# Chamas turbulentas pré-misturadas





## PME 5411 – Fundamentos de Escoamentos Turbulentos Reativos

#### Prof. Dr.-Ing. Fernando Luiz Sacomano Filho

2020 | Fernando Luiz Sacomano Filho | 1

### Preâmbulo Combustão turbulenta



- Há poucas aplicações que podem ser bem caracterizadas com procedimentos analíticos.
- A aplicação de métodos numéricos para a solução de processos de combustão é uma área em rápido crescimento.
- Entretanto, a simulação da combustão turbulenta ainda permanece complexa.
- <u>Combustão ainda que sem turbulência é um fenômeno intrinsecamente complexo:</u>
  - 1. Faixa extensa de escalas de comprimento e de tempo.
  - Reações químicas ocorrem numa camada estreita → o que está relacionado à gradientes elevados de temperatura, fração mássica e densidade. Tipicamente, chamas de hidrocarbonetos em ar atmosférico apresentam uma velocidade de propagação da ordem de [20,100] m/s e uma espessura da ordem de 0.1 mm.
  - 3. A descrição completa de mecanismos de reação podem demandar o transporte de centenas de componentes a solução de milhares de reações químicas.
- Esses aspectos impõem diversas dificuldades para um solver numérico.



### Preâmbulo Combustão turbulenta



- A <u>turbulência</u> em si é provavelmente o fenômeno mais complexo na área de mecânica dos fluidos não reativa.
- Várias escalas de comprimento e tempo estão envolvidas e a estrutura e descrição da turbulência permanece uma questão em aberto.
- A combustão turbulenta resulta da <u>interação em duas vias</u> entre reações químicas e turbulência.
- Uma característica importante é como a energia turbulenta está distribuída sobre as diferentes escalas de comprimento presentes no campo de escoamento e quais escalas de comprimento carregam energia suficiente para interagir com a chama.
- Advertência importante, muitas das nossas descrições e modelagens são baseadas na hipótese de turbulência isotrópica e homogênea. Essa hipótese não é válida na maioria das aplicações reais, porém corresponde a melhor descrição universal disponível.



## Motivação



- Das aulas anteriores pôde-se observar que um dos maiores desafios na modelagem da combustão turbulenta é o cálculo das taxas médias (ou filtradas) de reação.
- É possível de se demonstrar que expansões matemáticas baseadas em valores médios não permitem a derivação de modelos apropriados para a caracterização da combustão turbulenta.
- Diante disso, modelos para taxas de reação são baseados em análises físicas que incluem a comparação de escalas químicas e turbulentas.
- Específico a combustão de chamas pré-misturadas → a turbulência aumenta a taxa de consumo de combustível
- Uma breve revisão de literatura, ou mesmo uma consulta a manuais de softwares de CFD, indica a existência de diversos modelos. Nesta e na próxima aula nos concentraremos nos fundamentos teóricos para sua compreensão.



### Plano de aula



- Fundamentação teórica:
  - Efeitos da turbulência sobre a chama
  - Efeitos da chama sobre a turbulência
- Interpretação teórica:
  - Aplicação da hipótese da chama infinitamente fina.
- Classificação de regimes:
  - Análise de regimes de combustão turbulenta pré-misturada.



## Modos de chama



- Tendo em vista que modelos para taxas de reação são baseados em análises físicas que incluem a comparação de escalas químicas e turbulentas.
- Nesse sentido, a definição do modo de chama é de fundamental importância.





## Modos de chama



- Tendo em vista que modelos para taxas de reação são baseados em análises físicas que incluem a comparação de escalas químicas e turbulentas.
- Nesse sentido, a definição do modo de chama é de fundamental importância.







Considere o volume de controle:



- A velocidade s<sub>⊤</sub> é imposta no *inlet* → mantém a chama estatisticamente estacionária no V.C.
- Vamos admitir que a mistura é pobre (φ<1) → combustível é totalmente consumido</li>





A equação média da fração mássica de combustível é dada por:

$$\overline{\rho}\widetilde{u}_{i}\frac{\partial\widetilde{Y}_{F}}{\partial x_{i}} = -\frac{\partial}{\partial x_{i}}\left(\overline{V_{F,i}Y_{F}} + \overline{\rho}\overline{\overline{u_{i}''Y_{F}''}}\right) + \overline{\dot{\omega}_{F}}$$

• No caso de uma propagação unidimensional:

$$\overline{\rho}\widetilde{u}_1 = \rho_1 s_T$$

• Ao integrarmos de  $x_1 = -\infty$  até  $x_1 = +\infty$ :

$$A\rho_1 Y_{F,1} s_T = -\int_V \overline{\dot{\omega}_F} dV$$

\* : Essa igualdade somente é válida se não houver variação ou flutuação do fluxo mássico de combustível que atravessa o V.C.





 Há diversos estudos que buscaram correlações entre u' da corrente de mistura fresca (reagentes) e s<sub>T</sub>. Estas foram determinadas para diversas configurações e apresentam comportamento semelhante.



- Damköhler apresentou uma explicação para o comportamento observado na porção inicial deste gráfico através de um modelo fenomenológico.
  - Cada ponto da superfície de chama se move localmente com sl<sup>0</sup>
  - Taxa de queima local é dada por:  $\rho_1 Y_{F,1} s_l^0$





 Diante desse modelo, a integral da taxa de reação de combustível no volume de controle pode ser descrita por:

$$A\rho_1 Y_{F,1} s_T \frac{\partial \widetilde{Y}_F}{\partial x_i} = -\int_V \dot{\omega}_F dV = A_T \rho_1 Y_{F,1} s_l^0$$

• Ao se rearranjar a equação anterior:

$$As_T = A_T s_l^0$$

- Onde E corresponde ao fator de amarrotamento da chama (*wrinkling factor*).
  Área total da chama dividida pela área de sua projeção na direção de propagação.
- Segundo Poinsot e Veynante (2012), a predição da zone de inflexão é algo difícil enquanto que a predição do limite de extinção é algo impossível.





- Há um desvio apreciável de modelos e medições experimentais.
- Isso muitas vezes é justificado por erros experimentais e modelagem insuficiente. Porém, Poinsot e Veynante (2012) chamam a atenção para a dependência da velocidade de chama turbulenta das condições de contorno, espectro da turbulência ou condições iniciais.
- De acordo com isso, a busca por uma relação universal entre s<sub>T</sub> e u' não seja de interesse prático e a proximidade de modelos com correlações entre s<sub>T</sub> e u' não seja uma prova de qualidade de modelos.





- A maioria dos estudos se concentra nos efeitos da turbulência sobre a chama, uma vez que há muito interesse em se estudar a estrutura da chama. Porém, a chama também modifica a turbulência.
- Os efeitos da chama sobre a turbulência serão apresentados em 4 aspectos principais.
  - 1. Relaminarização do escoamento;
  - 2. Aceleração do escoamento;
  - 3. Intermitência;
  - 4. Efeitos de empuxo.





#### Relaminarização do escoamento

 Quando a temperatura muda de um lado para o outro da chama, a viscosidade cinemática muda e portanto o número de Reynolds também se altera de acordo. A viscosidade cinemática muda em função de T<sup>1.7</sup> para o ar. Para uma razão de temperaturas de T<sub>2</sub>/T<sub>1</sub> = 8, Re é aproximadamente 40 vezes menor na mistura queimada em comparação com a mistura fresca. Esse efeito deve levar a relaminarização do escoamento.

#### Aceleração do escoamento

Para a combustao sub-sônica, o escoamento acelera através da frente de chama de u<sub>1</sub> para

$$u_1 + s_l^0 \left(\frac{\rho_1}{\rho_2} - 1\right) = u_1 + s_l^0 \left(\frac{T_2}{T_1} - 1\right)$$

- Para hidrocarbonetos típicos, o aumento pode chegar a 4 m/s ( $T_2/T_1 = 8 e s_1^0 = 0.5 m/s$ ).
- Note que isso ocorre em regiões muito estreitas (espessura de chama é de ~0.1 mm).
- O campo de vorticidade também é afetado com o aumento de velocidade e alteração da densidade resultando na chamada "turbulência gerada por chama".
- Note que o efeito da chama na turbulência não é único. Em algumas situações ocorre relaminarização, em outros casos, a turbulência pode ser intensificada.





#### Intermitência

- A definição de turbulência em chamas pré-misturadas é questionável, ao se avaliar seu significado físico.
- Chamas pré-misturadas podem ser vistas como um escoamento bifásico: uma fase de reagentes frescos e pesados e uma fase de produtos queimados e leves.
- A expansão térmica causa diferentes velocidades médias







- A interpretação dos valores de u' obtidos em simulações do tipo RANS permanecem uma questão em aberto.
- Comportamentos não físicos são encontrados com frequência em códigos do tipo RANS, uma vez que a turbulência do "flame brush" calculada com modelos clássicos não tem correspondência física.







#### Efeitos de empuxo

- Gases frescos são frios e pesados, enquanto que produtos são quentes e leves. Nesse sentido, forças externas (gravidade) e gradientes de pressão agem de formas distintas em gases frescos e queimados.
- A gravidade normalmente é negligenciável em muitas aplicações práticas → deve predominar em incêndios que são controlados principalmente por convecção natural.
- A maioria das aplicações práticas são de escoamento forçado → estão submetidas a gradientes de pressão elevados.







 Os efeitos de empuxo podem originar efeitos inesperados como transporte turbulento contra-gradiente, onde os fluxos turbulentos de escalares tem direção oposta ao previsto pela equação abaixo. No final da aula iremos detalhar este aspecto.

$$\overline{\rho} \, \overline{\overline{u_i'' Y_k''}} = -\frac{\mu_t}{Sc_{t,k}} \frac{\partial \widetilde{Y}_k}{\partial x_i}$$



## Interpretação teórica



 A percepção de que a zona de reação de uma chama pré-misturada é muito fina e na maioria dos casos a turbulência não permeia esta zona, nos leva a considerar o modelo de chama infinitamente fina.



 Daremos continuidade ao tema com a derivação de formulações importantes para a compreensão da combustão turbulenta pré-misturada.



## Interpretação teórica



 Medições de função de densidade de probabilidade (PDF) em regiões distintas de uma chama turbulenta pré-misturada.





## Classificação de regimes



- Como destacado na motivação desta aula, das aulas anteriores pôde-se observar que um dos maiores desafios na modelagem da combustão turbulenta é o cálculo das taxas médias (ou filtradas) de reação.
- Também foi discutido que a derivação de modelos é baseada em análises físicas e considera a comparação de escalas entre fenômenos (combustão e turbulência).
- Destas análises originam-se os diagramas de combustão turbulenta → identificar regimes através de quantidades características adimensionais.
- Diagramas indicam se o escoamento contém zonas de reação finas (flamelets), pockets, ou zonas de reação distribuídas → essa informação é essencial para a construção de modelos de combustão.
- Note que, uma frente de chama contínua e sem furos não pode ser modelada da mesma forma que uma chama que é quebrada em vários e pequenas vesículas (*pockets*) ou quando a combustão não ocorre ao longo de uma folha, mas de uma forma mais distribuída.
- Advertência: Diagramas são baseados em argumentos intuitivos. Portanto, eles não devem ser vistos como demonstrações precisas. Por exemplo: modelo teórico vs. modelo analítico.



### Classificação de regimes Definição de u'



- Uma dificuldade encontrada na construção de regimes e sua utilização em cálculos de combustão turbulenta está associada a definição de u'.
- Modelos de combustão turbulenta usam várias aproximações e simplificações; tipicamente, duas são encontradas com frequência.
  - 1. Turbulência é isotrópica e homogênea em todo o escoamento
  - 2. Turbulência é caracterizada por sua RMS u' e sua escala de comprimento integral  $I_T$ .
- A primeira hipótese é bastante comum, enquanto a segunda é mais perigosa
  → Observe que em experimentos k é uma quantidade definida a montante da chama, porém em códigos multi-dimensionais, k é uma quantidade local.
- Lembre-se que o valor de k na frente de chama é distorcido devido à intermitência.
- Além disso, muitos modelos de turbulência não consideram os efeitos de variação de massa específica induzido pela frente de chama, o que prejudica a estimativa do valor da intensidade de turbulência.



#### Classificação de regimes Diagramas clássicos



- Como uma primeira aproximação, a combustão turbulenta pode ser descrita como a interação de uma frente de chama (δ e s<sub>l</sub><sup>0</sup>) e um conjunto de "eddies" com escalas de comprimento (η<sub>K</sub> a l<sub>T</sub>) e velocidades variando das escalas de Kolmogorov (u'<sub>K</sub>) até as escalas integrais u'.
- A espessura de chama laminar é estimada usualmente como:

$$\delta = \frac{v}{s_l^0} \Longrightarrow s_l^0 \delta = v$$

 Essa definição tem como objetivo simplificar a análise. Observe que o Re da chama é unitário.

$$\operatorname{Re} = \frac{s_l^0 \delta}{v} = 1$$



### Classificação de regimes Diagramas clássicos



 Ao admitir turbulência homogênea e isotrópica, u'(r) e r de qualquer eddy na cascata são relacionados por:

$$\frac{u'(r)}{r} = \varepsilon$$

• A escala de tempo para este *eddy* é então dada por:

$$\tau_m(r) = \frac{r}{u'(r)} = \left(\frac{r^2}{\varepsilon}\right)^{\frac{1}{3}}$$

 Note que a partir dessas equações temos escalas características de velocidade e de tempo de acordo com o tamanho do eddy → podemos imaginar como um escoamento turbulento deve interagir com uma frente de chama pré-misturada.



### Classificação de regimes Diagramas clássicos



 Tendo em vista a chama pré-misturada, iremos definir a escala de tempo de chama como:

que pode ser interpretado como o tempo necessário para a chama se deslocar por uma distância equivalente a sua própria espessura δ.

 $\tau_c = \frac{\delta}{s_i^0}$ 

Também é definido como tempo característico de difusão:

$$\tau_c = \frac{\delta}{s_l^0} = \frac{\delta^2}{\nu}$$

 Ao comparar esta escala de tempo com a do escoamento turbulento, obtemos que:

$$Da(r) = \frac{\tau_m(r)}{\tau_c}$$

 A expressão resultante sugere diferentes cenários para a interação chama turbulência.



#### **Classificação de regimes** Diagramas clássicos - adimensionais



 $Da(r) = \frac{\tau_m(r)}{\tau_c}$ 

- Porém uma pergunta persiste: Quais valores de r são os mais importantes para controlar a estrutura de uma chama?
- Note que todas as análises que conduziremos neste tópico se baseiam em reações single-step irreversíveis. Ao se considerar casos reais, onde diversas espécies químicas participam, diversas escalas de tempo devem existir. Por exemplo: formação de CO2 de CO e OH, como também a formação de óxidos de nitrogênio, também é bastante lenta e comparável com as escalas de tempo da turbulência.
- A comparação de escalas de tempo apresentada anteriormente nos aponta para a definição do número de Damköhler (baseado nos maiores eddies), o qual é definido como a razão entre a escala de tempo integral e a escala de tempo química

$$Da = \frac{\tau_m(l_T)}{\tau_c} = \frac{\tau_t}{\tau_c} = \frac{l_T/u'(l_T)}{\delta/s_l^0}$$



#### **Classificação de regimes** Diagramas clássicos - adimensionais



 Para a interação das menores escalas do escoamento turbulento, utiliza-se o número de Karlovitz:

$$Ka = \frac{\tau_c}{\tau_m(\eta_K)} = \frac{1}{Da(\eta_K)} = \frac{u'(\eta_K)/\eta_K}{s_l^0/\delta}$$

 Convenientemente, este adimensional pode ser representado por meio de diversas equações:

$$Ka = \left(\frac{l_T}{\delta}\right)^{\frac{-1}{2}} \left(\frac{u'}{s_l^0}\right)^{\frac{3}{2}} = \left(\frac{\delta}{\eta_K}\right)^2 = \frac{\sqrt{\varepsilon/\nu}}{s_l^0/\delta}$$

 O número de Reynolds pode ser representado em termos das escalas características:

$$\operatorname{Re}_{T} = \frac{u'l_{T}}{v} = \left(\frac{u'}{s_{l}^{0}}\right)\left(\frac{l_{T}}{\delta}\right)$$





- Para Da >> 1: escalas de tempo química são menores que as integrais da turbulência
  → turbulência não afeta a estrutura interna da chama.
  - A estrutura interna da chama permanece muito próxima à estrutura laminar.
  - Taxa de reação média dada por:

$$\overline{\dot{\omega}_k} = \Xi \dot{\omega}_k$$

Para Da << 1:  $\tau_c > \tau_m$ . Taxa de reação é controlada pelas reações químicas enquanto que reagentes e produtos são misturados pela turbulência  $\rightarrow$  perfectly stirred reactor.

$$\overline{\overline{\dot{\omega}_k}} = \dot{\omega}_k \left( \widetilde{Y}_{\alpha}, \widetilde{T} \right)$$

Ao combinar Ka em nossas análises:

Ka < 1 (Da > 1)	Ka > 1 (Da > 1)	Da << 1
Flamelets	Thickened flames	PSR
Chama é mais fina que todas as escalas do escoamento turbulento	Pequenas estruturas turbulentas podem entrar na estrutura da chama	Todas as escalas de tempo turbulentas sao menores que as escalas de tempo químicas



- Ao se considerar uma escala bilogarítmica, podemos curvas associadas as condições limitantes obtidas com as comparações de escalas.
- Como referência, vamos traçar as curvas onde:

$$\operatorname{Re}_{T} = \left(\frac{u'}{s_{l}^{0}}\right) \left(\frac{l_{T}}{\delta}\right) = 1$$

$$Da = \frac{l_T/u'(l_T)}{\delta/s_l^0} = 1$$

$$Ka = \left(\frac{l_T}{\delta}\right)^{\frac{-1}{2}} \left(\frac{u'}{s_l^0}\right)^{\frac{3}{2}} = 1$$





2020 | Fernando Luiz Sacomano Filho | 29



- Quando Ka < 1 (Ka menor que o limite de Klimov Williams, i.e. Ka = 1), τ<sub>c</sub> é menor que todas as escalas de tempo da turbulência.
- Neste caso podemos considerar duas situações distintas de acordo com a razão u'/sl<sup>0</sup>:
  - Quando u<sup>'</sup> < s<sup>0</sup><sub>l</sub>, apenas o amarrotamento da chama ocorre → wrinkled flamelet regime.
  - Quando u' > s<sub>l</sub><sup>0</sup>, interação chama-chama, o que origina a formação de pockets → corrugated flamelet regime.







- Quando  $\tau_{\rm K} < \tau_{\rm c} < \tau_{\rm T}$  (Ka > 1 e Da > 1) pequenas estruturas do movimento turbulento penetram na chama, enquanto que escalas maiores promovem o amarrotamento  $\rightarrow$  thickened flame regime.
- Quando Da < 1, todas as escalas do movimento turbulento podem penetrar na regiao de chama e a taxa de reacao é limitada predominantemente pela química → well stirred reactor.



 $I_T/\delta$  (Escala de comprimento integral / espessura de chama)









 $I_T/\delta$  (Escala de comprimento integral / espessura de chama)





- Norbert Peters propôs a análise das espessuras das zonas de préaquecimento e de reação.
- Para isso devemos definir o número de Karlovitz de transição, i.e., quando a escala de comprimento de Kolmogorov se iguala a espessura da zona de reação:

$$Ka_r = \left(\frac{\delta}{\eta_K}\right)^2 = \left(\frac{\delta}{\delta_r}\right)^2 \left(\frac{\delta_r}{\eta_K}\right)^2 = \left(\frac{\delta}{\delta_r}\right)^2 \approx 100$$

- Note que: δ<sub>r</sub>/ δ ~ 10
- Dois cenários podem ser definidos considerando-se a interação com a estrutura da chama.
- Se 1<Ka<Ka<sub>r</sub> (i.e. δ<sub>r</sub><η<sub>K</sub><δ), a turbulência altera apenas a zona de pré-aquecimento → thickened-wrinkled flame.
- Ka > Ka<sub>r</sub> (i.e.  $\eta_K < \delta_r < \delta$ )  $\rightarrow$  thickened flame.





# Referências



- T. Poinsot and D. Veynante. Theoretical and Numerical Combustion. 2005.
- N. Peters. Turbulent Combustion. Cambridge University Press, 2000.
- F. L. Sacomano Filho, Novel Approach Toward the Consistent Simulation of Turbulent Spray Flames Using Tabulated Chemistry Phd thesis, Technische Universitaet Darmstadt, Darmstadt, Germany, 2017.
- F.L. Sacomano Filho, N. Speelman, J.A. van Oijen, L.P.H. de Goey, A. Sadiki, J. Janicka, Numerical analyses of laminar flames propagating in droplet mists using detailed and tabulated chemistry, Combust. Theory Model. 22 (2018) 998–1032.
- Z.S. Li, B. Li, Z.W. Sun, X.S. Bai, M. Aldén, Turbulence and combustion interaction: High resolution local flame front structure visualization using simultaneous single-shot PLIF imaging of CH, OH, and CH2O in a piloted premixed jet flame, Combust. Flame 157 (2010) 1087–1096.
- F. L. Sacomano Filho, G. C. Krieger Filho, J. A. van Oijen, A. Sadiki, J. Janicka, A novel strategy to accurately represent the carrier gas properties of droplets evaporating in a combustion environment, Int. J. Heat and Mass Transf. 137 (2019) 1141–1153.
- D. Veynante, L. Vervisch, Turbulent Combustion Modeling, Progress in Energy and Combustion Science 28 (2002) 193-266.

