\square$   $y = D/3$ ,  $\triangle$   $y = 2D/3$ ,  $\diamond$   $y = D$ ,  $\circ$   $y = 4D/3$ .

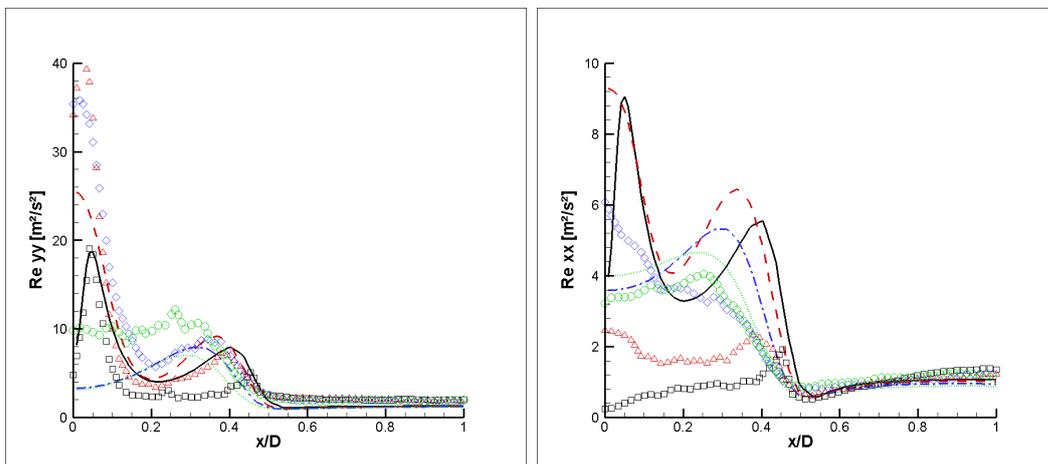


Figura 5.72: Perfis dos componentes  $yy$  e  $xx$  do tensor de Reynolds para o casos H2. Numéricos: —  $y = D/3$ , - -  $y = 2D/3$ , - . -  $y = D$ , . . .  $y = 4D/3$ , experimentais  $\square$   $y = D/3$ ,  $\triangle$   $y = 2D/3$ ,  $\diamond$   $y = D$ ,  $\circ$   $y = 4D/3$ .

Em síntese pode-se afirmar que as inconsistências encontradas nos resultados numéricos para os casos inertes (V1 e V2) foram amplificadas nos casos reativos (H1 e H2). Não há como avaliar a precisão das predições obtidas com o modelo de elementos de chama adotado, uma vez que a combustão é determinada pela taxa de mistura dos reagentes, que por sua vez é determinada pelos campos de velocidade e de flutuações turbulentas que, claramente, não foram calculados de maneira precisa no presente trabalho. Esta imprecisão pode estar relacionada à incapacidade do modelo de turbulência de prever o desenvolvimento do jato de  $H_2$  inicialmente laminar, na região de esteira.

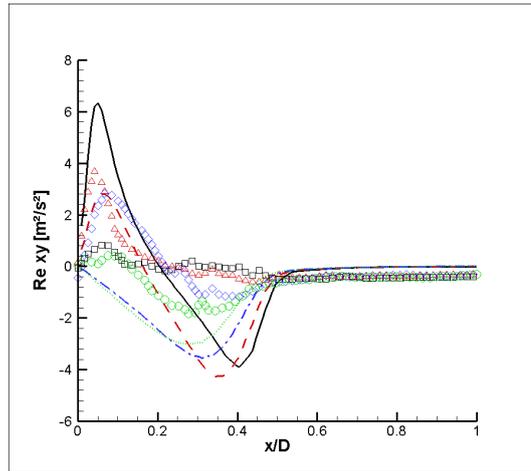


Figura 5.73: Perfis médios do componente  $xy$  do tensor de Reynolds para os casos H2. Numéricos:  $\text{—}$   $y = D/3$ ,  $\text{-- --}$   $y = 2D/3$ ,  $\text{- . -}$   $y = D$ ,  $\text{...}$   $y = 4D/3$ , experimentais  $\square$   $y = D/3$ ,  $\triangle$   $y = 2D/3$ ,  $\diamond$   $y = D$ ,  $\circ$   $y = 4D/3$ .

### 5.4.3 Classificação dos regimes de combustão

Inicialmente as chamas obtidas nos casos H1 e H2 serão classificadas de acordo com o diagrama proposto por Huang e Lin (1994). O primeiro desafio para a implementação desta classificação reside no fato das velocidades do ar anular adotadas no presente trabalho serem maiores que a máxima velocidade estudada por Huang e Lin. Para contornar esta limitação optou-se por extrapolar a linha que separa a região de chama “V” da chama “VI”, o resultado deste procedimento encontra-se na figura 5.74, onde a extrapolação realizada é a linha vermelha tracejada. Segundo esta metodologia, a chama se classificaria como uma chama tipo “V” que é uma chama colada ao corpo rombudo caracterizada por elevada turbulência e pelo surgimento de uma região de garganta, após a qual a luminosidade emitida pela chama aumenta. No entanto, a chama vista no experimento não apresenta elevada turbulência e não apresenta formação de zona de garganta, sendo melhor classificada como uma chama do tipo “I”. Nesta categoria a chama é colada ao corpo rombudo, com baixa turbulência e estabilizada pela recirculação.

Não é surpreendente que a classificação proposta por Huang e Lin (1994) não seja aplicável aos resultados deste experimento, pois o modelo proposto pelos autores não leva em conta a cinética da combustão, e o combustível adotado pelos autores ( $95\%C_3H_8/3$ ,  $5\%C_2H_6/1$ ,  $5\%C_4H_{10}$ ) apresenta propriedades de queima muito diferentes daquelas do hidrogênio.

Foi então adotada a classificação da chama de acordo com a metodologia proposta por Caetano *et al.* (2009) que leva em conta a cinética da combustão do hidrogênio. No presente trabalho, os valores de Reynolds turbulento e da

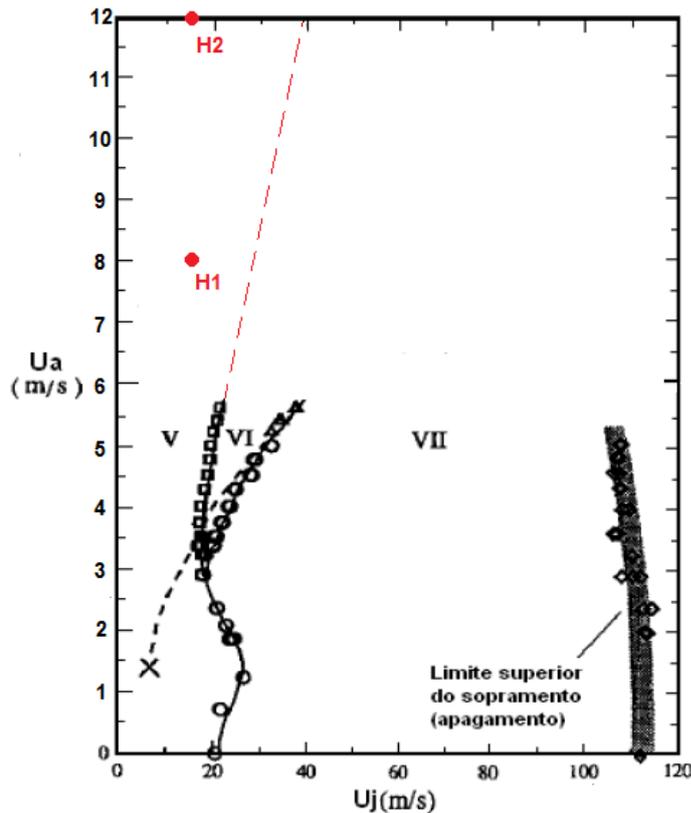


Figura 5.74: Classificação das chamas H1 e H2 de acordo com diagrama proposto por Huang e Lin (1994).

frequência de oscilação turbulenta foram obtidos a partir de 30 pontos sobre a superfície de chama (caracterizada pela concentração de OH) obtida numericamente e a dissipação escalar foi obtida com auxílio do software CHEMKIN-II. Conforme pode ser visto na figura 5.75, as chamas H1 e H2 são classificadas no regime de elementos de chama, sendo que há uma grande sobreposição de valores, o que confirma que não há diferença significativa entre os dois casos. Ao aumentar a velocidade do anular, foi constatado um pequeno aumento do número de Reynolds turbulento e da frequência de oscilação turbulenta, que reduziu o máximo valor de Damköler. Esta caracterização do regime como “elementos de chama” se mostrou aderente aos resultados observados experimentalmente.

Convém ressaltar, que o número de Reynolds turbulento sobre a superfície de chama, oscilando entre 8,8 e 11,9 para o caso H1 e entre 10 e 14,3 para o caso H2. Tal resultado indica que em ambos os casos a chama está ancorada em uma região com escoamento turbulento. A maior frequência de oscilação turbulenta calculada para ambos os casos é da 6KHz, frequência esta que está abaixo do limite de oscilação das partículas traçadoras empregadas, garantindo assim que as partículas são capazes de acompanhar o escoamento.

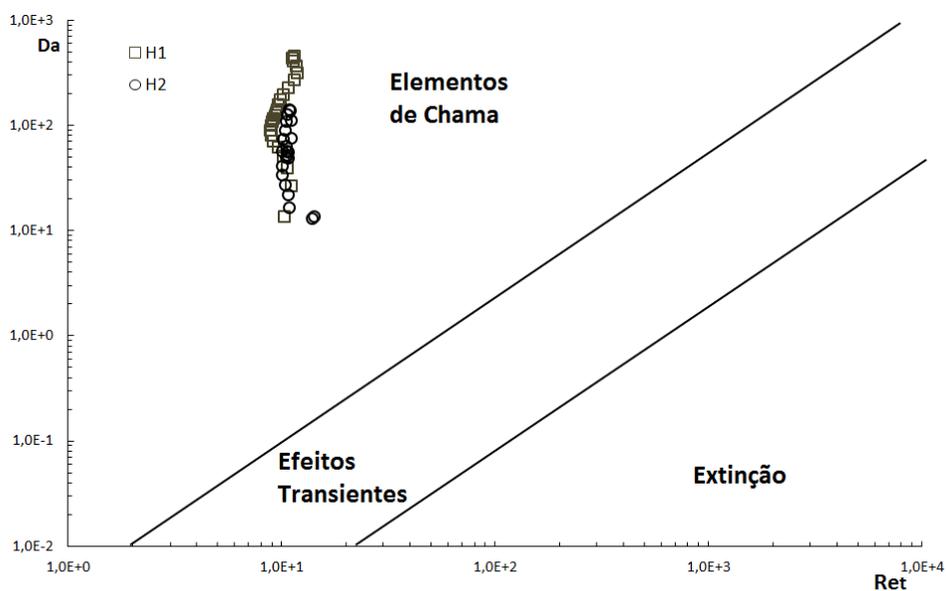


Figura 5.75: Classificação das chamas H1 e H2 de acordo com diagrama proposto por Caetano *et al.* (2009).

## 6

### Conclusões e Sugestões

Neste capítulo são apresentadas as principais conclusões do estudo e são propostos trabalhos futuros para aprofundamento do conhecimento do comportamento das chamas de hidrogênio em ar estabilizadas a jusante de corpos rombudos.

#### 6.1

##### Conclusões e Contribuições

A revisão bibliográfica neste trabalho permitiu identificar os principais laboratórios que realizam experimentos com chama estabilizada a jusante de corpos rombudos. Foi visto que poucas instituições realizaram medidas simultâneas de concentração de radicais e de velocidades em um plano, objeto deste trabalho. Um destaque deve ser dado ao laboratório de pesquisas em termo fluidos do departamento de engenharias aeroespacial, mecânica e mecatrônica (AMME) da Universidade de Sydney, pois grande parte dos trabalhos numéricos disponíveis na literatura utilizaram resultados obtidos por este grupo para a validação de suas simulações.

Foram também identificados os principais trabalhos de simulação numérica deste tipo de chama turbulenta. Neste levantamento foram listados os parâmetros utilizados para a delimitação do domínio, confecção da malha de cálculo, bem como os modelos numéricos empregados por cada autor. Constatou-se uma tendência à adoção de modelos de transporte da função densidade de probabilidade dos escalares para descrever a interação entre a turbulência e a combustão. No entanto, tais modelos demandam grandes esforços de programação e elevada capacidade computacional para a sua implementação. Foi constatado, ainda, que a adoção de tais modelos nem sempre gera resultados melhores que os obtidos com modelos mais simples. Como este trabalho não é focado em aspectos computacionais, optou-se pela utilização de um modelo de elementos de chama para a descrição da combustão turbulenta.

A configuração do experimento leva a uma baixa concentração de partículas traçadoras do escoamento na região de interação do jato com a esteira turbulenta formada a jusante do corpo rombudo. Esta baixa concentração de partículas leva ao aparecimento de vetores espúrios nos campos de velocidade instantânea levantados com PIV. Esses vetores não exercem grande influência nos campos médios de velocidade, mas tem grande influência nos segundos

momentos estatísticos, levando à uma predição errônea dos componentes do tensor de Reynolds. Foi investigado o efeito da dimensão da janela de interrogação e de diferentes parâmetros de pós processamento. Foi assim constatado que a janela de 64x64 *pixels* apresenta um menor número de vetores espúrios, mas sua baixa resolução prejudica a medição dos componentes do tensor de Reynolds, principalmente em regiões com grande gradiente de velocidade. Já a janela de 32x32 *pixels* capta bem os fenômenos turbulentos, porém é altamente influenciada pelos vetores espúrios. A utilização de janelas de 32x32 com pós processamento possibilitou a eliminação dos vetores espúrios com maiores módulos, melhorando significativamente a qualidade das medições dos componentes do tensor de Reynolds.

Foi realizado um estudo de sensibilidade do resultado calculado à escolha da malha computacional, que permitiu determinar a melhor malha entre as três ensaiadas. No entanto, foi detectado que todas as malhas levaram a uma laminarização do escoamento no centro do jato que pode ser provocada pelo baixo número de elementos na direção radial da malha do duto que leva o combustível à saída do jato. Foi também realizada uma seleção de modelos de turbulência, que indicou que o modelo de tensores de Reynolds (RSM) apresenta os melhores resultados para uma gama maior de condições de contorno.

O estudo dos campos de velocidade, intensidade de fluorescência do OH e dos componentes do tensor de Reynolds permitiu constatar que os casos ensaiados apresentam frentes de chama sem quebras e com espessura semelhante. O segundo caso é caracterizado por maior intensidade turbulenta no escoamento anular e uma maior recirculação sobre o corpo rombudo, resultando em maior valor dos componentes do tensor de Reynolds nestas regiões. Esta maior intensidade de flutuações turbulentas na região compreendida entre o centro do jato e a borda do corpo rombudo favorece o transporte dos reagentes em direção à frente de chama, o que pode acelerar a sua queima. Outra diferença encontrada no segundo caso é a presença de uma região com dobramentos e possíveis quebras da frente de chama próxima à saída do plano de observação.

As medições apresentaram pequena assimetria no escoamento. A razão do surgimento desta assimetria não pode ser avaliada, pois as instalações laboratoriais foram convertidas para operação com combustível líquido imediatamente após o término dos experimentos desta dissertação.

As simulações do escoamento reativo apresentaram problemas de convergência acompanhados de grandes discrepâncias na comparação com os resultados experimentais. As discrepâncias encontradas nos resultados numéricos para os casos inertes (V1 e V2), foram amplificadas nos casos reativos (H1 e H2).

Não foi possível como avaliar a exatidão das predições obtidas com o modelo de elementos de chama adotado, uma vez que a combustão é determinada pela taxa de mistura dos reagentes, que por sua vez é determinada pelos campos de velocidade e de flutuações turbulentas, que claramente não foram calculados de maneira precisa no presente trabalho.

O regime das chamas dos casos H1 e H2 foram classificadas como “elementos de chama” de acordo com a metodologia proposta por Caetano *et al.* (2009), classificação esta que se mostrou coerente com os resultados experimentais. A metodologia de classificação proposta por Huang e Lin (1994) não se mostrou aplicável ao resultados deste experimento, pois a mesma não leva em conta a cinética da combustão.

## 6.2

### Sugestão de Trabalhos Futuros

No que diz respeito à parte experimental deste estudo, existem três desenvolvimentos imediatos (i) estudo de diferentes regimes de combustão, (ii) medição do terceiro componente da velocidade (iii) obtenção de medidas quantitativas de concentração de OH. O estudo de novos regimes depende de adaptações no aparato experimental, de forma a permitir o aumento da vazão de hidrogênio e ar e da capacidade de exaustão. Outra opção seria a alteração da geometria do corpo rombudo, de forma a conseguir obter maiores números de Reynolds do jato com as mesmas vazões de combustível.

O aparato experimental do laboratório foi concebido para a realização de medições estereoscópicas de velocidade com a técnica de PIV. No entanto, uma das câmaras de captura não operava no momento dos experimentos, impossibilitando a medição do terceiro componente da velocidade no plano.

A obtenção de medidas quantitativas de concentração do radical OH requer a calibração do sinal de luminescência em um experimento com chama laminar de referência em condições de temperatura, pressão e composição semelhantes à da chama a ser estudada.

Os resultados numéricos obtidos podem ser amplamente melhorados. Primeiramente pode-se aumentar o refinamento da malha no interior do duto que leva o combustível para a superfície do corpo rombudo, de forma a evitar a relaminarização do escoamento em seu interior. Outra melhoria seria a adoção de modelos aprimorados, tais como os que utilizam transporte da função densidade de probabilidade dos escalares reativos. Conforme exposto por Namazian *et al.* (1989), a adoção de simulações em regime transiente poderia reduzir as instabilidades numéricas provocadas pelo caráter transiente do escoamento na zona de mistura. A evolução da capacidade computacional e

dos modelos também permite a adoção de metodologia LES para a simulação de escoamentos com chama estabilizada a jusante de corpos rombudos, o que possibilitaria estudos mais detalhados da interação da turbulência com a combustão.

## Referências Bibliográficas

- [ANSYS, 2010a] ANSYS. **ANSYS FLUENT Theory Guide - Release 13.0**, 2010.
- [ANSYS, 2010b] ANSYS. **ANSYS FLUENT User's Guide - Release 13.0**, 2010.
- [Alvarez Aquino, 2006] ALVAREZ AQUINO, M. A.. **Desenvolvimento de um queimador de gás natural para estudos da combustão em escoamentos turbulentos**. Master's thesis, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, RJ, Brazil, 2006.
- [Alvarez Aquino *et al.*, 2007] ALVAREZ AQUINO, M. A.; FIGUEIRA DA SILVA, L. F. ; AZEVEDO, L. F. A.. **Non-reactive flowfield characterization of a natural gas burner for turbulent combustion studies**. In: 19TH INTERNATIONAL CONGRESS OF MECHANICAL ENGINEERING - COBEM, Ouro Preto, MG, Brazil, 2007. ABCM.
- [Andrade *et al.*, 2011] ANDRADE, F. O.; FIGUEIRA DA SILVA, L. F. ; MURA, A.. **Large eddy simulation of turbulent premixed combustion at moderate Damköhler numbers stabilized in a high-speed flow**. *Combustion Science and Technology*, 183:645–664, 2011.
- [Arnold, 1933] ARNOLD, J. H.. **Vapor viscosities and the Sutherland equation**. *Journal of Chemical Physics*, 1:170, 1933.
- [BP, 2010] BP. **Statistical review of world energy June 2010**. Technical report, BP, UK, 2010.
- [Benim e Syed, 1998] BENIM, A.; SYED, K.. **Laminar flamelet modelling of turbulent premixed combustion**. *Applied Mathematical Modelling*, 22:113–126, 1998.
- [Boersma, 1999] BOERSMA, B. J.. **Direct numerical simulation of a turbulent reacting jet**. Center for Turbulence Research - Annual Research Briefs 1999, p. 59–72, 1998.
- [Boussinesq, 1877] BOUSSINESQ, J.. **Essai sur la théorie des eaux courantes**. Mémoires présentés par divers savants à l'Académie des Sciences, XXIII:46–50, 1877.

- [Burke *et al.*, 2012] BURKE, M.; CHAOS, M.; JU, Y.; DRYER, F. ; KLIPPENSTEIN, S.. **Comprehensive  $H_2/O_2$  kinetic model for high-pressure combustion.** Journal of Chemical Kinetics, 44:444–474, 2012.
- [CFD-Online, 2011] CFD ONLINE. **SST k-omega model**, Fevereiro 2011. [www.cfd-online.com/Wiki/SST\\_k-omega\\_model](http://www.cfd-online.com/Wiki/SST_k-omega_model).
- [Caetano *et al.*, 2009] CAETANO, N. R.; DA CUNHA JUNIOR, A. B.; NOVGORODCEV JR., A. R. ; FIGUEIRA DA SILVA, L. F.. **Combustion regime identification on a bluff-body burner by using experimental PLIF-OH images and rans numerical simulations.** In: 20<sup>th</sup> INTERNATIONAL CONGRESS OF MECHANICAL ENGINEERING - COBEM, Gramado, RS, Brazil, 2009. ABCM.
- [Caetano, 2012] CAETANO, N. R.. **Estudo experimental de chamas turbulentas não pré-misturadas empregando técnicas de diagnóstico laser, PLIF e PIV, simultaneamente.** Tese de doutorado, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro - RJ, Brasil, 2012.
- [Correa e Gulati, 1992] CORREA, S. M.; GULATI, A.. **Measurements and modeling of a bluff body stabilized flame.** Combustion and Flame, 89:195–213, 1992.
- [DOE, 2002] UNITED STATES DEPARTMENT OF ENERGY - DOE. **National hydrogen energy roadmap.** Technical report, DOE, Washington - DC, USA, 2002. [http://www1.eere.energy.gov/hydrogenandfuelcells/pdfs/national\\_h2\\_roadmap.pdf](http://www1.eere.energy.gov/hydrogenandfuelcells/pdfs/national_h2_roadmap.pdf).
- [DOE, 2009] UNITED STATES DEPARTMENT OF ENERGY - DOE. **DOE hydrogen program, 2009 annual progress report.** Technical Report DOE/GO-102009-2950, DOE, Washington - DC, USA, 2009. [http://www.hydrogen.energy.gov/annual\\_progress09.html](http://www.hydrogen.energy.gov/annual_progress09.html).
- [Da Silveira, 2011] DA SILVEIRA, F. L.. **Máquinas térmicas de Otto e Diesel**, Junho 2011. <http://www.if.ufrgs.br/~lang>.
- [Dally *et al.*, 1998] DALLY, B.; MASRI, A.; BARLOW, R. ; FIECHTNER, G.. **Instantaneous and mean compositional structure of bluff-body stabilized nonpremixed flames.** Combustion and Flame, 114(1-2):119–148, 1998.
- [DiMare, 2004] DI MARE, F.; JONES, W. P. ; MENZIES, K. R.. **Large eddy simulation of a model gas turbine combustor.** Combustion and Flame, 137(3):278 – 294, 2004.

- [EGG, 2004] EG&G TECHNICAL SERVICES, INC.. **Fuel cell handbook**. Technical Report DE-AM26-99FT40575, United States Department of Energy - DOE, West Virginia, USA, 2004. <http://www.net1.doe.gov/technologies/coalpower/fuelcells/seca/pubs/FCHandbook7.pdf>.
- [Eckbreth, 1996] ECKBRETH, A. C.. **Laser diagnostics for combustion temperature and species**. Taylor & Francis, 2nd edition, 1996.
- [Egúsqüiza, 2012] EGÚSQÜIZA, J. C.. **Estudo experimental de chamas turbulentas não pré-misturadas de etanol e ar usando diagnóstico laser**. Dissertação de mestrado, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro - RJ, Brasil, 2012.
- [Eletrocell, 2011] ELETROCELL. **O que é a célula a combustível**, Janeiro 2011. <http://www.electrocell.com.br/>.
- [FAA, 2004] FEDERAL AVIATION ADMINISTRATION - FAA. **Airplane flying handbook**, chapter 14. U.S. Department of Transportation, 2004. [http://www.faa.gov/library/manuals/aircraft/airplane\\_handbook/media/faa-h-8083-3a-6of7.pdf](http://www.faa.gov/library/manuals/aircraft/airplane_handbook/media/faa-h-8083-3a-6of7.pdf).
- [Ferziger e Peric, 2002] FERZIGER, J.; PERIC, M.. **Computational methods for fluid dynamics**. Springer-Verlag, Berlin/New York, 3rd edition, 2002.
- [Fu *et al.*, 1987] FU, S.; LAUNDER, B. E. ; LESCHZINER, M. A.. **Modeling strongly swirling recirculating jet flow with reynolds-stress transport closures**. In: SIXTH SYMPOSIUM ON TURBULENT SHEAR FLOWS, Toulouse, France, 1987.
- [Gibson e Launder, 1978] GIBSON, M. M.; LAUNDER, B. E.. **Ground effects on pressure fluctuations in the atmospheric boundary layer**. Journal of Fluid Mechanics, 86:491–511, 1978.
- [Glassman, 1996] GLASSMAN, I.. **Combustion**. Academic Press, London, UK, 3rd edition, 1996.
- [Hinze, 1975] HINZE, J. O.. **Turbulence**. McGraw-Hill, New York, USA, 2nd edition, 1975.
- [Huang e Lin, 1994] HUANG, R. F.; LIN, C.. **Characteristic modes and thermal structure of nonpremixed circular-disc stabilized flames**. Combustion Science and Technology, 100:123–139, 1994.

- [Huang e Lin, 2000] HUANG, R. F.; LIN, C.. **Velocity fields of nonpremixed bluff-body stabilized flames**. *Journal of Energy Resources Technology*, 122:88–93, 2000.
- [Huapaya, 2008] HUAPAYA, L. E. A.. **Caracterização numérica e experimental de uma chama turbulenta não pré-misturada**. Dissertação de mestrado, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, 2008.
- [Huapaya *et al.*, 2008] HUAPAYA, L. E. A.; FIGUEIRA DA SILVA, L. F. ; AZEVEDO, L. F. A.. **Numerical and experimental characterization of a non-premixed turbulent flame**. In: 12<sup>th</sup> BRAZILIAN CONGRESS OF THERMAL ENGINEERING AND SCIENCES - ENCIT, Belo Horizonte, MG, Brazil, 2008. ABCM.
- [Huang e Yang, 2009] HUANG, Y.; YANG, V.. **Dynamics and stability of lean-premixed swirl-stabilized combustion**. *Progress in Energy and Combustion Science*, 35(4):293–364, 2009.
- [IPCC-WGII, 2007] PARRY, M.; CANZIANI, O.; PALUTIKOF, J.; VAN DER LINDEN, P. ; HANSON, C.. **Contribution of working group II to the fourth assessment report of the intergovernmental panel on climate change, 2007**. Cambridge University Press, Cambridge, UK, 2007. [http://www.ipcc.ch/publications\\_and\\_data/ar4/wg2/en/contents.html](http://www.ipcc.ch/publications_and_data/ar4/wg2/en/contents.html).
- [Jones e Launder, 1972] JONES, W. P.; LAUNDER, B. E.. **The prediction of laminarization with a two-equation model of turbulence**. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 15:301–314, 1972.
- [Jones e Whitelaw, 1982] JONES, W. P.; WHITELOW, J.. **Calculation methods for reacting turbulent flows: A review**. *Combustion and Flame*, 48:1–26, 1982.
- [Kaye *et al.*, 1995] KAYE, G.; LABY, T.; NOYES, J.; PHILLIPS, G.; JONES, O. ; ASHER, J.. **Table of physical and chemical constants (Kaye & Laby)**. Longman, 16<sup>th</sup> edition, 1995.
- [Kempf *et al.*, 2006] KEMPF, A.; LINDSTEDT, R. ; JANICKA, J.. **Large-eddy simulation of at bluff-body stabilized nonpremixed flame**. *Combustion and Flame*, 144(1-2):170 – 189, 2006.
- [Keum, 2009] KEUM, S.. **An improved representative ineractive flamelet model accounting for evaporation effect in reaction space**

- (**RIF-ER**). Tese de doutorado, University of Michigan, Michigan, USA, 2009.
- [Khajavi e Shariat, 2004] KHAJAVI, M.; SHARIAT, M.. **Failure of first stage gas turbine blades**. *Engineering Failure Analysis*, 11(4):589–597, 2004.
- [Kim e Williams, 1997] KIM, J. S.; WILLIAMS, F. A.. **Extinction of diffusion flames with non-unity Lewis number**. *Journal of Engineering Mathematics*, 31(2-3):101–118, 1997.
- [Kohse-Hoinghaus e Jeffries, 2002] KOHSE-HOINGHAUS, K.; JEFFRIES, J.. **Applied combustion diagnostics**. Taylor & Francis, 1st edition, 2002.
- [Kolmogorov, 1942] KOLMOGOROV, A. N.. **Equations of motion of an incompressible turbulent fluid**. *Izv Akad Nauk SSSR Ser Phys*, 1-2(VI):56, 1942.
- [LaVision, 2007a] LAVISION. **FlowMaster manual**. Göttingen, Germany, 2007.
- [LaVision, 2007b] LAVISION. **FlowMaster getting started**. Göttingen, Germany, 2007.
- [LaVision, 2008] LAVISION. **FlameMaster training**, 2008. Apresentação de treinamento ministradas na PUC-Rio por profissionais da La LaVision.
- [LaVision, 2009b] LAVISION. **LIF in Gaseous Fluids Manual**. Göttingen, Germany, 2009.
- [LaVision, 2009a] LAVISION. **Tunable LIF manual**. Göttingen, Germany, 2009.
- [Launder e Sharma, 1974] LAUNDER, B. E.; SHARMA, B. I.. **Application of the energy dissipation model of turbulence to the calculation of flow near a spinning disc**. *Letters in Heat and Mass Transfer*, 1(2):131–138, 1974.
- [Launder, 1989] LAUNDER, B. E.. **Secound-moment closure and its use in modeling turbulent industrial flows**. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 9:963–985, 1989.
- [Lemay, 2010] LEMAY, J.. **Étude numérique de conditions frontières en situation de combustion turbulente non prémélangé**. Master's thesis, Université du Québec, 2010.

- [Li *et al.*, 2004] LI, J.; ZHAO, Z.; KAZAKOV, A. ; DRYER, F.. **An updated comprehensive kinetic model of hydrogen combustion**. International Journal of Chemical Kinetics, 36:566–575, 2004.
- [Liu *et al.*, 2005] LIU, K.; POPE, S. B. ; CAUGHEY, D. A.. **Calculations of bluff-body stabilized flames using a joint probability density function model with detailed chemistry**. Combustion and Flame, 141(1-2):89–117, Apr. 2005.
- [Masri *et al.*, 1998] MASRI, A.; KELMAN, J. ; DALLY, B.. **The instantaneous spatial structure of the recirculation zone in bluff-body stabilized flames**. In: TWENTY-SEVENTH SYMPOSIUM (INTERNATIONAL) ON COMBUSTION, p. 1031–1038. The Combustion Institute, 1998.
- [Menter, 1994] MENTER, F. R.. **Two-equation eddy-viscosity turbulence models for engineering applications**. AiAA Journal, 32(8):1598–1605, Aug. 1994.
- [Mendoza Orbegoso e Figueira da Silva, 2009] MENDOZA ORBEGOSO, E. M.; FIGUEIRA DA SILVA, L. F.. **Estudo de modelos de cinética química para a descrição do processo de combustão**. Relatório final de projeto de P&D - Petrobras, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, RJ, Brazil, 2009.
- [Mendoza Orbegoso *et al.*, 2011] MENDOZA ORBEGOSO, E. M.; FIGUEIRA DA SILVA, L. F. ; NOVGORODCEV JR., A. R.. **On the predictability of chemical kinetics for the description of the combustion of simple fuels**. Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering, 33:492–505, 2011.
- [Merci *et al.*, 2006] MERCI, B.; ROEKAERTS, D.; NAUD, B. ; POPE, S.. **Comparative study of micromixing models in transported scalar PDF simulations of turbulent nonpremixed bluff body flames**. Combustion and Flame, 146(1-2):109–130, July 2006.
- [Moffat, 1982] MOFFAT, R. J.. **Contributions to the theory of single-sample uncertainty analysis**. Journal of Fluids Engineering, 104:250–258, 1982.
- [Muradoglu *et al.*, 2003] MURADOGLU, M.; LIU, K. ; POPE, S. B.. **PDF modeling of a bluff-body stabilized turbulent flame**. Combustion and Flame, 132(1-2):115–137, Jan. 2003.

- [NIST, 2011] NATIONAL INSTITUTE OF STANDARDS AND TECHNOLOGY - NIST. **Reference values of gas viscosity**, dezembro 2011. [http://www.nist.gov/pml/div685/grp02/gas\\_viscosity.cfm](http://www.nist.gov/pml/div685/grp02/gas_viscosity.cfm).
- [Namazian *et al.*, 1989] NAMAZIAN, M.; KELLY, J.; SCHEFER, R.; JOHNSTON, S. ; LONG, M.. **Nompremixed bluff-body burner flow and flame imaging study**. Experiments in fluids, 8:216–228, 1989.
- [Novgorodcev, 2003] NOVGORODCEV JR., A. R.. **simulação numérica de jato 3D - influência do swirl**. Projeto de graduação, Universidade de Brasília - UnB, Brasília, DF, Brazil, 2003.
- [Odedra e Malalasekera, 2007] ODEDRA, A.; MALALASEKERA, W.. **Eulerian particle flamelet modeling of a bluff-body  $CH_4/H_2$  flame**. Combustion and Flame, 151(3):512–531, nov 2007.
- [Perry e Green, 2008] PERRY, R. H.; GREEN, D. W.. **Perry's chemical engineers' handbook**. McGraw-Hill, 8th edition, 2008.
- [Peters, 1984] PETERS, N.. **Eulerian particle flamelet modeling of a bluff-body  $CH_4/H_2$  flame**. Progress in Energy and Combustion Science, 10:319–339, 1984.
- [Pope, 1985] POPE, S. B.. **PDF methods for turbulent reactive flows**. Progress in Energy and Combustion Science, 11(2):119 – 192, 1985.
- [Raffel *et al.*, 2007] RAFFEL, M.; WILLERT, C.; WERELEY, S. ; KOMPE-NHANS, J.. **Particle Image Velocimetry - A Prectical Guide**. Springer, Berlin, 2rd edition, 2007.
- [Raman e Pitsch, 2005] RAMAN, V.; PITSCHE, H.. **Large-eddy simulation of a bluff-body-stabilized non-premixed flame using a recursive filter-refinement procedure**. Combustion and Flame, 142(4):329 – 347, 2005.
- [Reynolds, 1895] REYNOLDS, O.. **On the dynamical theory of incompressible viscous fluids and the determination of the criterion**. A Philosophical Transactions of the Royal Society of London., 186:124 – 164, 1895.
- [Ryden e Lyngfelt, 2006] RYDEN, M.; LYNGFELT, A.. **Using steam reforming to produce hydrogen with carbon dioxide capture by chemical-looping combustion**. International Journal of Hydrogen Energy, 31:1271–1283, Aug. 2006.

- [Santoro, 2002] SANTORO, R.. **Dual fuel issues related to performance, emissions and combustion instability in gas turbine systems**. Final Report For Subcontract 99-01-SR078, The Pennsylvania State University, 2002.
- [Schefer *et al.*, 1987] SCHEFER, R. W.; NAMAZIAN, M. ; KELLY, J.. **Velocity measurements in a turbulent nonpremixed bluff-body stabilized flame**. Combustion Science and Technology, 56(4):101–138, 1987.
- [Shih *et al.*, 1995] SHIH, T. H.; LIOU, W. W.; SHABBIR, A.; YANG, Z. ; ZHU, J.. **A new  $k - \epsilon$  eddy-viscosity model for high Reynolds number turbulent flows - model development and validation**. Computers & Fluids, 24(3):227–238, 1995.
- [Silva Freire *et al.*, 2006] SILVA FREIRE, A. P.; ILHA, A. ; BREIDENTHAL, R.. **Cross-correlation digital particle image velocimetry: a review**. In: TURBULÊNCIA, VOLUME 5, TOMO 2, chapter 2, p. 115–204. ABCM, Rio de Janeiro, RJ, Brazil, 2006.
- [Speziale *et al.*, 1990] SPEZIALE, C. G.; ANDERSON, E. C. ; ABID, R.. **A critical evaluation of two-equation turbulence models for near-wall turbulence**. AIAA Journal, 90:1481, 1990.
- [Sutherland, 1893] SUTHERLAND, W.. **The viscosity of gases and molecular force**. Philosophical Magazine - Series 5, 36:507–531, 1893.
- [Sydney, 2011] THE UNIVERSITY OF SYDNEY - AMME - THERMOFLUIDS RESEARCH GROUP. **Bluff-body flows and flames**, Janeiro 2011. <http://sydney.edu.au/engineering/aeromech/thermofluids/bluff.htm>.
- [Tamura *et al.*, 1998] TAMURA, M.; BERG, P. A.; HARRINGTON, J. E.; LUQUE, J.; JEFFRIES, J. B. ; SMITH, G. P. AND CROSLEY, D. R.. **Collisional quenching of CH, OH, and NO in low pressure hydrocarbon flames**. Combustion and Flame, 114:502–514, 1998.
- [Toledo *et al.*, 2009] TOLEDO, M.; BUBNOVICH, V.; SAVELIEV, A. ; KENNEDY, L.. **Hydrogen production in ultrarich combustion of hydrocarbon fuels in porous media**. International Journal of Hydrogen Energy, 34:1818–1827, Feb. 2009.
- [Verhelst *et al.*, 2009] VERHELST, S.; WALLNER, T.. **Hydrogen-fueled internal combustion engines**. Progress in Energy and Combustion Science, 35:490–527, 2009.

- [Westerweel, 1997] WESTERWEEL, J.. **Fundamentals of digital particle image velocimetry**. Measurement Science and Technology, 8:1379–1392, 1997.
- [Wilcox,1988] WILCOX, D. C.. **Re-assessment of the scale-determining equation for advanced turbulence models**. AIAA Journal, 26(11):1299–1310, 1988.
- [Wilcox, 1997] WILCOX, D. C.. **Turbulence modeling for CFD**. Anaheim: DCW Industries, 2<sup>nd</sup> edition, 1998.
- [Williams, 2011] WILLIAMS, J. L.. **Oil price history and analysis**, Maio 2012. <http://www.wtrg.com/prices.htm>.
- [Wolfrum, 1998] WOLFRUM, J.. **Lasers in combustion: From basic theory to practical devices**. Symposium (International) on Combustion, 27(1):1–41, 1998.
- [Yang, 1973] YANG, W.-C.. **Estimating the solid particle velocity in vertical pneumatic conveying lines**. Ind. Eng. Chem. Fundam., 12(3):349–352, 1973.
- [Yaws, 2010] YAWS, C. L.. **Yaws' thermophysical properties of Cemicals and hydrocarbons (Electronic Edition)**. Knovel, 2010. [http://www.knovel.com/web/portal/browse/display?\\_EXT\\_KNOVEL\\_DISPLAY\\_bookid=2906&VerticalID=0](http://www.knovel.com/web/portal/browse/display?_EXT_KNOVEL_DISPLAY_bookid=2906&VerticalID=0).

## A Mecanismo de Reação do Hidrogênio

No presente trabalho foi adotado o modelo de cinética química desenvolvido por Burke *et al.* (2012) que é uma evolução do mecanismo proposto por Li *et al.* (2004), visando incorporar novos avanços na determinação de constantes e melhorar a performance em chamas diluídas a alta pressão. Este mecanismo é composto por 11 espécies, cujas propriedades encontram-se na tabela abaixo. As unidades adotadas nesta tabela são cal/mol/K para  $S$  e  $C_p$  e kcal/mol para  $\Delta H_f$ .

Especies	$\Delta H_f$ (298.15)	$S$ (298.15)	$C_p$ (300)	$C_p$ (500)	$C_p$ (800)	$C_p$ (1000)	$C_p$ (1500)	$C_p$ (2000)
H	52.10	27.39	4.97	4.97	4.97	4.97	4.97	4.97
O	59.56	38.47	5.23	5.08	5.02	5.00	4.98	4.98
OH	8.91	43.91	7.16	7.05	7.15	7.34	7.87	8.28
H <sub>2</sub>	0.00	31.21	6.90	7.00	7.07	7.21	7.73	8.18
O <sub>2</sub>	0.00	49.01	7.01	7.44	8.07	8.35	8.72	9.03
H <sub>2</sub> O	-57.80	45.10	8.00	8.45	9.22	9.87	11.26	12.22
HO <sub>2</sub>	3.00	54.76	8.35	9.47	10.77	11.38	12.48	13.32
H <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	-32.53	55.66	10.42	12.35	14.29	15.21	16.85	17.88
N <sub>2</sub>	0.00	45.77	6.95	7.08	7.50	7.83	8.32	8.60
Ar	0.00	36.98	4.97	4.97	4.97	4.97	4.97	4.97
He	0.00	30.12	4.97	4.97	4.97	4.97	4.97	4.97

Figura A.1: Espécies químicas do modelo Burke *et al.* (2012) para reações  $H_2/O_2$  e suas principais propriedades.

Estas 11 espécies são regidas pelas 19 reações listadas na figura A.2.

As reações marcadas com “\*” são revisões das propostas por Li *et al.* (2004). Nas reações duplicadas, deve-se optar por utilizar a primeira quando o principal gás inerte for  $N_2$  e a segunda para os gases Helio ou Argônio. As referências bibliográficas indicadas são as do artigo original.

Reações	$A$	$n$	$E_a$	Referências	
1 $H+O_2 = O+OH$	1.04E+14	0.00	1.531E+04	* [40]	
2 $O+H_2 = H+OH$	Duplicada Duplicada	3.82E+12 8.79E+14	0.00 0.00	7.948E+03 1.917E+04	* [20]
3 $H_2+OH = H_2O+H$	2.16E+08	1.51	3.430E+03	[139]	
4 $OH+OH = O+H_2O$	3.34E+04	2.42	-1.930E+03	* [20]	
5 $H_2+M = H+H+M$	4.58E+19	-1.40	1.040E+05	[73]	
$\epsilon_{H_2} = 2.5, \epsilon_{H_2O} = 12.0, \epsilon_{CO} = 1.9, \epsilon_{CO_2} = 3.8, \epsilon_{Ar} = 0.0, \epsilon_{He} = 0.0$				[12]	
$H_2+Ar = H+H+Ar$	5.84E+18	-1.10	1.040E+05	[73]	
$H_2+He = H+H+He$	5.84E+18	-1.10	1.040E+05	[12]	
6 $O+O+M = O_2+M$	6.16E+15	-0.50	0.000E+00	[73]	
$\epsilon_{H_2} = 2.5, \epsilon_{H_2O} = 12.0, \epsilon_{CO} = 1.9, \epsilon_{CO_2} = 3.8, \epsilon_{Ar} = 0.0, \epsilon_{He} = 0.0$				[12]	
$O+O+Ar = O_2+Ar$	1.89E+13	0.00	-1.790E+03	[73]	
$O+O+He = O_2+He$	1.89E+13	0.00	-1.790E+03	[12]	
7 $O+H+M = OH+M$	4.71E+18	-1.00	0.000E+00	[73]	
$\epsilon_{H_2} = 2.5, \epsilon_{H_2O} = 12.0, \epsilon_{CO} = 1.9, \epsilon_{CO_2} = 3.8, \epsilon_{Ar} = 0.75, \epsilon_{He} = 0.75$				[12]	
8 $H_2O+M = H+OH+M$	6.06E+27	-3.32	1.208E+05	* [74]	
$\epsilon_{H_2} = 3.0, \epsilon_{H_2O} = 0.0, \epsilon_{CO} = 1.9, \epsilon_{CO_2} = 3.8, \epsilon_{O_2} = 1.5, \epsilon_{N_2} = 2.0, \epsilon_{He} = 1.1$				See text	
$H_2O+H_2O = H+OH+H_2O$	1.01E+26	-2.44	1.202E+05	[74]	
9 $H+O_2 (+M) = HO_2 (+M)^a$	$k_\infty$ $k_0$	4.65E+12 6.37E+20	0.44 -1.72	0.000E+00 5.250E+02	* [25] [24], M = N <sub>2</sub>
$F_c = 0.5, T^{***} = 1.0E-30, T^* = 1.0E+30$				* [30]	
$\epsilon_{H_2} = 2.0, \epsilon_{H_2O} = 14.0, \epsilon_{CO} = 1.9, \epsilon_{CO_2} = 3.8, \epsilon_{O_2} = 0.78, \epsilon_{Ar} = 0.67, \epsilon_{He} = 0.8$				* See text	
$H+O_2 (+M) = HO_2 (+M)^b$	$k_\infty$ $k_0$	4.65E+12 9.04E+19	0.44 -1.50	0.000E+00 4.920E+02	* [25] [24], M = Ar or He
$F_c = 0.5, T^{***} = 1.0E-30, T^* = 1.0E+30$				[30]	
$\epsilon_{H_2} = 3.0, \epsilon_{H_2O} = 21.0, \epsilon_{CO} = 2.7, \epsilon_{CO_2} = 5.4, \epsilon_{O_2} = 1.1, \epsilon_{He} = 1.2, \epsilon_{N_2} = 1.5$				* See text	
10 $HO_2+H = H_2+O_2$	2.75E+06	2.09	-1.451E+03	* [51] x 0.75	
11 $HO_2+H = OH+OH$	7.08E+13	0.00	2.950E+02	[12]	
12 $HO_2+O = O_2+OH$	2.85E+10	1.00	-7.239E+02	* [82] x 0.6	
13 $HO_2+OH = H_2O+O_2$	2.89E+13	0.00	-4.970E+02	[50]	
14 $HO_2+HO_2 = H_2O_2+O_2$	Duplicada	4.20E+14	0.00	1.200E+04	[21]
$HO_2+HO_2 = H_2O_2+O_2$	Duplicada	1.30E+11	0.00	-1.630E+03	
15 $H_2O_2(+M) = OH+OH(+M)$	$k_\infty$ $k_0$	2.00E+12 2.49E+24	0.90 -2.30	4.875E+04 4.875E+04	* [86] * [86]
$F_c = 0.42, T^{***} = 1.0E-30, T^* = 1.0E+30$				* [86]	
$\epsilon_{H_2O} = 7.5, \epsilon_{H_2O_2} = 7.7, \epsilon_{CO_2} = 1.6, \epsilon_{O_2} = 1.2, \epsilon_{N_2} = 1.5, \epsilon_{He} = 0.65$				* [86]	
$\epsilon_{H_2} = 3.7, \epsilon_{CO} = 2.8$				See text	
16 $H_2O_2+H = H_2O+OH$	2.41E+13	0.00	3.970E+03	[73]	
17 $H_2O_2+H = HO_2+H_2$	4.82E+13	0.00	7.950E+03	[73]	
18 $H_2O_2+O = OH+HO_2$	9.55E+06	2.00	3.970E+03	[73]	
19 $H_2O_2+OH = HO_2+H_2O$	Duplicada Duplicada	1.74E+12 7.59E+13	0.00 0.00	3.180E+02 7.270E+03	* [79]

Figura A.2: Reações do modelo Burke *et al.* (2012) para reações  $H_2/O_2$ .