

Resumo: *Produzir e usar a energia de forma eficiente e ambientalmente sustentável é um dos grandes desafios do nosso tempo. Nesse contexto, o entendimento detalhado dos processos de combustão é fundamental para minimizar o seu impacto sobre o meio ambiente. Este livro visa contribuir para o estudo dos processos de combustão de dois pontos de vista diferentes e complementares: modelos computacionais usados na simulação desses processos e técnicas avançadas de diagnóstico de combustão. O texto apresenta tanto os conceitos básicos dos fenômenos físicos de interesse, quanto os modelos computacionais e técnicas ópticas mais avançados para o estudo de combustão turbulenta. São apresentados exemplos de aplicação dos modelos computacionais e das técnicas ópticas de diagnóstico para chamas turbulentas de metano e etanol. Pesquisadores e alunos de Pós-Graduação encontrarão neste texto um guia para suas atividades de pesquisa em combustão*

Sumário

Lista de Figuras	7
Lista de Tabelas	14
1 Introdução	22
2 Termodinâmica dos Processos de Combustão e Equações de Transporte para Escoamentos Reativos	24
2.1 Termodinâmica dos processos de combustão	25
2.2 Equilíbrio Termodinâmico em Sistemas Multicomponentes	29
2.2.1 Relação entre propriedades Extensivas versus Intensivas	34
2.2.2 Equação de Euler	35
2.3 Processos Irreversíveis	36
2.3.1 Relações Linearizadas	40
2.3.2 Fluxo de energia e Lei de Fourier	42
2.3.3 Difusão de Massa	43
2.3.4 Relações de Onsager	49
2.3.5 Difusão de Massa - Cálculo dos Coeficientes de Difusão	50
2.4 Velocidade das espécies e velocidade da mistura	50
2.5 – Equação de conservação de um parâmetro físico extensivo genérico	53

2.5.1	– Velocidade baricêntrica da mistura e velocidade de difusão das espécies	55
2.6	– Equação da continuidade ou balanço de massa	57
2.6.1	– Relação entre derivada total $\frac{D}{Dt}$ e derivada local $\frac{\partial}{\partial t}$	58
2.6.2	Equação da continuidade na forma de volume específico	59
2.6.3	Hipótese dos Contínua Coexistentes Independentes	60
2.6.4	Equação de balanço de uma espécie química	61
2.7	Conservação da Quantidade de Movimento Linear	65
2.7.1	Equação da energia cinética específica	70
2.7.2	Equação da energia potencial específica da mistura	73
2.8	Conservação da Energia	77
2.9	Equações Fenomológicas	84
2.9.1	Aplicação das Equações Fenomológicas à Equação da Energia	88
2.9.2	Aproximação das equações para escoamentos de baixo MACH	93
2.10	Formalismo de Shvab-Zel'dovich para Processos de Combustão	99
3	Modelos de Combustão Laminar	107
3.1	Modelo de Folha de Chama (<i>Flame sheet</i>)	109
3.2	Modelo de Equilíbrio Químico	115
3.3	Modelo de Elemento de Chama (<i>Flamelet</i>)	120
4	Modelos para escoamentos turbulentos	124
4.1	Uma breve abordagem sobre turbulência	125
4.2	Modelos de turbulência - LES	127
4.2.1	Equacionamento	128
4.2.1.1	Filtragem	130
4.2.1.2	Filtragem aplicada às equações de Navier - Stokes	132

4.2.2	Modelos de sub-malha	133
4.2.3	Condições de contorno	135
4.2.4	Aspectos numéricos	136
4.3	Modelos de turbulência RANS	136
4.3.1	Modelo de turbulência - $k - \varepsilon$	138
4.3.2	Modelo das Tensões de Reynolds - RSM	140
4.4	Aplicações	141
4.5	Comentários Finais	147
5	Modelos de Combustão Turbulenta	148
5.1	Modelo JPDF	150
5.1.1	RANS equations	155
5.1.2	LES equations	155
5.2	Modelos de Combustão Turbulenta - Método de PDF pré-assumida	157
5.2.1	Tratamento Estatístico de Reações Químicas Turbulentas	157
6	Transporte de Função Densidade de Probabilidade	161
6.1	Introdução	161
6.2	Transporte de PDF de um escalar reativo	164
6.2.1	Transporte determinístico	166
6.2.1.1	Convecção	166
6.2.1.2	Difusão	167
6.2.1.3	Reação	168
6.2.2	Transporte estocástico	169
6.2.2.1	Convecção	169
6.2.2.2	Difusão	170
6.2.2.3	Reação	170

6.3	Equação de transporte da PDF	171
6.3.1	Modelagem dos termos abertos	172
6.3.2	Modelos para o transporte turbulento	174
6.3.3	Equação diferencial estocástica equivalente	175
6.4	Resultados representativos	177
6.4.1	Transporte de escalar na ausência de escoamento	177
6.4.1.1	Comportamento de modelos de mistura	177
6.4.1.2	Reator parcialmente misturado	178
6.4.2	Transporte de escalar em escoamento turbulento	179
6.5	Desafios atuais e perspectivas	182
7	Transferência de Calor por Radiação Térmica nos Processos de Combustão	184
7.1	Transferência de Calor por Radiação Térmica nos Processos de Combustão	184
7.1.1	Poder Emissivo e Intensidade de Radiação	185
7.1.2	Equação da Transferência de Calor por Radiação - (RTE)	187
7.1.3	Atenuação da Intensidade por Absorção e Espalhamento (<i>scattering</i>)	187
7.1.4	Espalhamento	189
7.1.5	Solução da Equação da RTE	189
7.1.6	Divergência do Fluxo Radiativo em Meio Participante e Termo de Fonte na Equação da Energia	194
7.1.7	Modelo de Soma Ponderada de Gases Cinzas [WSGG]	198
7.2	Radiação e Combustão	207
7.2.1	Interação Radiação e Turbulência	208
7.2.2	Aproximação de Estrutura Turbulenta de Fina Espessura Ótica	208
7.3	Estado da Arte em Cálculo de Radiação em Chamas Turbulentas	210
7.3.1	Estudo de Caso - Calculo chama turbulenta em um diedro	211

8	Modelagem de combustão de sprays	216
8.1	Regimes de combustão de sprays e fenômenos associados	217
8.1.1	Atomização	217
8.1.2	Dispersão turbulenta	220
8.1.3	Modulação da turbulência	220
8.2	Evaporação e micromistura	220
8.3	Combustão	222
8.3.1	Processos de combustão	222
8.3.2	Regimes de combustão de sprays	223
8.4	Modelagem matemática	223
8.4.1	Modelagem do Deslocamento das Gotículas	225
8.4.2	Modelagem da Evaporação das Gotículas	226
8.4.3	Acoplamento Interfásico	232
8.4.4	Dispersão Turbulenta e Modulação da Turbulência	235
9	Aplicações do Modelo de Combustão Turbulenta com PDF pré-assumida	238
9.1	Chama Turbulenta de Metano - Chama D	239
9.1.1	Configuração numérica	239
9.1.2	Resultados e Conclusões	244
9.2	Aplicação do Modelo de Combustão Turbulenta em Chama de Spray de Etanol	254
9.2.1	Dados Experimentais	254
9.2.2	Malha	258
9.2.3	Condições de Contorno	259
9.2.4	Resultados e Discussões	264
10	Referências Bibliográficas	275

Lista de Figuras

2.1	Sistema aberto simples em interação com a vizinhança, que é um reservatório das n espécies químicas, pressão e temperatura	30
2.2	Fluxo unidirecional de calor e massa (superior) e energia e massa (inferior) através de uma parede condutora e permeável. Obs. o eixo x aponta para a esquerda. INVERTER????	37
2.3	Massa se deslocando num campo potencial associado a uma força conservativa - a força da gravidade	74
3.1	Fração mássica das espécies em função da fração de mistura.	111
3.2	Temperatura da mistura em função da fração de mistura.	112
3.3	Massa específica da mistura em função da fração de mistura.	113
3.4	Temperatura da mistura em função da fração de mistura para a reação adiabática e a não adiabática.	114
3.5	Evolução da temperatura com a fração de mistura usando o modelo de equilíbrio químico.	119
3.6	Exemplo de flamelet.	123
4.1	Espectro de energia turbulenta. No eixo vertical esta apresentado o logaritmo da energia cinética turbulenta em função número de onda k , o qual representa o inverso da escala de tamanho dos turbilhões.	127

4.2	Espectro de energia turbulenta. No eixo vertical esta apresentado o logaritmo da energia cinética turbulenta em função número de onda k , o qual representa o inverso da escala de tamanho dos turbilhões.	129
4.3	Velocidade ao longo do eixo x . A linha sólida apresenta o valor médio da velocidade e a linha irregular, apresenta as flutuações em torno da média. Na análise LES, o sinal da velocidade é filtrado de acordo com o tamanho L da malha computacional.	130
4.4	Comparação da modelagem LES e RANS para um caso de dispersão de gás numa planta de processamento químico.(a) Caso modelado como LES para o vento vindo da esquerda para direita. (b) Caso similiar modelado via RANS. (c) Caso modelado com LES para vento perpendicular a figura. (d) Caso similar modelado via RANS -(<i>Cortesia L4r1s4 - UNICAMP</i>) . . .	142
4.5	Comparação da modelagem LES e RANS para um caso de dispersão de gás numa planta de processamento químico. Vista superior(a) Caso modelado como LES para o vento vindo de cima para baixo. (b) Caso similiar modelado via RANS. (c) Caso modelado com LES para vento de baixo para cima. (d) Caso similar modelado via RANS -(<i>Cortesia L4r1s4 - UNICAMP</i>)	143
4.6	Esquema do aparato experimental sugerido por Kim & Ryou para um incêndio em poç em escala laboratorial. (<i>Kim, S.&H. Ryou (2003). An experimental and numerical study on fire suppression using a water mist in an enclosure. Building and Environment. 38, pp.1309-1316.</i>)	144
4.7	Simulação de fogo em uma poça de etanol em dois instantes de tempo. (a) Presença de uma chama mais espessa com diferentes escalas de tamanho dos turbilhões. (b) Chama menos espessa com modesta distribuição de turbilhões(<i>Cortesia L4r1s4 - UNICAMP</i>)	145
4.8	Simulação de uma chama difusiva em uma uma poça de metano. A temperatura apresentada no eixo Y representa o valor medio de 4 pontos de monitoramento localizados 2 metros acima da poça e igualmente separados. O eixo x apresenta o tempo de evolução da queima da poça. (<i>Cortesia L4r1s4 - UNICAMP</i>)	146

4.9	Simulação de uma liberação de metano na região a jusante do furo em que o número de Mach é inferior a 0,3. (<i>Cortesia L4r1s4 - UNICAMP</i>)	146
5.1	Perfis com os mesmo resultados de um reator de fluxo pistonado usando o tempo (esquerda) e a variável de progresso da reação (direita) como variável independente. Temperatura, linha sólida; fração mássica de O_2 , linha tracejada; fração mássica de CH_4 ; linha traço e ponto	151
5.2	Exemplo da distribuição de taxa de reação de c ($\dot{\omega}_c$) com a fração de mistura f e a variável de progresso da reação c como variáveis independentes.	152
6.1	Evolução no tempo do transporte de PDF devido ao processo de convecção. Espaços físico (topo), de composição, caso determinístico (centro), de composição, caso estocástico (baixo).	165
6.2	Evolução no tempo do transporte de PDF devido ao processo de difusão. Espaços físico (topo), de composição, caso determinístico (centro), de composição, caso estocástico (baixo).	167
6.3	Evolução no tempo do transporte de PDF devido ao processo de reação. Espaços físico (topo), de composição, casos determinístico e estocástico (baixo).	169
6.4	Evolução no plano (x, y) da posição seis de partículas estocásticas, cada qual ilustrada por uma cor diferente.	176
6.5	Comparação das PDFs de composição obtidas com diferentes modelos de mistura (IEM, CD, MCD) em uma situação sem reação química: $\Omega_T t = 0, 5$ (esquerda) e 2 (direita).	178
6.6	Comparação das PDFs de composição obtidas com diferentes modelos de mistura em um reator parcialmente misturado (PaSR): IEM (esquerda), LM (direita).	179

6.7	Distribuição de temperatura (K) e de fração de massa de CO_2 e de O (campos) em uma camada de cisalhamento reativa em dois instantes de tempo $t = 1$ e 2 . As iso-superfícies representam um valor constante do parâmetro $Q = 100$. Na base da figura são projetados os contornos do parâmetro Q	180
6.8	PDF de temperatura (K) (topo) distribuição de temperatura (K) e de fração de massa do átomo de oxigênio como função da fração de mistura (baixo) em três alturas da camada de cisalhamento, 0,3 (esquerda), 0,4 (centro) e 0,5 (direita), $t = 2$	181
7.1	Intensidade de radiação e definições geométricas. Extraída de Modest (2003)	186
7.2	Discretização espacial e direcional para o FVDOM. (a) volumes finitos; (b) discretização das direções em ângulos sólidos. Extraída de Modest (2003) .	191
7.3	Iso-surfaces instantâneas de temperatura resolvidas (900 K) sem (em cima) / com (a baixo) radiação térmica colorido de acordo com a velocidade transversal v em $t = 0.28\text{s}$	212
7.4	Campo instantâneo de potência radioativa (em W.m^{-3}) em $t=0.28\text{s}$. Valores positivos indicam potência radioativa perdida pelos gases, e valores negativos absorvidos.	213
7.5	Perfil da temperatura média resolvida sem (NR) e com (R100) radiação térmica ao longo do eixo do queimador em $y=0$ e $z=0$	214
7.6	Cortes em $z=0$ da fração média de CO_2 resolvida sem (NR, em cima) e com (R100, em baixo) radiação térmica.	214
7.7	Perfil do RMS filtrado da temperatura sem (NR) e com (R100) radiação térmica ao longo do eixo do queimador ($y=0$ e $z=0$).	215
8.1	Esquema representando vários regimes de escoamento e processos de atomização em sprays.	218

8.2	Esquema dos vários tipos de atomização secundária (adaptado de Jenny, Roekaerts e Beishuizen (2012)).	219
8.3	Esquema dos vários cenários da evaporação de sprays. Cenário 1: gotículas isoladas. Cenário 2: aglomerados de gotículas em regiões de alta concentração de vapor. Cenário 3: transporte de gotículas de regiões de alta concentração de vapor para regiões de baixa concentração e vice-versa (adaptado de Jenny, Roekaerts e Beishuizen (2012)).	221
8.4	Classificação dos tipos de suspensão. Adaptado de Chrigui (2005).	225
9.1	Detalhes da malha utilizada para as simulações do tipo RANS da chama Sandia/TUD D.	240
9.2	Detalhes da malha utilizada para as simulações do tipo LES da chama Sandia/TUD D.	241
9.3	Perfil de velocidade média axial e de flutuação turbulenta axial de velocidade da chama Sandia/TUD D. Adaptado de Schneider, Dreizler e Janicka (2003).	242
9.4	Comparação entre os resultados das simulações corrigidas e os dados experimentais da componente axial da velocidade.	245
9.5	Comparação entre os resultados das simulações corrigidas e os dados experimentais da fração de mistura.	246
9.6	Perfis radiais de fração de mistura média das simulações corrigidas.	246
9.7	Perfis radiais de temperatura média das simulações corrigidas.	247
9.8	Campos de temperatura, fração de mistura e componente axial de velocidade da "Simulação II".	250
9.9	Perfis de temperatura média ao longo da linha de centro da chama.	251
9.10	Comparação entre os resultados da simulação LES com os dados experimentais da fração de mistura.	252
9.11	Comparação entre os resultados da simulação LES com os dados experimentais da temperatura.	252

9.12	Campos de velocidade axial, fração de mistura e temperatura de uma realização da simulação LES.	253
9.13	Esquema do combustor usado por Masri e Gounder (2009).	256
9.14	Distribuições de velocidade média axial (esquerda) e flutuações turbulentas de velocidade axial (direita) na direção radial do spray. Extraído de Masri e Gounder (2009).	257
9.15	Distribuição de tamanho de gotículas no plano axial x/D 0,3. Extraído de Masri e Gounder (2009).	258
9.16	Distribuição de tamanho de gotículas no plano axial x/D 10. Extraído de Masri e Gounder (2009).	258
9.17	Distribuição de tamanho de gotículas no plano axial x/D 20. Extraído de Masri e Gounder (2009).	258
9.18	Distribuição de tamanho de gotículas no plano axial x/D 30. Extraído de Masri e Gounder (2009).	258
9.19	Malha utilizada para a simulação de sprays.	259
9.20	Distribuição de velocidade média axial e de flutuação turbulenta axial de velocidade da chama turbulenta de spray de etanol. Adaptado de Masri e Gounder (2009).	260
9.21	Distribuição de número de gotículas entre as curvas de injeção.	261
9.22	Relação entre os valores de diâmetros de gotículas e as suas frações mássicas para cada um dos nove raios de injeção.	262
9.23	Distribuições de tamanho de gotículas injetadas no domínio de cálculo em cada um dos nove raios de injeção.	263
9.24	Comparação dos resultados do componente axial da velocidade média das gotículas obtidos na “Simulação I” com dados experimentais.	265
9.25	Distribuição das quantidades médias: componente axial de velocidade, fração de mistura e temperatura, no plano central longitudinal do domínio de cálculo.	268

9.26	Distribuição radial do excesso de temperatura média da fase gasosa.	269
9.27	Pontos que indicam distâncias de coleta de resultados sobre o campo do termo fonte de massa.	270
9.28	Comparação entre as distribuições de tamanho de gotículas dos resultados calculados na "Simulação I" com os dados experimentais.	271

Lista de Tabelas

5.1	Condições de contorno.	153
7.1	Estudos envolvendo combustão turbulenta e radiação térmica	211

Nomenclatura

Caracteres gregos maiúsculos

$\Gamma(\psi)$ - função gama para ψ

Γ_ψ - difusividade de ψ

ΔV - volume do volume de controle

$\bar{\Phi}_{ij}$ - função de fase do espalhamento de radiação no volume de controle

Ω_i - ângulo sólido discreto

Caracteres gregos minúsculos

α - coeficiente da função β -PDF / número total de gotículas em um volume de controle; absorvidade total da parede

β - coeficiente da função β -PDF

β_η - coeficiente espectral de extinção

y - coeficiente de sub-relaxação

$\delta(x)$ - função delta de Dirac

δ_{ij} - operador delta de Kronecker

ε - dissipação da energia cinética turbulenta; emissividade total

κ - coeficiente de absorção do meio

ζ_{ui} - variável aleatória que segue uma distribuição Gaussiana, $i = 1, 2, 3$

ϑ - variável genérica
 λ - condutividade térmica
 μ - viscosidade molecular ou dinâmica
 μ_t - viscosidade turbulenta
 ρ - massa específica; refletividade total da parede
 $\sigma_{\text{espalha},\eta}$ ou $\sigma_{s,\eta}$ - coeficiente espectral de espalhamento
 σ_ε - número de Prandtl para a dissipação da energia cinética turbulenta
 σ_h - número de Prandtl para a entalpia
 σ_k - número de Prandtl para a energia cinética turbulenta
 σ_{st} - tensão superficial do líquido
 σ_t - número de Prandtl turbulento
 τ_{ij} - tensor das tensões em coordenadas cartesianas
 τ_p - escala de tempo de relaxação das partículas
 $\tau_{t\eta}$ - espessura ótica da estrutura turbulenta
 φ - relação entre as frações mássicas de combustível e de oxidante
 ψ - variável genérica
 ψ_Γ - variável genérica calculada no nó da célula Γ
 $\psi(r)$ - função limitante para a variável r
 $\dot{\omega}_k$ - taxa de produção/consumo da espécie química k , $k = 1, \dots, K$

Caracteres latinos maiúsculos

A_p - área superficial da gotícula
 A - área superficial do volume de controle
 B - número de Spalding
 $C_{1\varepsilon}$ - parâmetro de ajuste do modelo $k - \varepsilon$ Padrão

$C_{2\varepsilon}$ – parâmetro de ajuste do modelo $k - \varepsilon$ Padrão
 $C_{3\varepsilon}$ – constante de ajuste do termo fonte de dissipação de energia cinética turbulenta
 C_μ – parâmetro de ajuste do modelo $k - \varepsilon$ Padrão
 C_D – coeficiente de arrasto
 Cd – parâmetro de ajuste da equação de transporte da variância da fração de mistura
 CFL – número de Courant-Friedrichs-Lewy
 C_g – parâmetro de ajuste da equação de transporte da variância da fração de mistura
 $C_{l,\infty}$ – concentração de vapor do líquido na fase gasosa
 $C_{l,S}$ – concentração do vapor do líquido na superfície da gotícula proveniente do acoplamento interfásico
 C_k - concentração molar da espécie k
 D – coeficiente de difusão mássica / diâmetro do bocal de injeção de combustível
 D_γ – coeficiente difusivo da face γ de uma célula
 D_{kl} ou D_k - difusividade mássica binária da espécie k na espécie l
 E - Poder Emissivo
 $E_b = \sigma T^4$ - poder emissivo de corpo negro
 F – fator utilizado na linearização de termos fontes
 G_η - energia radiante espectral incidente
 G - energia radiante total incidente
 I_λ - Intensidade espectral de radiação
 $I_{\lambda,b}$ - intensidade espectral de um corpo negro
 I_b - intensidade de radiação de corpo negro
 I_η ou I - intensidade de radiação no número de onda η

J_ω - Radiosidade na parede

\mathbf{J}_k - vetor fluxo mássico relativo à velocidade da mistura

\mathbf{J}_k^{mol} - vetor fluxo molar relativo à velocidade da mistura

L_e - tamanho característico de um turbilhão

Le - número de Lewis

Le_k - número de Lewis para a espécie química k , $k = 1, \dots, K$

Ma - número de Mach

N_l - fluxo molar de combustível

Nu - número de Nusselt

$P(\psi)$ - função densidade de probabilidade de ψ

P_Γ - pressão calculada no nó da célula Γ

Pr - número de Prandtl

Re - número de Reynolds

Re_e - número de Reynolds de escorregamento

R_u - constante universal dos gases perfeitos

S_ψ - termo fonte da variável ψ

S_{ψ_a} - parte implícita do termo fonte linearizado de ψ

S_b - parte explícita do termo fonte linearizado de ψ

S_c - parte explícita do termo fonte de ψ

S_u^{DC} - correção deferida dos métodos TVD

S_{ψ_P} - parte implícita do termo fonte de ψ

S_{ij} - tensor deformação em coordenadas cartesianas

Sc - número de Schmidt

Sc_k - número de Schmidt para a espécie química k , $k = 1, \dots, K$

Sh - número de Sherwood

St – número de Stokes

\bar{S}_1 – termo fonte de massa proveniente do acoplamento interfásico

\bar{S}_ε – termo fonte de dissipação de energia cinética turbulenta proveniente do acoplamento interfásico

\bar{S}_f – termo fonte de fração de mistura proveniente do acoplamento interfásico

$\overline{S_{f'^2}}$ – termo fonte de variância de fração de mistura proveniente do acoplamento interfásico

\bar{S}_h – termo fonte de entalpia proveniente do acoplamento interfásico

\bar{S}_k – termo fonte de energia cinética turbulenta proveniente do acoplamento interfásico

\bar{S}_{ui} – termo fonte da componente i da quantidade de movimento linear proveniente do acoplamento interfásico, $i = 1, 2, 3$

ξ_{rad} - termo de fonte devido à radiação térmica

T – temperatura da mistura

T_0 – temperatura de referência empírica

T_{bp} – temperatura de ebulição

T_{ref} – temperatura de referência de cálculo

T_t – escala de tempo integral da turbulência

U_0 – componente axial da velocidade média na saída do bocal

Vel_{mg} – velocidade obtida com malha grosseira

Vel_{mr} – velocidade obtida com malha refinada

\mathbf{V}_k A velocidade de difusão da espécie k

X_l – fração molar de vapor na fase gasosa

X_k) - fração molar da espécie química k , $k = 1, \dots, K$

W_k – massa molar da espécie química k , $k = 1, \dots, K$

We – número de Weber

Y_k – fração mássica da espécie química k , $k = 1, \dots, K$

Caracteres latinos minúsculos

a_K - pesos de ponderação no modelo WSGG

c_p - calor específico sensível para a mistura

$c_{p,k}$ - calor específico sensível para a espécie química k , $k = 1, \dots, K$

d_p - diâmetro de uma partícula

dA_j - area infinitesimal da superfície de radiação j

f - fração de mistura

f_{mg} - fração de mistura obtida em malha grosseira

f_{mr} - fração de mistura obtida em malha refinada

f_{st} - fração de mistura estequiométrica

\vec{g}/g_i - vetor aceleração da gravidade / componente cartesiana na direção i ,
 $i = 1, 2, 3$

h - entalpia específica da mistura / coeficiente de transferência de calor por convecção

h_{fg} - calor específico latente do líquido

h_{fl} - entalpia de formação do líquido

h_k - entalpia específica para a espécie química k , $k = 1, \dots, K$

h_k^o - entalpia de formação para a espécie química k , $k = 1, \dots, K$

k - energia cinética turbulenta

k_C - coeficiente de transferência de massa

k_∞ - condutividade térmica da fase gasosa

l_t - escala de comprimento característico das estruturas turbulentas

n_k - número de moles da espécie química k , $k = 1, \dots, K$

m - massa

m_P - massa da gotícula

\dot{m}_k vetor fluxo mássico da espécie k
 \dot{n}_k vetor fluxo molar da espécie k
 p – pressão
 $p_{sat}(T)$ – pressão de saturação em função da temperatura
 $q(\psi)$ – média de ψ
 \mathbf{q} - vetor fluxo de calor
 \mathbf{q}_{rad} - vetor fluxo de calor por radiação térmica
 \mathbf{n} - vetor normal do elemento infinitesimal de área dA
 r – variável aleatória de distribuição uniforme
 s – razão mássica, estequiométrica, de oxidante/combustível; direção de propagação da intensidade de radiação
 t – tempo
 t_{cross} – intervalo de tempo de travessia por um turbilhão
 t_e – intervalo de tempo de vida de um turbilhão
 \vec{u}/u_i – vetor velocidade / componente cartesiana na direção i , $i = 1, 2, 3$
 u_γ – componente da velocidade perpendicular a face γ de uma célula
 \mathbf{v}_k velocidade da espécie k em relação a um sistema de coordenadas estacionário
 \mathbf{v} velocidade da mistura, ponderada pela massa específica de cada espécie
 \mathbf{v}^{mol} velocidade da mistura ponderada pela concentração molar de cada espécie
 \vec{x} – vetor deslocamento
 x_i – comprimento em coordenadas cartesianas

Caracteres de outra origem

∞ – infinito

Capítulo 1

Introdução

Diversas atividades da sociedade moderna demandam cada vez mais energia, como o uso intensivo de equipamentos elétricos e eletrônicos, processos térmicos industriais e o fluxo crescente de transporte de pessoas e mercadorias. Produzir e usar a energia de forma eficiente e ambientalmente sustentável é um dos grandes desafios do nosso tempo.

Dentre as principais tecnologias de geração e conversão de energia, como a fissão nuclear, os painéis fotovoltaicos e as turbinas hidráulicas e eólicas, a forma predominante é por meio de processos de combustão. Segundo o Balanço Energético Nacional de 2014 (Empresa de Pesquisa Energética, 2014), 82% da energia consumida no Brasil provém da combustão de combustíveis fósseis ou renováveis.

O constante avanço tecnológico dos processos de combustão visa diminuir o seu impacto sobre o meio ambiente, seja aumentando o rendimento dos processos e consequentemente diminuindo a quantidade de combustível consumida, seja diminuindo as emissões de poluentes e de gases promotores do efeito estufa. Entender o processo de combustão detalhadamente é imprescindível para se chegar a esses objetivos.

Este livro, fruto do trabalho de vários pesquisadores brasileiros da área de combustão, visa contribuir para o estudo dos processos de combustão em duas áreas diferentes e complementares. A primeira parte do livro é dedicada ao estudo de modelos computacionais para simulação de processos de combustão; a segunda parte é dedicada às técnicas avançadas de diagnóstico de combustão.

Este texto está organizado na seguinte forma: O equacionamento físico e modelos computacionais dos processos de combustão estão nos Capítulos 2 a 9; a discussão e aplicação das técnicas ópticas para diagnóstico de combustão estão nos Capítulos 10 a 18. No Capítulo 2 as equações que descrevem os escoamentos reativos são descritas. No Capítulo 3 os modelos de combustão laminar são abordados. Os modelos para escoamentos turbulentos são descritos nos Capítulos 4. O Capítulo 5 aborda os modelos de combustão turbulenta mais simples e os que usam funções densidade de probabilidade com forma pré-assumida, enquanto o Capítulo 6 aborda os modelos de transporte de função densidade de probabilidade. Os processos de transferência de calor por radiação térmica são descritos no Capítulo 7, com o Capítulo 8 abordando a modelagem de sprays em sistemas com combustão. No capítulo Capítulo 9 são discutidos exemplos de chamas de metano e etanol calculadas com os modelos apresentados nos capítulos anteriores. O capítulo 10 apresenta os fundamentos de espectroscopia e interação luz/matéria, enquanto que o capítulo 11 apresenta fundamentos de espectroscopia de emissão e absorção aplicáveis no diagnóstico da combustão. O capítulo 12 apresenta características gerais sobre a produção de um feixe laser e suas aplicações. Nos capítulos 13 e 14 são apresentados os conceitos de anemometria e interferometria a laser por efeito Doppler. Já o capítulo 15 apresenta a técnica de velocimetria por imagens de partículas. As técnicas de fluorescência e luminescência induzida por laser são apresentadas nos capítulos 16 e 17. O capítulo 18 apresenta fundamentos e aplicação da análise de incertezas para os métodos de medição óptica.

Capítulo 2

Termodinâmica dos Processos de Combustão e Equações de Transporte para escoamentos Reativos

Guenther Carlos Krieger Filho

Um escoamento de uma mistura gasosa composta de várias espécies químicas que reagem entre si é denominado sucintamente como um escoamento reativo. Os principais processos envolvidos em um escoamento reativo são a dinâmica da mistura, as reações químicas e a transferência de calor através dessa mistura de gases. Embora estes processos sejam interdependentes, separá-los facilita a sua modelagem física. Para a maior parte dos escoamentos encontrados em aplicações práticas de engenharia, a dinâmica de uma mistura é bem representada por um conjunto de equações de conservação: de massa, de quantidade de movimento linear e das espécies químicas. A modelagem da transferência de calor é feita com a equação de conservação da energia em conjunto com as equações anteriores. Para escoamentos em que a transferência de calor por radiação seja significativa, um modelo para o campo de intensidade de radiação deve ser adicionado, como será discutido no Capítulo 7. As reações químicas são descritas por um conjunto

de equações do mecanismo cinético químico. Os modelos usados para as reações químicas serão discutidos no Capítulo 3.

Neste capítulo, serão formulados o modelo termodinâmico dos processos de combustão, as propriedades de transporte e as equações de conservação para escoamentos reativos.

2.1 Termodinâmica dos processos de combustão

Qualquer análise termodinâmica requer a definição clara e precisa de **sistema** e **vizinhança**. Denominamos **sistema** a coleção de matéria ou região no espaço no qual serão aplicadas as Leis da Termodinâmica. Consequentemente, **vizinhança** é todo o restante de matéria ou região do espaço fora do sistema. O que separa o sistema da vizinhança é a superfície lógica denominada **fronteira**. As Leis da Termodinâmica foram formuladas inicialmente para sistemas, nos quais a massa é constante, chamados **sistemas fechados**. Nos sistemas fechados, a análise termodinâmica permite que somente energia cruze a fronteira do sistema, numa interação tipo Calor ou Trabalho. Entretanto, para aplicações de engenharia, é mais útil formular as Leis da Termodinâmica para regiões do espaço nas quais é permitido que também massa cruze a fronteira do sistema, ao qual referimos **sistemas abertos** ou **volume de controle**, (V.C.), que será utilizada neste texto. Neste livro, todas as reações de combustão são homogêneas e ocorrem somente na fase gasosa. Estão excluídas, portanto, reações heterogêneas que ocorrem na interface de meios sólidos, líquidos e gasosos. Para a análise do processo de combustão na fase gasosa, é suficiente modelar o fluido como uma mistura de gases ideais (POINSOT; VEYNANTE, 2001). Em uma mistura de gases, cada espécie (k) é quantificada pela sua fração mássica (Y_k) na mistura, definida como

$$Y_k \equiv \frac{m_k}{m}, \quad (2.1)$$

em que m é a massa total presente em um dado volume V , m_k é a massa da espécie k neste mesmo volume. A definição de fração mássica (Equação 2.1) implica que

$$\sum_{k=1}^N Y_k = \sum_{k=1}^N \frac{m_k}{m} = \frac{m}{m} = 1. \quad (2.2)$$

Isto significa que para satisfazer a conservação da massa, o somatório das frações mássicas de todas as espécies químicas tem que ser unitário.

Definindo-se a massa específica da espécie k como

$$\rho_k = \frac{m_k}{V} \quad (2.3)$$

e re-escrevendo-se o lado direito da Equação 2.1, tem-se

$$Y_k = \frac{\frac{m_k}{V}}{\frac{m}{V}} = \frac{\rho_k}{\rho}. \quad (2.4)$$

Somando a Equação 2.4 para todas as espécies,

$$\rho \sum_{k=1}^N Y_k = \sum_{k=1}^N \rho_k \quad (2.5)$$

e ainda, com a Equação 2.2,

$$\rho = \sum_{k=1}^N \rho_k, \quad (2.6)$$

ou seja, a massa específica da mistura é a soma das massas específicas das espécies.

A pressão termodinâmica p da mistura e a pressão parcial p_k das espécies são relacionadas por

$$p = \sum_{k=1}^N p_k \quad (2.7)$$

e

$$p_k = \rho_k \frac{R}{W_k} T, \quad (2.8)$$

onde T é a temperatura da mistura, W_k é a massa molecular da espécie k e $R = 8314$ J/mol K é a constante universal dos gases. Combinando-se as Equações 2.7 e 2.8, tem-se

$$p = \sum \rho_k \frac{R}{W_k} T. \quad (2.9)$$

Substituindo-se a Equação 2.4 em 2.9, e com a definição de massa molecular da mistura, $1/W \equiv \sum Y_k/W_k$, tem-se

$$p = \rho \frac{R}{W} T, \quad (2.10)$$

que é a equação de estado para a mistura de N espécies tratadas como gases ideais.

A relação entre fração mássica (Y_k) e fração molar (X_k) é dada por

$$X_k = \frac{Y_k/W_k}{\sum_{j=1}^N (Y_j/W_j)}, \quad j = 1, 2, \dots, N. \quad (2.11)$$

Pode-se também expressar a massa da espécie k na forma de concentração como

$$C_k = \frac{m_k}{V}. \quad (2.12)$$

A entalpia da mistura gasosa em um sistema reativo, expressa na forma da entalpia absoluta (h) (TURNS, 2000) é

$$h = \sum_{k=1}^N h_k Y_k, \quad (2.13)$$

em que h_k é a entalpia absoluta da espécie k .

Em um sistema reativo, é necessário considerar a energia fornecida ou retirada do sistema quando uma molécula de uma espécie química se transforma em outra. Esta energia é contabilizada na entalpia da formação da espécie k ($h_{f,k}^o$). O sobrescrito o representa o estado termodinâmico padrão de referência. Assim, a entalpia absoluta da espécie k é calculada por

$$h_k = h_{f,k}^o + \int_{T^o}^T c_{p,k} dT, \quad (2.14)$$

onde $c_{p,k}$ é o calor específico a pressão constante da espécie k . Normalmente os valores de $h_{f,k}^o$ são tabelados para o estado termodinâmico padrão de referência: temperatura $T^o = 298,15$ K e pressão $p^o = 101325$ Pa. Por convenção assume-se que a entalpia de formação dos elementos ou espécies químicas, que no estado de padrão de referência são encontrados em sua configuração molecular mais abundante, são nulas. Assim,

$$h_{f,O_2}^o = h_{f,N_2}^o = h_{f,H_2}^o = 0. \quad (2.15)$$

A entalpia específica de formação, em base mássica, e a entalpia de formação molar ($h_f^{o,mol}$) se relacionam por

$$h_{f,k}^o = \frac{h_{f,k}^{o,mol}}{W_k}. \quad (2.16)$$

Da mesma forma, o calor específico a pressão constante e o calor a pressão constante molar são relacionados por

$$c_{p,k} = \frac{c_{p,k}^{mol}}{W_k}. \quad (2.17)$$

Assim, a entalpia absoluta da mistura reativa pode ser expressa por

$$h = \sum_{k=1}^N h_k Y_k = \sum_{k=1}^N \left(\int_{T^o}^T c_{p,k} dT + h_{f,k}^o \right) Y_k \quad (2.18)$$

ou ainda

$$h = \int_{T_o}^T c_p dT + \sum_{k=1}^N h_{f,k}^o Y_k, \quad (2.19)$$

em que o calor específico a pressão constante da mistura é avaliado por

$$c_p \equiv \sum_{k=1}^N c_{p,k} Y_k. \quad (2.20)$$

As entalpias de formação e calor específico são disponíveis na literatura (Turns (2000) e Kuo (1986)) e em bases de dados disponíveis em softwares como CHEMKIN (KEE; RUPLEY; MILLER, 1989).

A entropia da mistura, para uma temperatura T e pressão P , pode ser avaliada por:

$$S_{mist}(T, P) = \sum_{k=1}^N N_k \bar{s}_k(T, P_k), \quad (2.21)$$

em que N_k é o número de moles da espécie k . Considerando-se as espécies químicas como mistura de gases ideais, a entropia molar espécie k , em relação ao estado de referência definido por T^o e P^o , pode ser avaliada por

$$\bar{s}_k = \bar{s}_k^o(T^o) + \int_{T^o}^T \bar{c}_{p,k} \frac{dT}{T} - R_u \ln \frac{P_k}{P^o}. \quad (2.22)$$

2.2 Equilíbrio Termodinâmico em Sistemas Multicomponentes

Considere o **volume de controle simples** da figura 2.1. A vizinhança, que também é um volume de controle simples, é identificada com o subíndice "0".

Para este V.C. são feitas as seguintes hipóteses:

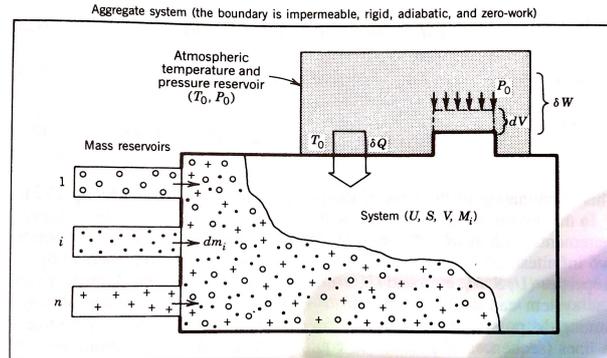


Figura 2.1 – Sistema aberto simples em interação com a vizinhança, que é um reservatório das n espécies químicas, pressão e temperatura

- sem influências de campo gravitacional, elétrico, magnético e de forças de inércia;
- macroscopicamente homogêneo e isotrópico, ou seja, não há necessidade de restrições internas à transferência de calor, expansão da fronteira ou impermeável para que todo o V.C. seja descrito por um único valor de suas propriedades
- monofásico
- multicomponente

Integrando-se as equações da 1a e 2a Leis para um volume de controle num intervalo de tempo dt (??? seria melhor colocar a equação na forma de taxa antes???) tem-se:

$$dU = \delta Q - \delta W + \sum_{i=1}^n h_{0,i} dm_i \quad (2.23)$$

e

$$\delta S_{ger} = dS - \frac{\delta Q}{T_0} - \sum_{i=1}^n s_{0,i} dm_i \geq 0 \quad (2.24)$$

Observe que foram desprezadas as contribuições das energias potencial e cinética. Somando-se as duas equações tem-se:

$$dU = T_0 dS - \delta W + \sum_{i=1}^n (h_{0,i} - T_0 s_{0,i}) dm_i - T_0 \delta S_{ger} \quad (2.25)$$

lembrando que $\delta W_{rev} = P_0 dV$ e que, para o caso limite de processos reversíveis, $S_{ger} = 0$ tem-se:

$$dU = T_0 dS - P_0 dV + \sum_{i=1}^n (h_{0,i} - T_0 s_{0,i}) dm_i \quad (2.26)$$

Define-se o potencial químico molar da espécie i, μ_i , como:

$$\mu_i \equiv (\bar{h}_i - T \bar{s}_i) \quad (2.27)$$

então a Eq.(2.26) é reescrita como:

$$dU = T_0 dS - P_0 dV + \sum_{i=1}^n \mu_{0,i} dN_i \quad (2.28)$$

ou seja, a energia de um sistema simples pode ser alterada por variações independentes da entropia, volume e composição química.

Analogamente, pode-se escrever para a vizinhança, "0", interagindo com o sistema aberto simples:

$$dU_0 = T dS_0 - P dV_0 + \sum_{i=1}^n \mu_i dN_{0,i} \quad (2.29)$$

Observe que todos os processos são reversíveis, $S_{ger} = 0$, no sistema aberto simples. Isto permite caracterizar todo o sistema por um único valor das propriedades, por exemplo a pressão P . Por isso foi possível expressar o trabalho na fronteira entre o sistema e vizinhança em função da pressão P do sistema.

Examinaremos agora o sistema agregado, Σ , que é composto pelo sistema aberto simples e pela vizinhança. Este sistema agregado é isolado, ou seja, sem transferência de calor, massa ou trabalho Assim, para o sistema agregado, a variação do número de moles total, do volume total e da energia interna total são nulas

$$dN_{\Sigma,i} = dN_i + dN_{0,i} = 0; (i = 1, 2, \dots, n) \quad (2.30)$$

$$dV_{\Sigma} = dV + dV_0 = 0 \quad (2.31)$$

$$dU_{\Sigma} = dU + dU_0 = 0 \quad (2.32)$$

Isolando-se a variação de entropia nas Eqs. (2.28) e (2.29), e com as equações (2.30), (2.31) e (2.32), tem-se a expressão da entropia do sistema agregado:

$$dS_{\Sigma} = dS + dS_0 = \left(\frac{1}{T_0} - \frac{1}{T} \right) dU + \left(\frac{P_0}{T_0} - \frac{P}{T} \right) dV + \sum_{i=1}^n \left(\frac{\mu_i}{T} - \frac{\mu_{0,i}}{T_0} \right) dN_i \quad (2.33)$$

O princípio da máxima entropia diz que a variação da entropia de um sistema isolado e sem restrições internas - quando não há barreiras internas à transferência de calor, à expansão da fronteira ou à transferência de espécies químicas - é nula, ou seja, $dS_{\Sigma} = 0$. Este é um estado de **equilíbrio termodinâmico estável**. Assim, a equação 2.33 torna-se:

$$\left(\frac{1}{T_0} - \frac{1}{T} \right) dU + \left(\frac{P_0}{T_0} - \frac{P}{T} \right) dV + \sum_{i=1}^n \left(\frac{\mu_i}{T} - \frac{\mu_{0,i}}{T_0} \right) dN_i = 0 \quad (2.34)$$

Isto implica que as propriedades temperatura, pressão e potencial químico dos dois sistemas devem satisfazer, em ordem, que:

$$T = T_0 \quad (2.35)$$

$$P = P_0 \quad (2.36)$$

$$\mu_i = \mu_{i,0}, (i = 1, 2, \dots, n) \quad (2.37)$$

Com esta condição de equilíbrio termodinâmico estável entre o sistema simples e a vizinhança, a Eq.(2.28) torna-se:

$$dU = TdS - PdV + \sum_{i=1}^n \mu_i dN_i \quad (2.38)$$

A forma analítica da Eq. (2.38) sugere que a energia interna seja expressa em função das propriedades entropia, volume e número de moles de cada espécie na mistura:

$$U = U(S, V, N_1, \dots, N_n) \quad (2.39)$$

e também que a propriedades temperatura, pressão e potencial químico sejam coeficientes relacionados às derivadas parciais da energia interna em relação à entropia, volume e número de moles de cada espécie:

$$T = \left(\frac{\partial U}{\partial S} \right)_{V, N_1, \dots, N_n} \quad (2.40)$$

$$-P = \left(\frac{\partial U}{\partial V} \right)_{S, N_1, \dots, N_n} \quad (2.41)$$

$$\mu_i = \left(\frac{\partial U}{\partial N_i} \right)_{V, N_1, \dots, N_{i-1}, N_{i+1}, \dots, N_n} \quad (2.42)$$

A Eq. (2.39) é chamada **relação fundamental para representação da energia interna**. Vale observar o significado físico de cada termo da Eq.(2.38): o primeiro termo do lado direito representa a quantidade de energia transferida por calor reversível, δQ_{rev} , ou seja, com uma diferença infinitesimal de temperatura entre o sistema e a vizinhança; o segundo termo indica quantidade de energia transferida por trabalho reversível, δW_{rev} , pela expansão da fronteira entre o sistema e a vizinhança e o último termo quantifica a energia interna transferida por trabalho reversível químico, $\delta W_{chem,i,rev}$, devido ao fluxo de potencial químico associado ao fluxo de dN_i moles da espécie i

Outra forma analítica da eq 2.38 pode ser:

$$dS = \frac{1}{T} dU + \frac{P}{T} dV - \sum_{i=1}^n \frac{\mu_i}{T} dN_i \quad (2.43)$$

que sugere:

$$S = S(U, V, N_1, \dots, N_n) \quad (2.44)$$

e também:

$$\frac{1}{T} = \left(\frac{\partial S}{\partial U} \right)_{V, N_1, \dots, N_n} \quad (2.45)$$

$$\frac{P}{T} = \left(\frac{\partial S}{\partial V} \right)_{U, N_1, \dots, N_n} \quad (2.46)$$

$$-\frac{\mu_i}{T} = \left(\frac{\partial S}{\partial N_i} \right)_{V, N_1, \dots, N_{i-1}, N_{i+1}, \dots, N_n} \quad (2.47)$$

A Eq. (2.44) é chamada **relação fundamental para representação da entropia**. As duas relações fundamentais, Eqs. (2.39) e (2.44), serão utilizadas neste texto, de acordo com a conveniência.

2.2.1 Relação entre propriedades Extensivas versus Intensivas

Considere um sistema fechado simples A composto de λ subpartes todas em equilíbrio termodinâmico estável entre si de forma que:

$$U_A = \lambda U \quad (2.48)$$

$$S_A = \lambda S \quad (2.49)$$

$$V_A = \lambda V \quad (2.50)$$

$$N_{A,i} = \lambda N_i \quad (2.51)$$

invocando-se 2.39, tem-se:

$$U_A(S_A, V_A, N_{A,i}) = \lambda U(S, V, N_i) \quad (2.52)$$

A eq 2.38 para o sistema simples A é:

$$dU_A = T_A dS_A - P_A dV_A + \sum_{i=1}^n \mu_{A,i} dN_{A,i} \quad (2.53)$$

Com a definição da Temperatura, Eq.(2.40),:

$$T_A = \left(\frac{\partial U_A}{\partial S_A} \right)_{V_A, N_{A,i}} = \left[\frac{\partial(\lambda U)}{\partial(\lambda S)} \right]_{V_A, N_{A,i}} = \left(\frac{\partial U}{\partial S} \right)_{V, N_i} \quad (2.54)$$

Analogamente, para um dos subsistemas vale:

$$T = \left(\frac{\partial U}{\partial S} \right)_{V, N_i} \quad (2.55)$$

e então, igualando-se Eqs. (2.54) e (2.55)

$$T_A(S_A, V_A, N_{A,i}) = T(S, V, N_i) \quad (2.56)$$

ou seja, a temperatura do sistema A , composto de λ subpartes, todas em equilíbrio termodinâmico entre si, é a mesma dos subsistemas. O mesmo pode ser mostrado para as propriedades pressão e potencial químico. Propriedades que satisfazem condições na forma da Eq.(2.56) são chamadas **propriedades intensivas**.

2.2.2 Equação de Euler

Uma relação importante entre propriedades intensivas e extensiva é obtida derivando-se 2.52 em ambos os lados em relação a λ tem-se:

$$\left(\frac{\partial U_A}{\partial S_A} \right)_{V_A, N_{A,i}} \frac{\partial S_A}{\partial \lambda} + \left(\frac{\partial U_A}{\partial V_A} \right)_{S_A, N_{A,i}} \frac{\partial V_A}{\partial \lambda} + \sum_{i=1}^n \left(\frac{\partial U_A}{\partial N_{A,i}} \right)_{S_A, V_A, N_{A,j}, (i \neq j)} \frac{\partial N_{A,i}}{\partial \lambda} = U \quad (2.57)$$

ou

$$\left(\frac{\partial U_A}{\partial S_A} \right)_{V_A, N_{A,i}} \frac{\partial(\lambda S)}{\partial \lambda} + \left(\frac{\partial U_A}{\partial V_A} \right)_{S_A, N_{A,i}} \frac{\partial(\lambda V)}{\partial \lambda} + \sum_{i=1}^n \left(\frac{\partial U_A}{\partial N_{A,i}} \right)_{S_A, V_A, N_{A,j}, (i \neq j)} \frac{\partial(\lambda N_i)}{\partial \lambda} = U \quad (2.58)$$

calculando-se as derivadas parciais em relação a λ e com as equações (2.40), (2.41) e (2.42) tem-se:

$$T_A S - P_A V + \sum_{i=1}^n \mu_{A,i} N_i = U \quad (2.59)$$

Como, P, T e μ_i são propriedades intensivas, pode-se reescrever:

$$T S - P V + \sum_{i=1}^n \mu_i N_i = U \quad (2.60)$$

ou na forma da entropia:

$$S = \frac{1}{T} U + \frac{P}{T} V + \sum_{i=1}^n \frac{\mu_i}{T} N_i \quad (2.61)$$

que também é chamada de **Equação de Euler**

2.3 Processos Irreversíveis

No que se segue serão discutidos os processos irreversíveis importantes para a formulação dos fluxos de massa, momento e energia em processos de combustão.

Considere um sistema agregado composto por dois subsistemas separados por uma partição como ilustrado na figura (2.2). A partição é rígida, mas pode conduzir calor e é permeável às espécies.

Os dois subsistemas têm volumes fixos e então a Equação 2.43 se torna:

$$dS = \frac{1}{T} dU - \sum_{i=1}^n \frac{\mu_i}{T} dN_i \quad (2.62)$$

e para o sub-sistema denotado por $(.)'$:

$$dS' = \frac{1}{T'} dU' - \sum_{i=1}^n \frac{\mu'_i}{T'} dN'_i \quad (2.63)$$

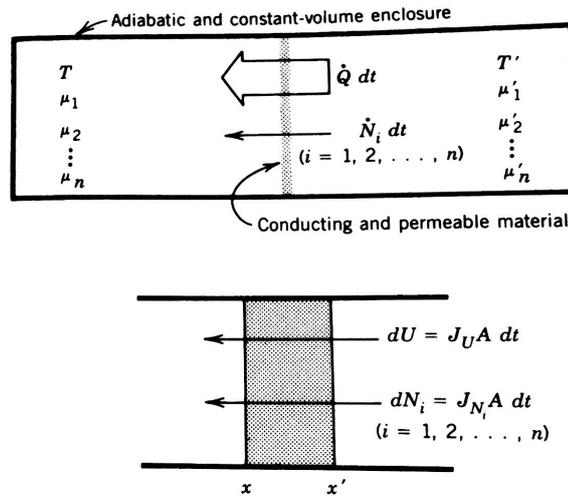


Figura 2.2 – Fluxo unidirecional de calor e massa (superior) e energia e massa (inferior) através de uma parede condutora e permeável. Obs. o eixo x aponta para a esquerda.
INVERTER????

Analizando o sistema agregado isolado - ou seja, sem trabalho, sem transferência de calor e massa - constituído pelos dois subsistemas:

$$dU + dU' = 0 \quad (2.64)$$

$$dN_i + dN'_i = 0 \quad (2.65)$$

O Princípio do aumento da entropia de um sistema isolado diz que:

$$\Delta S_{ger} = dS + dS' \geq 0 \quad (2.66)$$

A variação da entropia do sistema agregado isolado é obtida substituindo-se as eqs. 2.62, 2.63, 2.64 e 2.65 na 2.66 :

$$\Delta S_{ger} = \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T'} \right) dU - \sum_{i=1}^n \left(\frac{\mu_i}{T} - \frac{\mu'_i}{T'} \right) dN_i \geq 0 \quad (2.67)$$

ou na forma de taxa e dividindo pela área da secção reta da partição onde ocorrem os fluxos:

$$\frac{\Delta \dot{S}_{ger}}{A} = \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T'} \right) \underbrace{\frac{dU/dt}{A}}_{J_U} - \sum_{i=1}^n \left(\frac{\mu_i}{T} - \frac{\mu'_i}{T'} \right) \underbrace{\frac{dN_i/dt}{A}}_{J_{N_i}} \geq 0 \quad (2.68)$$

em que J_U é o fluxo líquido de energia através da fronteira e J_{N_i} é o fluxo molar líquido da espécie i

A equação 2.68 mostra que $n + 1$ fluxos contribuem para a taxa de geração de entropia por unidade de área. Observe que os fluxos são associados às diferenças entre as propriedades intensivas T e N_i nos dois lados da partição. Considerando que a diferença ocorre numa distância $\Delta x = x - x'$, que é a partição que separa os dois subsistemas, tem-se:

$$\frac{\Delta \dot{S}_{ger}}{A \Delta x} = \frac{T^{-1} - (T')^{-1}}{x - x'} J_U + \sum_{i=1}^n \frac{(-\mu_i/T) - (-\mu'_i/T')}{x - x'} J_{N_i} \geq 0 \quad (2.69)$$

tomando-se o limite quando a espessura da partição tende a zero, tem-se:

$$s'''_{ger} = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \left(\frac{\Delta \dot{S}_{ger}}{A \Delta x} \right) = J_U \underbrace{\frac{\partial}{\partial x} \frac{1}{T}}_{X_U} + \sum_{i=1}^n J_{N_i} \underbrace{\frac{\partial}{\partial x} \frac{-\mu_i}{T}}_{X_{N_i}} \geq 0 \quad (2.70)$$

em que s'''_{ger} é a taxa volumétrica - local - de geração de entropia, dada em W/Km^3

Os gradientes das propriedades intensivas, X_U e X_{N_i} , são as **Forças Conjugadas** associadas aos **Fluxos Conjugados**, J_U e J_{N_i} , respectivamente.

Em notação tensorial, a Equação (2.70) torna-se:

$$s'''_{ger} = \mathbf{J}_U \cdot \nabla \left(\frac{1}{T} \right) + \sum_{i=1}^n \mathbf{J}_{N_i} \cdot \nabla \left(\frac{-\mu_i}{T} \right) \quad (2.71)$$

Os dois sub-sistemas separados pela partição estão, individualmente, em equilíbrio termodinâmico (usamos a Equação (2.43) para eles) e, por isso, não há gradientes das propriedades intensivas neles. Assim, a geração de entropia é localizada na partição.

A partição, que faz parte do sistema agregado para o qual aplicamos a 1a e 2a leis, pode ser vista como um sanduiche de um grande número de camadas de espessura infinitesimal Δx . Em cada camada infinitesimal, vale o conceito de **Equilíbrio Termodinâmico Local**, que suporta a caracterização do estado termodinâmico de um sistema de espessura infinitesimal Δx , por uma única temperatura e um único potencial químico para cada espécie. As propriedades intensivas de uma camada diferem infinitesimalmente das propriedades da camada adjacente. Desta forma, a entropia gerada - Eq.(2.71) - é associada às irreversibilidades associadas às interações de massa e energia entre duas camadas infinitesimais adjacentes.

Pode-se re-escrever a Eq. (2.70) na forma compacta:

$$s_{ger}''' = \sum_{i=0}^n J_i X_i \geq 0, (i = 0, 1, \dots, n) \quad (2.72)$$

Qualquer processo real, espontâneo, de transferência de energia ou massa, implica em pelo menos um par conjugado (J_i, X_i) no qual ambos os parâmetros sejam não nulos. Se, por outro lado, todas as forças conjugadas (X_i) forem nulas, a taxa local de geração de entropia também o será.

Também os conjugados de fluxo e força podem ser generalizados, a partir das equações (2.68) e (2.70) na forma:

$$J_i = \frac{1}{A} \frac{da_i}{dt} \quad (2.73)$$

e

$$X_i = \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial S}{\partial a_i} \right) \quad (2.74)$$

em que a_i são os argumentos da função homogênea de S , como na eq (2.44),

$$S = S(a_0, a_1, \dots, a_n) \quad (2.75)$$

Conclui-se, então, que os fluxos conjugados são proporcionais às derivadas temporais das propriedades extensivas que aparecem na Eq. (2.75), ou na Eq. 2.44, enquanto que as forças conjugadas correspondentes são os gradientes dos coeficientes das propriedades intensivas que aparecem na forma diferencial, eq.(2.45,2.46,2.47).

2.3.1 Relações Linearizadas

Evidências experimentais em transferência de calor e massa indicam que um fluxo qualquer (J_i) é induzido não somente pela sua força conjugada (X_i), mas também por forças conjugadas de outros fluxos, ($X_j; j \neq i$). Com isto, postula-se que um fluxo qualquer pode depender de todas as forças conjugadas ($X_i; i = 0, 1, \dots, n$) e de todas as propriedades intensivas avaliadas em um ponto de interesse. Assim,

$$J_i = J_i(X_0, X_1, \dots, X_n; T, \mu_1, \dots, \mu_n), (i = 0, 1, \dots, n) \quad (2.76)$$

Uma expressão analítica que relaciona o fluxo J_i e todas as outras forças conjugadas pode ser obtida com uma expansão de Taylor para J_i em torno do ponto $X_0 = X_1 = \dots = X_n = 0$, para incrementos infinitesimais das forças conjugadas:

$$J_i = (J_i)_{X_0=X_1=\dots=X_n=0} + \frac{\partial J_i}{\partial X_0} X_0 + \dots + \frac{\partial J_i}{\partial X_n} X_n + O(X_i^2), (i = 0, 1, \dots, n) \quad (2.77)$$

A relação funcional do fluxo particular (J_i), Eq. (2.77), deve:

- garantir que o fluxo seja nulo quando todas as forças conjugadas forem nulas. Assim o primeiro termo da Eq. (2.77) é nulo:

$$(J_i)_{X_0=X_1=\dots=X_n=0} = 0, (i = 0, 1, \dots, n) \quad (2.78)$$

- resultar num valor finito para o fluxo J_i quando houver pelo menos uma força conjugada X_i não nula. Assim Eq. (2.77) é escrita:

$$J_i = \sum_{k=0}^n L_{ik} X_k, (i = 0, 1, \dots, n) \quad (2.79)$$

sendo o tensor dos coeficientes das diferenciais parciais L_{ik} definido por

$$L_{ik} = \frac{\partial J_i}{\partial X_k} \quad (2.80)$$

A expressão da taxa volumétrica de geração de entropia, eq.(2.72) torna-se então:

$$s_{ger}''' = \sum_{i=0}^n \sum_{k=0}^n L_{ik} X_i X_k \geq 0 \quad (2.81)$$

Tomemos, por exemplo, um sistema composto por somente dois fluxos, onde os pares conjugados de fluxos e forças são (J_0, X_0) e (J_1, X_1) . As expressões linearizadas para os dois fluxos são:

$$J_0 = L_{00} X_0 + L_{01} X_1 \quad (2.82)$$

$$J_1 = L_{10} X_0 + L_{11} X_1 \quad (2.83)$$

e a expressão da taxa local de geração de entropia:

$$s_{ger}''' = L_{00} X_0^2 + (L_{01} + L_{10}) X_0 X_1 + L_{11} X_1^2 \geq 0 \quad (2.84)$$

Vale observar que a 2a Lei da Termodinâmica está imposta pelo sinal de " \geq " na equação (2.84).

A equação (2.84) pode ser rearranjada nas seguintes formas:

$$s_{ger}''' = \left[L_{00} - \frac{(L_{01} + L_{10})^2}{4L_{11}} \right] X_0^2 + L_{11} \left(X_1 + \frac{L_{01} + L_{10}}{2L_{11}} X_0 \right)^2 \geq 0 \quad (2.85)$$

$$s_{ger}''' = \underbrace{L_{00} \left(X_0 + \frac{L_{01} + L_{10}}{2L_{00}} X_1 \right)^2}_{(A)} + \underbrace{\left[L_{11} - \frac{(L_{01} + L_{10})^2}{4L_{00}} \right] X_1^2}_{(B)} \geq 0 \quad (2.86)$$

Para satisfazer a 2a Lei da Termodinâmica, os coeficientes L_{ik} devem ser:

- Termo (A)

$$L_{00} \geq 0 \quad (2.87)$$

- Termo (B), caso L_{01} e L_{10} sejam nulos:

$$L_{11} \geq 0 \quad (2.88)$$

- Termo (B), caso L_{01} e L_{10} sejam não nulos:

$$L_{00}L_{11} \geq \left[\frac{1}{2} (L_{01} + L_{10}) \right]^2 \quad (2.89)$$

2.3.2 Fluxo de energia e Lei de Fourier

A inequação (2.87) tem implicação direta na definição da condutibilidade térmica k da Lei de Fourier. Em toda discussão neste ítem 2.3 não há escoamento da mistura e assim todo o transporte é somente devido aos efeitos moleculares. Assim, para o fluxo de energia por condução, J_U - ou J_0 aqui neste subitem -, pode-se invocar a Lei de Fourier, para um meio isotrópico :

$$J_0 = q'' = -k \frac{\partial T}{\partial x} \quad (2.90)$$

A expressão linearizada do fluxo, único, de energia é:

$$J_0 = L_{00} \frac{\partial}{\partial x} (T^{-1}) \quad (2.91)$$

Igualando-se a eq.(2.90) à eq. (2.91) conclui-se que

$$L_{00} = T^2 k \quad (2.92)$$

Assim, o coeficiente L_{00} não somente é proporcional a k , mas também tem o mesmo sinal. Como L_{00} tem que ser positivo, pela imposição da 2a Lei da Termodinâmica

na forma da eq (2.87), k também tem que ser positivo.

Discussão análoga pode ser feita para o fluxo de massa de uma espécie i , sob a influência unicamente do gradiente da concentração da mesma espécie, ou seja, quando o fluxo é expresso pela Lei de Fick. Neste caso, o coeficiente de difusão binário D_{ii} não pode ser negativo.

2.3.3 Difusão de Massa

O processo irreversível de transferência de massa para uma mistura binária e isotérmica é descrito convenientemente pela Lei de Fick. Entretanto, para misturas com mais de duas espécies e não isotérmicas, o processo de transferência de massa requer uma descrição mais detalhada.

Consideremos inicialmente um processo de transferência de massa de uma mistura binária não isotérmica, como ilustrado na figura (2.2). Os três fluxos e três forças conjugadas são:

$$J_U = L_{00} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{T} \right) + L_{01} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{-\mu_1}{T} \right) + L_{02} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{-\mu_2}{T} \right) \quad (2.93)$$

$$J_{N_1} = L_{10} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{T} \right) + L_{11} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{-\mu_1}{T} \right) + L_{12} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{-\mu_2}{T} \right) \quad (2.94)$$

$$J_{N_2} = L_{20} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{T} \right) + L_{21} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{-\mu_1}{T} \right) + L_{22} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{-\mu_2}{T} \right) \quad (2.95)$$

Se a mistura, como um todo, é estacionária em relação ao sistema de coordenadas de referência, a taxa volumétrica líquida de escoamento na partição é nula:

$$\bar{v}_1 J_{N_1} + \bar{v}_2 J_{N_2} = 0 \quad (2.96)$$

em que \bar{v}_i é o volume molar da espécie i . Os fluxos molares podem ser combinados com a eq.(2.96) de forma a eliminar-se o termo $\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{-\mu_2}{T} \right)$. Multiplicando-se as equações dos fluxos molares pelos respectivos volumes molares:

$$\bar{v}_1 J_{N_1} = \left[L_{10} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{T} \right) + L_{11} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{-\mu_1}{T} \right) + L_{12} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{-\mu_2}{T} \right) \right] \bar{v}_1 \quad (2.97)$$

$$\bar{v}_2 J_{N_2} = \left[L_{20} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{T} \right) + L_{21} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{-\mu_1}{T} \right) + L_{22} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{-\mu_2}{T} \right) \right] \bar{v}_2 \quad (2.98)$$

Somando-se as eqs. (2.97) e (2.98) e com uso da eq.(2.96), tem-se:

$$\underbrace{(\bar{v}_1 L_{10} + \bar{v}_2 L_{20})}_{A_1} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{T} \right) + \underbrace{(\bar{v}_1 L_{11} + \bar{v}_2 L_{21})}_{A_2} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{-\mu_1}{T} \right) = \underbrace{(\bar{v}_1 L_{12} + \bar{v}_2 L_{22})}_{A_3} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\mu_2}{T} \right) \quad (2.99)$$

ou ainda:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{-\mu_2}{T} \right) = \left[-\frac{A_1}{A_3} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{T} \right) - \frac{A_2}{A_3} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{-\mu_1}{T} \right) \right] \quad (2.100)$$

Assim, o dois fluxos, J_U e J_{N_1} , podem ser re-escritos em função das duas forças conjugadas independentes, $\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{T} \right)$ e $\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{-\mu_1}{T} \right)$:

$$J_U = \underbrace{\left(L_{00} - L_{02} \frac{A_1}{A_3} \right)}_{L_{00'}} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{T} \right) + \underbrace{\left(L_{01} - L_{02} \frac{A_2}{A_3} \right)}_{L_{01'}} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{-\mu_1}{T} \right) \quad (2.101)$$

$$J_{N_1} = \underbrace{\left(L_{10} - L_{12} \frac{A_1}{A_3} \right)}_{L_{10'}} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{T} \right) + \underbrace{\left(L_{11} - L_{12} \frac{A_2}{A_3} \right)}_{L_{11'}} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{-\mu_1}{T} \right) \quad (2.102)$$

ou na forma compacta:

$$J_U = L_{00'} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{T} \right) + L_{01'} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{-\mu_1}{T} \right) \quad (2.103)$$

$$J_{N_1} = L_{10'} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{T} \right) + L_{11'} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{-\mu_1}{T} \right) \quad (2.104)$$

Observe que:

- os coeficientes $L_{00'}$, $L_{01'}$, $L_{10'}$ e $L_{11'}$ são diferentes dos escritos nas equações (2.93), (2.94) e (2.95);
- neste processo de transporte de massa, somente dois dos três fluxos originais e duas das três forças conjugadas originais podem variar de forma independente. O terceiro fluxo, J_{N_2} , e a terceira força conjugada, $\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{-\mu_2}{T} \right)$, podem ser prontamente calculados com auxílio das equações (2.96) e (2.100), respectivamente.

As forças conjugadas $\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{T} \right)$ e $\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{-\mu_1}{T} \right)$ podem ser reescritas na forma de gradientes da temperatura e da fração molar. Para isso, consideremos uma mistura de gases ideais, para a qual o potencial químico da espécie 1, μ_1 só depende da temperatura T , pressão P e fração molar x_1 na forma [CITAR BEJAN]:

$$\mu_i(T, P, x_i) = \mu_i^{x_1=1}(T, P, x_i) + \bar{R}T \ln x_i \quad (2.105)$$

em que $\mu_i^{x_1=1}$ significa o valor máximo do potencial químico, que é quando a espécie é a única componente do sistema. Utilizando-se a energia livre de Gibbs molar da espécie 1, $\bar{g}_1(T, P)$, pode-se escrever o potencial químico da espécie 1 na forma:

$$\mu_1(T, P, x_1) = \bar{g}_1(T, P) + \bar{R}T \ln x_1 \quad (2.106)$$

Assumindo-se, por simplicidade, que a pressão local seja uniforme, pode-se calcular a variação do potencial químico com a distância x :

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{-\mu_1}{T} \right) = \left(\frac{\bar{g}_1}{T^2} - \frac{1}{T} \frac{\partial \bar{g}_1}{\partial T} \right) \frac{\partial T}{\partial x} - \frac{\bar{R}}{x_1} \frac{\partial x_1}{\partial x} \quad (2.107)$$

Substituindo esta equação (2.107) nas equações (2.103) e (2.104) tem-se as expressões dos fluxos em função dos gradientes de temperatura e fração molar:

$$J_U = \underbrace{\left[-\frac{L_{00'}}{T^2} - L_{01'} \left(-\frac{\bar{g}_1}{T^2} + \frac{1}{T} \frac{\partial \bar{g}_1}{\partial T} \right) \right]}_{-D_{00'}} \frac{\partial T}{\partial x} - \underbrace{L_{01'} \frac{\bar{R}}{x_1}}_{D_{01'}} \frac{\partial x_1}{\partial x} \quad (2.108)$$

$$J_{N_1} = \underbrace{\left[-\frac{L_{10'}}{T^2} - L_{11'} \left(-\frac{\bar{g}_1}{T^2} + \frac{1}{T} \frac{\partial \bar{g}_1}{\partial T} \right) \right]}_{-D_{10'}} \frac{\partial T}{\partial x} - \underbrace{L_{11'} \frac{\bar{R}}{x_1}}_{D_{11'}} \frac{\partial x_1}{\partial x} \quad (2.109)$$

então, os fluxos, de energia e massa, para uma mistura binária, não isotérmica, estacionária podem ser escritos:

$$J_U = -D_{00'} \frac{\partial T}{\partial x} - D_{01'} \frac{\partial x_1}{\partial x} \quad (2.110)$$

$$J_{N_1} = -D_{10'} \frac{\partial T}{\partial x} - D_{11'} \frac{\partial x_1}{\partial x} \quad (2.111)$$

observe que quatro coeficientes de "Difusividade", $D_{00'}$, $D_{01'}$, $D_{10'}$ e $D_{11'}$ só dependem dos coeficientes originais L_{ik} e das propriedades intensivas T e \bar{g}_1 .

Pode-se ainda escrever os fluxos e forças conjugadas em base mássica. O fluxo mássico da espécie i , J_{m1} é igual ao fluxo molar, J_{N_1} , multiplicado pela massa molar, M_i :

$$J_{m1} = M_1 J_{N_1} \quad (2.112)$$

A fração molar pode ser convertida em concentração mássica por:

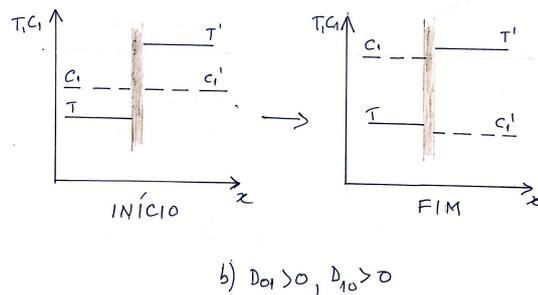
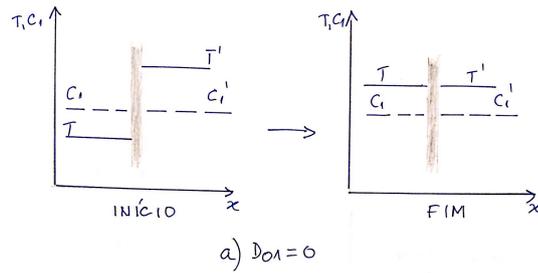
$$C_1 = \frac{M_1}{\bar{v}} x_1 \quad (2.113)$$

onde \bar{v} é o volume molar da mistura na posição x , em metro cúbico por mol da mistura. O fluxo mássico é dado em kilogramas do constituinte 1 por segundo e por metro quadrado. A concentração mássica é dada em kilogramas do constituinte 1 por metro cúbico da mistura. Substituindo-se a eq. (2.112) na eq.(2.111), a eq. (2.113) nos segundos termos das eqs. (2.110) e (2.111) e desprezando-se o termo $\frac{\partial}{\partial x} \bar{v}$, tem-se:

$$J_U = \underbrace{\left(-D_{00'} \frac{\partial T}{\partial x} \right)}_{\text{Fourier}} + \underbrace{\left(-D_{01'} \frac{\partial C_1}{\partial x} \right)}_{\text{Dufour}} \quad (2.114)$$

$$J_{m1} = \underbrace{\left(-D_{10'} \frac{\partial T}{\partial x} \right)}_{\text{Soret}} + \underbrace{\left(-D_{11'} \frac{\partial C_1}{\partial x} \right)}_{\text{Fick}} \quad (2.115)$$

Os termos associados aos coeficientes $D_{01'}$ e $D_{10'}$ são chamados de efeito Dufour e Soret respectivamente.



Estas expressões dos fluxos em base mássica, eqs. (2.114) e (2.115), permitem algumas conclusões:

- Se os efeitos Dufour e Soret puderem ser negligenciados - justificado para combustão turbulenta -, os coeficientes L_{01} , L_{02} , L_{10} , L_{12} , L_{20} e L_{21} nas equações (2.93), (2.94) e (2.95) são nulos. Neste caso, analisando-se as equações (2.101) e (2.102) verifica-se que $L_{00'} = L_{00}$; $L_{01'} = L_{10'} = 0$ e $L_{11'} = L_{11}$. Finalmente, comparando-se a eq. (2.108) com a Lei de Fourier 2.90 verifica-se que $L_{00} = kT^2$.
- Se a mistura for isotérmica, o fluxo mássico da espécie 1, J_{m1} , é somente função do gradiente de concentração, $J_{m1} = -D_{11} \frac{\partial C_1}{\partial x}$, que é a Lei de Fick. Veja que as unidades do coeficiente D_{11} são $[m^2/s]$ e que ele tem que ser positivo, uma vez que o seu homólogo, L_{11} , pela imposição da 2a. Lei, eqs. (2.88) e (2.89), tem que ser positivo.
- A 2a Lei da Termodinâmica não impõe os sinais para D_{01} e D_{10} - veja a eq. (2.89) para os coeficientes homólogos L_{01} e L_{10} . A discussão dos sinais será feita a seguir. Considere dois subsistemas, individualmente em equilíbrio, separados por uma partição diatérmica (conduz calor) e permeável. Inicialmente não há diferença de concentração entre os dois lados da partição na Figura (2.2), mas é imposta, entretanto,

uma diferença na temperatura. Lembre-se que a fronteira do sistema é adiabática, rígida e impermeável. Na figura (??) são representadas as distribuições da concentração da espécie C_1 e da temperatura nos dois lados da partição. São mostrados os estados de equilíbrio termodinâmico inicial e final para dois cenários dos coeficientes associados aos efeitos de Dufour e Soret. Se D_{01} for nulo, o efeito Fourier provocará um fluxo de energia J_U no sentido contrário ao do gradiente inicial da temperatura e o equilíbrio termodinâmico será atingido quando as temperaturas dos dois subsistemas forem iguais. Observe que o fluxo de massa entre os dois subsistemas é nulo neste processo. Se, entretanto, D_{10} for positivo, o gradiente positivo inicial da temperatura induzirá um fluxo mássico da espécie, J_{m1} , no sentido negativo e induzirá um gradiente negativo de C_1 . Se D_{01} for positivo, o gradiente negativo induzido de C_1 provocará, pelo efeito Dufour, uma parcela positiva para fluxo de energia J_U , que tenderia a aumentar o gradiente inicial da temperatura. O equilíbrio termodinâmico será atingido, neste cenário com $D_{10} > 0$ e $D_{01} > 0$, quando os fluxos de massa e energia através da partição forem simultaneamente nulos:

da eq. (2.115)

$$\frac{dC_1}{dT} = -\frac{D_{10}}{D_{11}}, (J_{m1} = 0) \quad (2.116)$$

e da eq. (2.114)

$$\frac{dC_1}{dT} = -\frac{D_{00}}{D_{01}}, (J_U = 0) \quad (2.117)$$

Isto implica que igualando-se as eqs. (2.116) e (2.117), tem-se que:

$$D_{01}D_{10} = D_{11}D_{00} \quad (2.118)$$

Observe que esta relação implica:

- esta relação, eq. 2.118, e a eq. 2.89 são satisfeitas também para coeficientes D_{01} e D_{10} negativos.

- se D_{01} for não nulo, D_{10} também o será, ou seja, se o efeito Dufour existir, o efeito Soret também existirá; caso contrário, o sistema não atingiria o equilíbrio termodinâmico;
- os coeficientes D_{01} e D_{10} têm o mesmo sinal.

Análise análoga pode ser feita para um sistema isotérmico no qual um gradiente de concentração é imposto.

2.3.4 Relações de Onsager

Da equação (2.84) da taxa local de geração de entropia para dois fluxos - J_0, J_1 -, verifica-se que a dimensão física dos coeficientes, L_{ik} , é a dimensão física da taxa de geração de entropia dividido pela dimensão física do produto de duas forças conjugadas. Assim, para um processo irreversível de dois fluxos, a dimensão física dos coeficientes é a mesma. Existem evidências experimentais que sugerem que, para fenômenos irreversíveis de dois fluxos, a magnitude dos coeficientes seja a mesma. O trabalho de Onsager CITAR REFERENCIA é a base para chamada **Relação de Reciprocidade de Onsager**:

$$L_{ik} = L_{ki} \tag{2.119}$$

Do ponto de vista macroscópico da termodinâmica clássica, esta relação é adotada como um postulado, que ainda merece suporte ou rejeição com observações físicas. Utilizando a eq. (2.119) na forma, $D_{01} = D_{10}$, a eq. (2.118) torna-se:

$$D_{01} = \sqrt{D_{11}D_{00}} \tag{2.120}$$

XXXXXXXXXXXXX

2.3.5 Difusão de Massa - Cálculo dos Coeficientes de Difusão

Precisamos agora expressões fenomenológicas ou constitutivas para o cálculo dos coeficientes de difusão. A velocidade de difusão da espécie i , $V_{k,i}$ relativa à velocidade da mistura, v_i , é obtida pela solução dos sistema de equações:

$$\nabla X_i = \sum_{j=1}^N \left[\frac{X_i X_j}{\mathbf{D}_{ij}} (\mathbf{V}_{k,i} - \mathbf{V}_{j,i}) \right] + (Y_i - X_i) \frac{\Delta P}{P} \quad k = 1, 2, \dots, N \quad (2.121)$$

XXXXXXXXXXXXX

2.4 Velocidade das espécies e velocidade da mistura

Na secção anterior foram discutidos a natureza e equacionamento dos fluxos de massa e energia devido aos efeitos moleculares numa mistura estacionária. Nestes item será formulada a velocidade absoluta da especie, que contabiliza também o efeito de uma mistura que se move em relação a um referencial estacionário. Em um sistema reativo, as espécies químicas se movem com diferentes velocidades e isto deve ser adequadamente contabilizado nos balanços de massa e energia da mistura. Assim defini-se \mathbf{v}_k como a velocidade da espécie k em relação a um sistema de coordenadas estacionário. A velocidade \mathbf{v} da mistura, ponderada pela massa específica de cada espécie, é especificada por

$$\mathbf{v} = \frac{\sum_{k=1}^N \rho_k \mathbf{V}_k}{\sum_{k=1}^N \rho_k} \quad (2.122)$$

Em base molar, a velocidade da mistura (\mathbf{v}^{mol}) é

$$\mathbf{v}^{mol} = \frac{\sum_{k=1}^N C_k \mathbf{V}_k}{\sum_{k=1}^N C_k}, \quad (2.123)$$

em que C_k é a concentração molar da espécie k .

A velocidade de difusão da espécie k , \mathbf{V}_k , é a velocidade com que a espécie se move em relação à velocidade da mistura (\mathbf{v}). Assim, em base mássica,

$$\mathbf{V}_k = \mathbf{v}_k - \mathbf{v} \quad (2.124)$$

e em base molar

$$\mathbf{V}_k^{mol} = \mathbf{v}_k - \mathbf{v}^{mol}. \quad (2.125)$$

Para a formulação das equações de balanço de massa, espécie, quantidade de movimento e energia, é necessário conhecer o fluxo dessas grandezas físicas na superfície do volume de controle. Assim, o vetor fluxo mássico (\dot{n}_k) ou molar (\dot{n}_k) da espécie k , indica a quantidade de massa (ou mols) da espécie k que cruza a superfície do volume de controle por unidade de área e de tempo. Então, em base mássica,

$$\dot{n}_k = \rho_k \mathbf{V}_k \quad (2.126)$$

e, em base molar,

$$\dot{n}_k = C_k \mathbf{v}_k. \quad (2.127)$$

O vetor fluxo mássico ($\mathbf{J}_{m,k}$) ou molar ($\mathbf{J}_{N,k}$) relativo à velocidade da mistura é

$$\mathbf{J}_{m,k} = \rho_k (\mathbf{v}_k - \mathbf{v}) = \rho_k \mathbf{V}_k \quad (2.128)$$

e

$$\mathbf{J}_{N,k} = C_k (\mathbf{v}_k - \mathbf{v}^{mol}) = C_k \mathbf{V}_k^{mol}. \quad (2.129)$$

O resultado destas definições é que o somatório dos fluxos relativos deve ser nulo, como mostrado a seguir.

Substituindo a Equação 2.126 na Equação 2.128

$$\mathbf{J}_{m,k} = \dot{m}_k - \rho_k \mathbf{v} \quad (2.130)$$

e utilizando-se a definição da velocidade ponderada da mistura (Equação 2.122) na Equação 2.130, tem-se

$$\mathbf{J}_{m,k} = \dot{m}_k - \rho_k \frac{\sum_{j=1}^N \rho_j \mathbf{v}_j}{\sum_{j=1}^N \rho_j} = \dot{m}_k - \frac{\rho_k}{\rho} \sum_{j=1}^N \rho_j \mathbf{v}_j \quad (2.131)$$

e então, com a Equações 2.4 e 2.126, tem-se

$$\mathbf{J}_{m,k} = \dot{m}_k - Y_k \sum_{j=1}^N \dot{m}_j. \quad (2.132)$$

Aplicando-se o somatório sobre todas as espécies nos dois lados da Equação 2.132, tem-se

$$\sum_{k=1}^N \mathbf{J}_{m,k} = \sum_{k=1}^N \dot{m}_k \left(1 - \underbrace{\sum_{k=1}^N Y_k}_{=1} \right) = 0, \quad (2.133)$$

$$\sum_{k=1}^N \mathbf{J}_{m,k} = 0. \quad (2.134)$$

Assim, para satisfazer a conservação da massa, imposta na definição das frações mássicas (Equação 2.2), o somatório dos fluxos calculados com a velocidade de difusão tem que ser nulo. A mesma restrição pode ser obtida para o vetor fluxo molar ($\mathbf{J}_{N,k}$).

Como ja discutido na secção anterior, o vetor fluxo mássico relativo ($\mathbf{J}_{m,k}$) da espécie k pode ser avaliado em um sistema binário, desprezando-se o efeito Soret, pela Lei de Fick como:

$$\mathbf{J}_{m,k} = -\rho D_{kl} \nabla Y_k, \quad (2.135)$$

em que D_{kl} é a difusividade mássica binária da espécie k na espécie (ou mistura) l e corresponde ao coeficiente D_{11} na eq.(2.115). Observe que os subíndices têm significados diferentes nestas duas equações. Substituindo-se a Equação 2.135 na Equação 2.130, obtém-se a expressão de fluxo mássico de k em relação a um sistema de coordenadas estacionário (Equação 2.126) por

$$\dot{m}_k = \rho_k \mathbf{v} - \rho D_{kl} \nabla Y_k. \quad (2.136)$$

A Equação 2.136 mostra que o vetor fluxo mássico da espécie k , \dot{m}_k , em relação ao sistema de coordenadas estacionário é composto de duas parcelas: o fluxo mássico de k devido ao movimento da mistura ($\rho_k \mathbf{v}$) e o fluxo mássico de k devido à difusão molecular ($\mathbf{J}_{m,k}$), superposta ao movimento da mistura.

2.5 – Equação de conservação de um parâmetro físico extensivo genérico

Neste ítem será formulada a equação de conservação para um parâmetro físico extensivo genérico X , que pode ser, por exemplo, a energia do sistema aberto (Volume de Controle, V.C.).

O valor de um parâmetro físico extensivo X num volume V **fixo** no espaço é obtido por

??? INCLUIR UMA FIGURA AQUI ????

$$X = \int_V \rho x \, dV \quad (2.137)$$

em que x é o parâmetro físico intensivo dentro do volume de controle.

A taxa de transferência de X na superfície $d\Omega$ de V é:

$$- \int_{\Omega} \Phi_x \, d\Omega \quad (2.138)$$

em que Φ_x é o fluxo de x na face do volume.

A taxa de geração ou consumo de x por unidade de tempo e volume é σ_x , de forma que a taxa de produção/consumo de x no volume de controle

$$\int_V \sigma_x \, dV \quad (2.139)$$

Assim, o balanço de X no volume de controle fixo, V , é:

$$\frac{dX}{dt} = \frac{d}{dt} \int_V \rho x \, dV = - \int_{\Omega} \Phi_x \, d\Omega + \int_V \sigma_x \, dV \quad (2.140)$$

Utilizando-se a Regra de Leibniz para diferenciação sob o sinal de integração [(??)] pode-se escrever, para volume de controle **fixo** e **indeformável**,

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho x \, dV = \int_V \frac{\partial}{\partial t} (\rho x) \, dV \quad (2.141)$$

Assim, a equação 2.140 pode ser reescrita na forma:

$$\int_V \frac{\partial}{\partial t} (\rho x) \, dV = - \int_{\Omega} \Phi_x \, d\Omega + \int_V \sigma_x \, dV \quad (2.142)$$

Aplicando-se o teorema de Gauss ao termo de fluxo na superfície:

$$\int_V \frac{\partial}{\partial t} (\rho x) \, dV = - \int_V \text{div } \Phi_x \, dV + \int_V \sigma_x \, dV$$

ou, eliminando-se a integração volumétrica,

$$\frac{\partial(\rho x)}{\partial t} = -\text{div } \Phi_x + \sigma_x \quad (2.143)$$

que é a forma diferencial do balanço do parâmetro físico extensivo X num V.C. fixo e indeformável no tempo e espaço.

2.5.1 – Velocidade baricêntrica da mistura e velocidade de difusão das espécies

A velocidade baricêntrica da mistura (\vec{v}) num sistema multicomponente ($n - n^0$ total de componentes) é definida por:

$$\rho\vec{v} \equiv \sum_{i=1}^n \rho_i v_i \quad (2.144)$$

em que \vec{v}_i é a velocidade absoluta da espécie em relação ao sistema de coordenadas fixo. A parcela do fluxo de Φ_x relativo ao fluxo da mistura, ou fluxo de difusão, \vec{J}_x , é definido por:

$$\vec{J}_x \equiv \Phi_x - \rho x \vec{v} \quad (2.145)$$

Para o balanço de X num V.C., V^* , particular por ser solidário com a velocidade do baricentro da massa (\vec{v}), o vetor fluxo Φ_x só tem a parte *Difusiva*, ou seja,

$$\Phi_x = \vec{J}_x \quad (2.146)$$

Neste volume de controle particular V^* , a massa do elemento de fluido, ρdV^* , não varia com o tempo, mas o volume não é estacionário em relação a um referencial fixo e sim em relação à velocidade da mistura. Para ressaltar isso, altera-se na eq. (2.140) a nomenclatura do termo da derivada temporal, de $\frac{d}{dt} \int_V \rho x dV$, para $\frac{D}{Dt} \int_{V^*} \rho x dV^*$. Também o termo de fluxo na superfície na eq. (2.140) deve ser alterado, pois na superfície do volume V^* só existe a parcela fluxo difusivo, eq. (2.146). Assim tem-se:

$$\frac{DX}{Dt} = \frac{D}{Dt} \int_{V^*} \rho x dV^* = - \int_{\Omega} \vec{J}_x d\Omega + \int_{V^*} \sigma_x dV^* \quad (2.147)$$

A derivada temporal pode ser re-escrita na forma de sua definição:

$$\frac{D}{Dt} \int_{V^*} \rho x dV^* = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \left(\frac{\int_{V^*} \rho x dV^*|_{t+\Delta t} - \int_{V^*} \rho x dV^*|_t}{\Delta t} \right) \quad (2.148)$$

Lembrando que uma integração no volume é uma soma de volumes elementares, pode-se escrever:

$$\frac{D}{Dt} \int_{V^*} \rho x \, dV^* = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \left[\frac{\sum(\rho x \, dV^*)_{t+\Delta t} - \sum(\rho x \, dV^*)_t}{\Delta t} \right] \quad (2.149)$$

mas $\rho \, dV^*$ não é função do tempo, pois o volume é solidário com a velocidade do baricentro da massa e então,

$$\frac{D}{Dt} \int_{V^*} \rho x \, dV^* = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \left[\frac{\rho \, dV^* (\sum(x)_{t+\Delta t} - \sum(x)_t)}{\Delta t} \right] \quad (2.150)$$

ou

$$\frac{D}{Dt} \int_{V^*} \rho x \, dV^* = \rho \, dV^* \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \left[\frac{(\sum x_{t+\Delta t} - \sum x_t)}{\Delta t} \right] \quad (2.151)$$

ou

$$\frac{D}{Dt} \int_{V^*} \rho x \, dV^* = \rho \, dV^* \underbrace{\sum \left\{ \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \left[\frac{(x_{t+\Delta t} - x_t)}{\Delta t} \right] \right\}}_{\equiv \frac{Dx}{Dt}} \quad (2.152)$$

ou

$$\frac{D}{Dt} \int_{V^*} \rho x \, dV^* = \sum \rho \, dV^* \frac{Dx}{Dt} = \int_{V^*} \rho \frac{Dx}{Dt} \, dV^* \quad (2.153)$$

e, finalmente, a equação 2.148 torna-se:

$$\frac{D}{Dt} \int_{V^*} \rho x \, dV^* = \int_{V^*} \rho \frac{Dx}{Dt} \, dV^* \quad (2.154)$$

Então, utilizando-se eq. (2.154), o balanço de X , equação (2.147), é re-escrito para um V.C. solidário com a velocidade baricêntrica da mistura:

$$\frac{D}{Dt} \int_{V^*} \rho x \, dV^* = \int_{V^*} \rho \frac{Dx}{Dt} \, dV^* = - \int_{\Omega^*} \vec{J}_x \, d\Omega^* + \int_{V^*} \sigma_x \, dV^*$$

$$\int_{V^*} \rho \frac{Dx}{Dt} \, dV^* = - \int_{\Omega^*} \vec{J}_x \, d\Omega^* + \int_{V^*} \sigma_x \, dV^* \quad (2.155)$$

Aplicando-se o teorema de Gauss ao termo da integral de superfície tem-se:

$$\int_{V^*} \rho \frac{Dx}{Dt} \, dV^* = - \int_{V^*} \text{div}(\vec{J}_x) \, dV^* + \int_{V^*} \sigma_x \, dV^* \quad (2.156)$$

Eliminando-se a integral sobre o volume V^* , tem-se a forma diferencial da equação do balanço de X para um V.C. solidário com a velocidade baricêntrica da mistura:

$$\rho \frac{Dx}{Dt} = -\text{div}(\vec{J}_x) + \sigma_x \quad (2.157)$$

Vale ressaltar que o parâmetro físico intensivo x pode ser qualquer propriedade local, como por exemplo, um escalar, a componente de um vetor ou de um tensor etc.

2.6 – Equação da continuidade ou balanço de massa

A equação do balanço de massa da mistura, na forma de velocidade baricêntrica pode ser obtida subtraindo-se a equação (2.157) da eq. (2.143), com uso da eq(2.145)

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho x)}{\partial t} - \rho \frac{Dx}{Dt} &= -\text{div}(\rho x \vec{v}) \\ \rho \frac{Dx}{Dt} &= \frac{\partial(\rho x)}{\partial t} + \text{div}(\rho x \vec{v}) \end{aligned} \quad (2.158)$$

Para a massa, o parâmetro físico intensivo é $x = 1$ e o termo $\rho \frac{Dx}{Dt} = \rho \frac{D(1)}{Dt} = 0$ e então:

$$\begin{aligned}
0 &= \frac{\partial(\rho)}{\partial t} + \text{div}(\rho\vec{v}) \\
\frac{\partial\rho}{\partial t} &= -\text{div}(\rho\vec{v})
\end{aligned} \tag{2.159}$$

que é a forma diferencial da conservação da massa para um V.C. fixo e indeformável.

2.6.1 – Relação entre derivada total $\frac{D}{Dt}$ e derivada local $\frac{\partial}{\partial t}$

Partindo da equação 2.158

$$\rho \frac{Dx}{Dt} = x \frac{\partial\rho}{\partial t} + \rho \frac{\partial x}{\partial t} + \rho\vec{v} \cdot \text{grad } x + x \text{div}(\rho\vec{v}) \tag{2.160}$$

dividindo-se por ρ ,

$$\frac{Dx}{Dt} = \frac{x}{\rho} \frac{\partial\rho}{\partial t} + \frac{\partial x}{\partial t} + \vec{v} \cdot \text{grad } x + \frac{x}{\rho} \text{div}(\rho\vec{v}) \tag{2.161}$$

$$\frac{Dx}{Dt} = \frac{\partial x}{\partial t} + \vec{v} \cdot \text{grad } x + \underbrace{\frac{x}{\rho} \left(\frac{\partial\rho}{\partial t} + \text{div}(\rho\vec{v}) \right)}_{= 0 \text{ Eq.2.159}} \tag{2.162}$$

então:

$$\frac{Dx}{Dt} = \frac{\partial x}{\partial t} + \vec{v} \cdot \text{grad } x \tag{2.163}$$

em que, $\frac{Dx}{Dt}$ é a **Derivada Total**, também chamada de Material ou Baricêntrica, que é a taxa de variação temporal do parâmetro físico intensivo x num volume que se move com a velocidade da mistura. Este volume, do ponto de vista termodinâmico, é um sistema fechado.

$\frac{\partial x}{\partial t}$ é a **Derivada Local**, que é a taxa de variação temporal do parâmetro físico intensivo x num volume fixo e indeformável. Este volume, do ponto de vista termodinâmico, é um sistema aberto.

2.6.2 Equação da continuidade na forma de volume específico

Pela equação 2.159,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\text{div}(\rho \vec{v}) = -\rho \text{div } \vec{v} - \vec{v} \cdot \text{grad } \rho \quad (2.164)$$

A equação da Derivada Total, eq.(2.163), para ρ é:

$$\frac{D\rho}{Dt} = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{v} \cdot \text{grad } \rho \quad (2.165)$$

Substituindo na equação anterior a equação (2.164) tem-se

$$\frac{D\rho}{Dt} = -\rho \text{div } \vec{v} - \vec{v} \cdot \text{grad } \rho + \vec{v} \cdot \text{grad } \rho \quad (2.166)$$

e então:

$$\frac{D\rho}{Dt} = -\rho \text{div } \vec{v} \quad (2.167)$$

Com a definição de $v \equiv \frac{1}{\rho}$ e fazendo-se:

$$\frac{D\rho v}{Dt} = \frac{D(1)}{Dt} = 0 = \rho \frac{Dv}{Dt} + v \frac{D\rho}{Dt} \Rightarrow -\frac{\rho}{v} \frac{Dv}{Dt} = \frac{D\rho}{Dt} \quad (2.168)$$

substituindo na equação 2.167:

$$-\frac{\rho}{v} \frac{Dv}{Dt} = -\rho \text{div } \vec{v} \Rightarrow \frac{1}{v} \frac{Dv}{Dt} = \text{div } \vec{v} \quad \text{ou} \quad \rho \frac{Dv}{Dt} = \text{div } \vec{v} \quad (2.169)$$

2.6.3 Hipótese dos Contínua Coexistentes Independentes

Na dedução das equações de espécies, momento e energia de sistemas multicomponentes, faz-se uso da hipótese de **Escoamento Contínuo**, que é uma extensão do conceito de **Meio Contínuo** que fundamenta as equações de transporte de sistemas monocomponente. Uma espécie K pode ser entendida como um meio contínuo, coexistente e independente das outras espécies. A soma de todos os Contínua K formam o Continuum da mistura reativa. Assim, pode-se formular as equações de conservação para cada espécie como se somente ela constituísse o sistema em estudo e somando-se as equações de conservação de todas as espécies tem-se as equações de transporte da mistura.

Uma propriedade A_K do Continuum K tem densidade volumétrica $\alpha_K(x_i, t)$. Considere um volume σ_K , delimitado pela superfície Ω_K . A quantidade da propriedade no volume num instante t é:

$$A_K(t) = \int_{\sigma_K} \alpha_K(x_i, t) d\sigma_K \quad (2.170)$$

Se, por exemplo, $\alpha_K(x_i, t) = \rho_K$, onde ρ_K é a massa específica de K , então A_K é a massa da espécie K contida no volume σ_K . Na hipótese do Contínua Coexistentes Independentes, todas as espécies ocupam o mesmo espaço e portanto a massa específica da mistura, ρ , é a soma das massas específicas das espécies:

$$\rho(x_i, t) = \sum_K \rho_K(x_i, t) \quad (2.171)$$

Define-se β_K como a quantidade de K por unidade de massa da mistura. Assim,

$$\alpha_K(x_i, t) = \rho(x_i, t) \beta_K(x_i, t) \quad (2.172)$$

A derivada temporal, $\frac{d}{dt} A_K(t)$, indica a taxa de variação temporal de A_K , no instante t , num sistema que se move com a velocidade da espécie, \vec{v}_K . Assim,

$$\frac{d}{dt}A_K(t) = \frac{d}{dt} \int_{\sigma_K(t)} \rho(x_i, t)\beta_K(x_i, t)d\sigma \quad (2.173)$$

Usando-se o Teorema do Transporte de Reynolds [CITAR REF youtube] pode-se escrever:

$$\frac{d}{dt} \int_{\sigma_K(t)} \rho(x_i, t)\beta_K(x_i, t)d\sigma = \int_{\sigma_K(t)} \frac{\partial}{\partial t} (\rho(x_i, t)\beta_K(x_i, t)) d\sigma + \int_{\sigma_K(t)} \text{div} (\rho(x_i, t)\beta_K(x_i, t)\vec{v}_K) d\sigma \quad (2.174)$$

O termo do lado esquerdo indica a taxa de variação temporal de A_K num sistema que se move com a velocidade da espécie K . O primeiro termo do lado direito da equação indica a taxa de variação temporal de A_K num volume de controle fixo no espaço. O segundo termo do lado direito indica o saldo do fluxo de A_K na superfície do volume de controle devido ao movimento da fronteira.

Com a hipótese do Continua Coexistentes Independentes, todas as espécies ocupam o mesmo volume da mistura ou volume do Continuum Multiespecies, $\sigma = \sigma_K$. Somando-se a eq.(2.174) para todos os Continua K , tem-se:

$$\frac{d}{dt} \sum_K A_K(t) = \frac{d}{dt} \sum_K \int_{\sigma(t)} \rho(x_i, t)\beta_K(x_i, t)d\sigma = \int_{\sigma(t)} \frac{\partial}{\partial t} \sum_K (\rho(x_i, t)\beta_K(x_i, t)) d\sigma + \int_{\sigma(t)} \sum_K \text{div} (\rho(x_i, t)\beta_K(x_i, t)\vec{v}_K) d\sigma \quad (2.175)$$

2.6.4 Equação de balanço de uma espécie química

Para um sistema solidário com a espécie K , a taxa de variação da massa da espécie neste sistema é igual à taxa líquida de produção/consumo da espécie devido às reações químicas. Assim, fazendo-se $\beta_K(x_i, t) = Y_K(x_i, t)$, na equação (2.173) e igualando-se à taxa líquida das reações químicas tem-se:

$$\frac{d}{dt} \int_{\sigma_K(t)} \rho(x_i, t)Y_K(x_i, t)d\sigma = \int_{\sigma_K(t)} \sum_{j=1}^r \nu_{Kj}J_j d\sigma \quad (2.176)$$

em que r é o número total de reações químicas envolvidas, ν_{Kj} é o coeficiente estequiométrico da espécie K na reação j e J_j é a taxa de produção/consumo da espécie K na reação j . Numa reação química j , a massa total do sistema se conserva e esta restrição é imposta na definição dos coeficientes estequiométricos na forma:

$$\sum_K \nu_{Kj} = 0 \quad (2.177)$$

Usando-se a eq.(2.174) para o termo do lado esquerdo tem-se:

$$\int_{\sigma_K(t)} \frac{\partial}{\partial t} (\rho(x_i, t) Y_K(x_i, t)) d\sigma + \int_{\sigma_K(t)} \text{div} (\rho(x_i, t) Y_K(x_i, t) \vec{v}_K) d\sigma = \int_{\sigma_K(t)} \sum_{j=1}^r \nu_{Kj} J_j d\sigma \quad (2.178)$$

Eliminando-se o sinal de integração volumétrica e também a indicação explícita da dependência espacial e temporal (x_i, t) dos termos, tem-se:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho Y_K) + \text{div} (\rho Y_K \vec{v}_K) = \sum_{j=1}^r \nu_{Kj} J_j \quad (2.179)$$

A velocidade da espécie em relação a um referencial fixo, \vec{v}_K , é dada por:

$$\vec{v}_K = \vec{v} + \vec{V}_K \quad (2.180)$$

em que \vec{v} é a velocidade da mistura e \vec{V}_K é a velocidade da espécie em relação à mistura. Por definição, a velocidade da mistura se relaciona com as velocidades das espécies por:

$$\vec{v} \equiv \sum_K Y_K \vec{v}_K \quad (2.181)$$

substituindo-se eq.(2.180) na eq.(2.181) tem-se

$$\sum_K \vec{v} = \sum_K Y_K (\vec{v} + \vec{V}_K) \quad (2.182)$$

$$\vec{v} = \sum_K Y_K \vec{v} + \sum_K Y_K \vec{V}_K \quad (2.183)$$

$$\vec{v} = \vec{v} \underbrace{\sum_K Y_K}_{=1, eq.(2.2)} + \sum_K Y_K \vec{V}_K \quad (2.184)$$

$$\vec{v} = \vec{v} + \sum_K Y_K \vec{V}_K \quad (2.185)$$

então

$$\sum_K Y_K \vec{V}_K = 0 \quad (2.186)$$

substituindo-se eq.(2.180) na eq.(2.179) tem-se

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho Y_K) = -div \left(\rho Y_K (\vec{v} + \vec{V}_K) \right) + \sum_{j=1}^r \nu_{Kj} J_j \quad (2.187)$$

ou

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\rho Y_K) &= -div (\rho Y_K \vec{v}) - div (\rho Y_K \vec{V}_K) + \sum_{j=1}^r \nu_{Kj} J_j \\ \frac{\partial}{\partial t} (\rho Y_K) &= -\vec{v} \cdot grad (\rho Y_K) - \rho Y_K div (\vec{v}) - div (\rho Y_K \vec{V}_K) + \sum_{j=1}^r \nu_{Kj} J_j \\ \frac{\partial}{\partial t} (\rho Y_K) + \vec{v} \cdot grad (\rho Y_K) &= -\rho Y_K div (\vec{v}) - div (\rho Y_K \vec{V}_K) + \sum_{j=1}^r \nu_{Kj} J_j \end{aligned} \quad (2.188)$$

o lado esquerdo da equação 2.188 pode ser re-escrito na forma:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\rho Y_K) + \vec{v} \cdot grad (\rho Y_K) &= \rho \frac{\partial}{\partial t} Y_K + Y_K \frac{\partial}{\partial t} \rho + \vec{v} \cdot (\rho grad Y_K + Y_K grad \rho) \\ &= \rho \underbrace{\left(\frac{\partial}{\partial t} Y_K + \vec{v} \cdot grad Y_K \right)}_{2.163} + Y_K \underbrace{\left(\frac{\partial}{\partial t} \rho + \vec{v} \cdot grad \rho \right)}_{2.165} \\ &= \rho \frac{D}{Dt} Y_K + Y_K \frac{D}{Dt} \rho \\ &= \frac{D}{Dt} \rho Y_K \end{aligned} \quad (2.189)$$

entao a eq.(2.188) torna-se:

$$\frac{D(\rho Y_K)}{Dt} + \rho Y_K \operatorname{div}(\vec{v}) + \operatorname{div}(\rho Y_K \vec{V}_K) = \sum_{j=1}^r \nu_{Kj} J_j \quad (2.190)$$

somando-se eq.(2.190) para todas as espécies usando as eq. (2.177) e eq.(2.186):

$$\sum_K \frac{D(\rho Y_K)}{Dt} + \sum_K \rho Y_K \operatorname{div}(\vec{v}) + \underbrace{\sum_K \operatorname{div}(\rho Y_K \vec{V}_K)}_{=0, \text{eq.}(2.186)} = \sum_{j=1}^r \underbrace{\sum_K \nu_{Kj}}_{=0, \text{eq.}(2.177)} J_j \quad (2.191)$$

usando ainda a eq. (2.2) tem-se,

$$\frac{D\rho}{Dt} = -\rho \operatorname{div}(\vec{v}) \quad (2.192)$$

que é a mesma eq.(2.167), aqui deduzida a partir da conservação de cada espécie.

Retomando-se a eq.(2.175), com a eq.(2.180), tem-se

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt} \sum_K \int_{\sigma(t)} \rho \beta_K d\sigma &= \int_{\sigma(t)} \left[\frac{\partial}{\partial t} \sum_K (\rho \beta_K) + \sum_K \operatorname{div} (\rho \beta_K (\vec{v} + \vec{V}_K)) \right] d\sigma \\
&= \int_{\sigma(t)} \left[\frac{\partial}{\partial t} \sum_K (\rho \beta_K) + \sum_K \operatorname{div} (\rho \beta_K \vec{v}) + \sum_K \operatorname{div} (\rho \beta_K \vec{V}_K) \right] d\sigma \\
&= \int_{\sigma(t)} \left[\frac{\partial}{\partial t} (\rho \beta) + \operatorname{div} (\rho \beta \vec{v}) + \sum_K \operatorname{div} (\rho \beta_K \vec{V}_K) \right] d\sigma \\
&= \int_{\sigma(t)} \left[\rho \frac{\partial}{\partial t} (\beta) + \beta \frac{\partial}{\partial t} (\rho) + \operatorname{div} (\rho \beta \vec{v}) + \sum_K \operatorname{div} (\rho \beta_K \vec{V}_K) \right] d\sigma \\
&= \int_{\sigma(t)} \left[\rho \frac{\partial}{\partial t} (\beta) + \beta \frac{\partial}{\partial t} (\rho) + \vec{v} \cdot \operatorname{grad} (\rho \beta) + \rho \beta \operatorname{div} (\vec{v}) + \sum_K \operatorname{div} (\rho \beta_K \vec{V}_K) \right] d\sigma \\
&= \int_{\sigma(t)} \left[\rho \frac{\partial}{\partial t} (\beta) + \beta \frac{\partial}{\partial t} (\rho) + \rho \vec{v} \cdot \operatorname{grad} (\beta) + \beta \vec{v} \cdot \operatorname{grad} (\rho) + \rho \beta \operatorname{div} (\vec{v}) + \sum_K \operatorname{div} (\rho \beta_K \vec{V}_K) \right] d\sigma \\
&= \int_{\sigma(t)} \left[\rho \left(\underbrace{\frac{\partial}{\partial t} \beta + \vec{v} \cdot \operatorname{grad} \beta}_{\substack{= \frac{D\beta}{Dt}, \text{eq. (2.163)}}} \right) + \beta \left(\underbrace{\frac{\partial}{\partial t} \rho + \vec{v} \cdot \operatorname{grad} \rho + \rho \operatorname{div} \vec{v}}_{\substack{= \frac{D\rho}{Dt}, \text{eq. (2.163)}}} \right) + \sum_K \operatorname{div} (\rho \beta_K \vec{V}_K) \right] d\sigma \\
&= \int_{\sigma(t)} \left[\rho \frac{D\beta}{Dt} + \beta \left(\underbrace{\frac{D\rho}{Dt} + \rho \operatorname{div} \vec{v}}_{=0, \text{eq. (2.192)}} \right) + \sum_K \operatorname{div} (\rho \beta_K \vec{V}_K) \right] d\sigma \\
&= \int_{\sigma(t)} \left[\rho \frac{D\beta}{Dt} + \sum_K \operatorname{div} (\rho \beta_K \vec{V}_K) \right] d\sigma \tag{2.193}
\end{aligned}$$

assim, resumindo,

$$\frac{d}{dt} \sum_K \int_{\sigma(t)} \rho \beta_K d\sigma = \int_{\sigma(t)} \left[\rho \frac{D\beta}{Dt} + \sum_K \operatorname{div} (\rho \beta_K \vec{V}_K) \right] d\sigma \tag{2.194}$$

Esta relação de transporte será utilizada nas equações de conservação de momento e energia discutidas nos itens a seguir.

2.7 Conservação da Quantidade de Movimento Linear

As equações de quantidade de movimento linear e energia apresentadas neste capítulo correspondem às utilizadas em escoamentos de fluidos Newtonianos com baixo número de Mach ($Ma < 0,3$). Porém, apesar do baixo Ma do escoamento, o fluido é modelado com massa específica variável. Esse tipo de tratamento é comumente utilizado

na modelagem de processos de combustão, nos quais a variação da massa específica tem sua origem nas reações químicas e não em variações de pressão, como acontece em escoamentos de alta velocidade ($Ma > 0,3$). Na aproximação de baixo Ma , a principal simplificação é que as flutuações de pressão só são consideradas na equação da quantidade de movimento. Na equação da energia e na equação de estado (Equação 2.9), a pressão, para um sistema aberto, é constante e é chamada pressão termodinâmica de fundo. A formalização desta aproximação é apresentada no item ?????

Para a avaliação da conservação da quantidade de momento linear de um sistema multicomponente, faz-se a hipótese de que as reações químicas não produzem/consomem quantidade de movimento do sistema. Para um elemento de fluido da espécie K , a 2ª lei de Newton, $\vec{F} = m\vec{a}$, aplicada a um sistema, solidário com a velocidade da espécie, diz que

$$\frac{d}{dt} \int_{\sigma(t)} \rho Y_K \vec{v}_K d\sigma(t) = \int_{\Omega(t)} \bar{\bar{P}}_K \cdot \vec{n} d\Omega(t) + \int_{\sigma(t)} \rho_K \vec{f}_K d\sigma(t) \quad (2.195)$$

Do ponto de vista microscópico, $\bar{\bar{P}}_K$ é o resultado de interações entre partículas próximas da fronteira do sistema, ao passo que \vec{f}_k são forças conservativas, por unidade de massa, externas de longa distância.

Aplicando-se o Teorema de Gauss para o termo das tensões superficiais tem-se:

$$\frac{d}{dt} \int_{\sigma(t)} \rho Y_K \vec{v}_K d\sigma(t) = \int_{\sigma(t)} \text{div} \bar{\bar{P}}_K d\sigma(t) + \int_{\sigma(t)} \rho_K \vec{f}_K d\sigma(t) \quad (2.196)$$

somando-se para todos os Continua K , tem-se a equação de momento linear da mistura:

$$\sum_K \frac{d}{dt} \int_{\sigma(t)} \rho Y_K \vec{v}_K d\sigma(t) = \sum_K \int_{\sigma(t)} \text{div} \bar{\bar{P}}_K d\sigma(t) + \sum_K \int_{\sigma(t)} \rho_K \vec{f}_K d\sigma(t) \quad (2.197)$$

ou

$$\frac{d}{dt} \int_{\sigma(t)} \sum_K \rho Y_K \vec{v}_K d\sigma(t) = \int_{\sigma(t)} \sum_K \left[\text{div} \bar{\bar{P}}_K + \rho_K \vec{f}_K \right] d\sigma(t) \quad (2.198)$$

fazendo-se

$$\beta_K = Y_K \vec{v}_K$$

$$\beta = \sum_K \beta_K = \sum_K Y_K \vec{v}_K = \vec{v} \quad (2.199)$$

com a relação de transporte da eq.(2.194)

$$\int_{\sigma(t)} \left[\rho \frac{D\vec{v}}{Dt} + \underbrace{\operatorname{div} \sum_K (\rho Y_K \vec{v}_K \vec{V}_K)}_A \right] d\sigma = \int_{\sigma(t)} \sum_K \left[\operatorname{div} \bar{P}_K + \rho_K \vec{f}_K \right] d\sigma(t) \quad (2.200)$$

o termo A pode ser reescrito na forma:

$$\operatorname{div} \sum_K (\rho Y_K \vec{v}_K \vec{V}_K) = \operatorname{div} \sum_K (\rho Y_K (\vec{v} + \vec{V}_K) \vec{V}_K) \quad (2.201)$$

$$= \operatorname{div} \rho \left(\underbrace{\vec{v} \sum_K Y_K \vec{V}_K}_{=0, \text{eq. (2.186)}} + \sum_K Y_K \vec{V}_K \vec{V}_K \right) \quad (2.202)$$

$$= \operatorname{div} \rho \left(\sum_K Y_K \vec{V}_K \vec{V}_K \right) \quad (2.203)$$

então a eq.(2.200) torna-se:

$$\int_{\sigma(t)} \left[\rho \frac{D\vec{v}}{Dt} + \operatorname{div} \rho \left(\sum_K Y_K \vec{V}_K \vec{V}_K \right) \right] d\sigma = \int_{\sigma(t)} \sum_K \left[\operatorname{div} \bar{P}_K + \rho_K \vec{f}_K \right] d\sigma(t) \quad (2.204)$$

definindo-se

$$\bar{P}^D \equiv -\rho \left(\sum_K Y_K \vec{V}_K \vec{V}_K \right) \quad (2.205)$$

e reescrevendo-se o termo da força de corpo \vec{f}_K com uso da eq.(2.5),

$$\sum_K \rho_K \vec{f}_K = \rho \underbrace{\sum_K Y_K \vec{f}_K}_{\equiv \vec{f}} = \rho \vec{f} \quad (2.206)$$

Eliminando-se a integração sobre o volume arbitrário, $\sigma(t)$, a eq.(2.204) torna-se

$$\rho \frac{D\vec{v}}{Dt} - \text{div} \left(\bar{\bar{P}}^D \right) = \sum_K \left[\text{div} \bar{\bar{P}}_K \right] + \rho \vec{f} \quad (2.207)$$

ou ainda:

$$\rho \frac{D\vec{v}}{Dt} = \text{div} \left[\underbrace{\sum_K \bar{\bar{P}}_K + \bar{\bar{P}}^D}_{\equiv \bar{\bar{P}}} \right] + \rho \vec{f} \quad (2.208)$$

Assim, $\bar{\bar{P}}$ é o tensor das tensões superficiais que atuam nas faces de um volume de controle solidário com a velocidade da mistura. Novamente com base na hipótese dos Contínua Coexistentes Independentes, pode-se relacionar o tensor das tensões da mistura com o das espécies na forma:

$$\bar{\bar{P}} = \sum_K \bar{\bar{P}}_K^* \quad (2.209)$$

e então:

$$\sum_K \bar{\bar{P}}_K^* = \sum_K \bar{\bar{P}}_K + \bar{\bar{P}}^D \quad (2.210)$$

O tensor das tensões superficiais pode ser decomposto num termo da pressão termodinâmica local, um termo das tensões viscosas e um termo viscoso-difusivo na forma:

$$P_{K,ij}^* \equiv -p_K \delta_{ij} + \tau_{K,ij}^V + \tau_{K,ij}^D \quad (2.211)$$

em que

$$p_K \equiv -\frac{1}{3} P_{K,ii}^* \quad (2.212)$$

Também o tensor das tensões superficiais da mistura pode ser decomposto na forma:

$$P_{ij} \equiv -p \delta_{ij} + \tau_{,ij}^V + \tau_{,ij}^D \quad (2.213)$$

em que

$$p \equiv -\frac{1}{3} P_{ii} \quad (2.214)$$

fazendo-se o somatório para todas as espécies na eq. (2.211) tem-se:

$$\sum_K P_{K,ij}^* \equiv -\sum_K p_K \delta_{ij} + \sum_K \tau_{K,ij}^V + \sum_K \tau_{K,ij}^D \quad (2.215)$$

mas pela eq.(2.7)

$$\sum_K P_{K,ij}^* = -p \delta_{ij} + \sum_K \tau_{K,ij}^V + \sum_K \tau_{K,ij}^D \quad (2.216)$$

usando a eq.(2.209) para igualar a eq.(2.213) à eq.(2.216), tem-se:

$$\tau_{ij}^V = \sum_K \tau_{K,ij}^V \quad (2.217)$$

$$\tau_{ij}^D = \sum_K \tau_{K,ij}^D \quad (2.218)$$

Assim, a equação da quantidade de movimento linear é escrita

$$\rho \frac{D\vec{v}}{Dt} = \text{div} [\bar{\tau}^V + \bar{\tau}^D] - \text{grad } p + \rho \vec{f} \quad (2.219)$$

ou usando a eq.(2.158)

$$\frac{\partial(\rho\vec{v})}{\partial t} + \text{div}(\rho\vec{v}\vec{v}) = \text{div} [\bar{\tau}^V + \bar{\tau}^D] - \text{grad } p + \rho \vec{f} \quad (2.220)$$

ou em notação indicial, lembrando que os tensores viscoso e viscoso-difusivo são, por hipótese, simétricos (moléculas esféricas ou em densidade muito baixa REFERENCIA???):

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho v_i) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho v_j v_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} (\tau_{ji}^V + \tau_{ji}^D) - \frac{\partial p}{\partial x_i} + \rho f_i \quad (2.221)$$

2.7.1 Equação da energia cinética específica

xxxx

A equação da energia cinética específica de uma espécie K é demonstrada a seguir.

Partindo-se da eq.(2.197), re-escrita em notação indicial para a componente da velocidade, $v_{K,i}$ tem-se

$$\sum_K \frac{d}{dt} \int_{\sigma(t)} \rho Y_K v_{K,i} d\sigma(t) = \sum_K \int_{\sigma(t)} \frac{\partial}{\partial x_j} (P_{K,ji}) d\sigma(t) + \sum_K \int_{\sigma(t)} \rho_K f_{K,i} d\sigma(t) \quad (2.222)$$

multiplicando por $v_{K,i}$:

$$\sum_K \left(\frac{1}{2} \right) (2) v_{K,i} \frac{d}{dt} \int_{\sigma(t)} \rho Y_K v_{K,i} d\sigma(t) = \sum_K \int_{\sigma(t)} v_{K,i} \frac{\partial}{\partial x_j} (P_{K,ji}) d\sigma(t) + \sum_K \int_{\sigma(t)} v_{K,i} \rho_K f_{K,i} d\sigma(t) \quad (2.223)$$

$$\sum_K \frac{d}{dt} \int_{\sigma(t)} \rho \underbrace{\frac{1}{2} Y_K v_{K,i} v_{K,i}}_{\beta_K} d\sigma(t) = \sum_K \int_{\sigma(t)} v_{K,i} \frac{\partial}{\partial x_j} (P_{K,ji}) d\sigma(t) + \sum_K \int_{\sigma(t)} v_{K,i} \rho_K f_{K,i} d\sigma(t)$$

(2.224)

o termo β_K pode ser re-escrito na forma:

$$\begin{aligned}
\beta &= \frac{1}{2} \sum_K \beta_K = \frac{1}{2} \sum_K Y_K (v_i + V_{K,i})(v_i + V_{K,i}) \\
&= \frac{1}{2} \left(\sum_K Y_K v_i v_i + 2 \sum_K Y_K v_i V_{K,i} + \sum_K Y_K V_{K,i} V_{K,i} \right) \\
&= \frac{1}{2} \left(\underbrace{\sum_K Y_K v_i v_i}_{=1,eq.(2.2)} + 2 \underbrace{\sum_K Y_K V_{K,i} v_i}_{=0,eq.(2.186)} + \sum_K Y_K V_{K,i} V_{K,i} \right) \\
&= \frac{1}{2} \left(v_i v_i + \sum_K Y_K V_{K,i} V_{K,i} \right)
\end{aligned} \tag{2.225}$$

Usando a eq.(2.194) no lado esquerdo da eq.(2.224)

$$\int_{\sigma(t)} \left[\rho \frac{D\beta}{Dt} + \sum_K \text{div} \left(\rho \beta_K \vec{V}_K \right) \right] d\sigma = \sum_K \int_{\sigma(t)} v_{K,i} \frac{\partial}{\partial x_j} (P_{K,ji}) d\sigma(t) + \sum_K \int_{\sigma(t)} v_{K,i} \rho_K f_{K,i} d\sigma(t) \tag{2.226}$$

e com a eq.(2.225), tem-se:

$$\begin{aligned}
\int_{\sigma(t)} \left[\rho \frac{D}{Dt} \left(\frac{1}{2} v_i v_i \right) + \rho \frac{1}{2} \frac{D}{Dt} \left(\sum_K Y_K V_{K,i} V_{K,i} \right) + \sum_K \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho \frac{1}{2} Y_K v_{K,i} v_{K,i} V_{K,j} \right) \right] d\sigma = \\
\sum_K \int_{\sigma(t)} v_{K,i} \frac{\partial}{\partial x_j} (P_{K,ji}) d\sigma(t) + \sum_K \int_{\sigma(t)} v_{K,i} \rho_K f_{K,i} d\sigma(t) \tag{2.227}
\end{aligned}$$

eliminando-se a integração sobre o volume $\sigma(t)$ tem-se :

$$\begin{aligned}
\rho \frac{D}{Dt} \left(\frac{1}{2} v_i v_i \right) + \rho \frac{1}{2} \frac{D}{Dt} \left(\sum_K Y_K V_{K,i} V_{K,i} \right) + \underbrace{\sum_K \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho \frac{1}{2} Y_K v_{K,i} v_{K,i} V_{K,j} \right)}_A = \\
\underbrace{\sum_K v_{K,i} \frac{\partial}{\partial x_j} (P_{K,ji})}_B + \underbrace{\sum_K v_{K,i} \rho_K f_{K,i}}_C \quad (2.228)
\end{aligned}$$

termo A:

$$\begin{aligned}
\sum_K \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho \frac{1}{2} Y_K v_{K,i} v_{K,i} V_{K,j} \right) &= \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\sum_K \rho Y_K (v_i + V_{K,i}) (v_i + V_{K,i}) V_{K,j} \right) \\
&= \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x_j} \rho \left(\underbrace{v_i v_i \sum_K Y_K V_{K,i}}_{0, \text{eq. (2.186)} + 2 \sum_K Y_K V_{K,i} v_i V_{K,j} + \sum_K Y_K V_{K,i} V_{K,i} V_{K,j}} \right) \\
&= \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x_j} \rho \left(2 \sum_K Y_K V_{K,i} v_i V_{K,j} + \sum_K Y_K V_{K,i} V_{K,i} V_{K,j} \right) \\
&= \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x_j} \rho \left(2 \sum_K Y_K V_{K,i} (v_{K,i} - V_{K,i}) V_{K,j} + \sum_K Y_K V_{K,i} V_{K,i} V_{K,j} \right) \\
&= -\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x_j} \rho \left(\sum_K Y_K V_{K,i} V_{K,i} V_{K,j} - 2 \sum_K Y_K V_{K,i} V_{K,j} (v_i + V_{K,i}) \right) \\
&= -\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho \sum_K Y_K V_{K,i} V_{K,i} V_{K,j} \right) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\underbrace{\rho \sum_K Y_K V_{K,i} V_{K,j} (v_i + V_{K,i})}_{=-\tau_{ji}^D, \text{eq. (2.218)}} \right) \\
&= -\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho \sum_K Y_K V_{K,i} V_{K,i} V_{K,j} \right) - \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\tau_{ji}^D v_i + \sum_K \tau_{K,ji}^D V_{K,i} \right) \quad (2.229)
\end{aligned}$$

termo B :

$$\sum_K v_{K,i} \frac{\partial}{\partial x_j} (P_{K,ji}) = \sum_K \frac{\partial}{\partial x_j} (v_{K,i} P_{K,ji}) - \sum_K P_{K,ji} \frac{\partial}{\partial x_j} (v_{K,i}) \quad (2.230)$$

termo C , com eq.(2.4),

$$\begin{aligned}
\sum_K v_{K,i} \rho_K f_{K,i} &= \rho \sum_K v_{K,i} Y_K f_{K,i} \\
&= \rho \sum_K (v_i + V_{K,i}) Y_K f_{K,i} \\
&= \rho v_i f_i + \rho \sum_K V_{K,i} Y_K f_{K,i}
\end{aligned} \tag{2.231}$$

então a eq.(2.228) torna-se:

$$\begin{aligned}
&\rho \frac{D}{Dt} \left(\frac{1}{2} v_i v_i \right) + \rho \frac{1}{2} \frac{D}{Dt} \left(\sum_K Y_K V_{K,i} V_{K,i} \right) = \\
&\quad \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho \sum_K Y_K V_{K,i} V_{K,i} V_{K,j} \right) \\
&\quad + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\tau_{ji}^D v_i + \sum_K \tau_{ji}^D V_{K,i} \right) \\
&+ \underbrace{\sum_K \frac{\partial}{\partial x_j} (v_{K,i} P_{K,ji}) - \sum_K P_{K,ji} \frac{\partial}{\partial x_j} (v_{K,i})}_{A} + \rho v_i f_i + \rho \sum_K V_{K,i} Y_K f_{K,i}
\end{aligned} \tag{2.232}$$

2.7.2 Equação da energia potencial específica da mistura

Vamos agora formular a equação da energia potencial específica da mistura. Para isso, vamos discutir o conceito de forças conservativas. Forças conservativas podem ser derivadas de um potencial ψ_k independente do tempo. Assim:

$$\vec{f}_k = -grad \psi_k \tag{2.233}$$

e

$$\frac{\partial \psi_k}{\partial t} = 0 \tag{2.234}$$

Para uma força conservativa, o trabalho não depende do caminho e por isso pode ser associado a um potencial. Por exemplo, para a força da gravidade específica que atua na espécie K , $\vec{f}_K = \vec{g}$, o trabalho específico entre duas cotas z_1 e z_2 , como na figura 2.3,

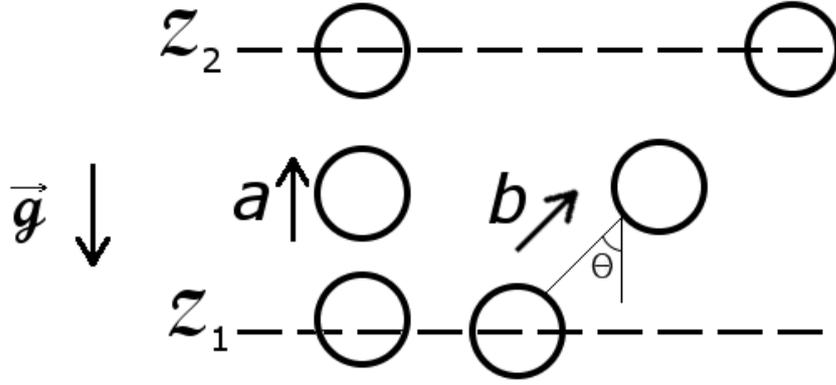


Figura 2.3 – Massa se deslocando num campo potencial associado a uma força conservativa - a força da gravidade

é $w = \int_{z_1}^{z_2} \vec{g} \cdot d\vec{l} = g \int_{z_1}^{z_2} \underbrace{dl \cos(\theta)}_{dz} = g \int_{z_1}^{z_2} dz = g(z_2 - z_1)$, que independe do caminho a ou b . Isto ocorre com o trabalho de toda força que tem a direção de atuação invariável em relação à direção do deslocamento.

Partindo-se da eq.(2.188) multiplicada por ψ_K tem-se

$$\psi_K \frac{\partial}{\partial t} (\rho Y_K) + \psi_K \vec{v} \cdot \text{grad} (\rho Y_K) = -\psi_K \rho Y_K \text{div} (\vec{v}) - \psi_K \text{div} (\rho Y_K \vec{V}_K) + \psi_K \sum_{j=1}^r \nu_{Kj} J_j \quad (2.235)$$

lembrando que $\psi_K \neq \psi_K(t)$ pode-se re-escrever na forma:

$$\begin{aligned} \underbrace{\frac{\partial}{\partial t} (\rho Y_K \psi_K) + \vec{v} \cdot \text{grad} (\rho Y_K \psi_K)}_{= \frac{D}{Dt} (\rho Y_K \psi_K), \text{eq. (2.163)}} - \underbrace{\vec{v} \cdot (\rho Y_K) \text{grad} (\psi_K)}_{- \rho Y_K \vec{v} \cdot \vec{f}_K, \text{eq. (2.233)}} + \psi_K \rho Y_K \text{div} (\vec{v}) + \psi_K \text{div} (\rho Y_K \vec{V}_K) &= \psi_K \sum_{j=1}^r \nu_{Kj} J_j \\ \frac{D}{Dt} (\rho Y_K \psi_K) + \rho Y_K \vec{v} \cdot \vec{f}_K + \psi_K \rho Y_K \text{div} (\vec{v}) + \underbrace{\psi_K \text{div} (\rho Y_K \vec{V}_K)}_{\text{div} (\rho Y_K \psi_K \vec{V}_K) - \underbrace{\rho Y_K \vec{V}_K \cdot \text{grad} \psi_K}_{- \rho Y_K \vec{V}_K \cdot \vec{f}_K, \text{eq. (2.233)}}} &= \psi_K \sum_{j=1}^r \nu_{Kj} J_j \\ \frac{D}{Dt} (\rho Y_K \psi_K) + \rho Y_K \vec{v} \cdot \vec{f}_K + \psi_K \rho Y_K \text{div} (\vec{v}) + \text{div} (\rho Y_K \psi_K \vec{V}_K) + \rho Y_K \vec{V}_K \cdot \vec{f}_K &= \psi_K \sum_{j=1}^r \nu_{Kj} J_j \quad (2.236) \end{aligned}$$

fazendo-se o somatório para todas as espécies, lembrando que $\rho \psi \equiv \sum_k \rho_k \psi_k$,

tem-se:

$$\begin{aligned}
\frac{D}{Dt}(\rho\psi) + \rho\vec{v} \cdot \vec{f} + \psi\rho\operatorname{div}(\vec{v}) + \operatorname{div}\left(\sum_K \rho Y_K \psi_K \vec{V}_K\right) + \sum_K \rho Y_K \vec{V}_K \cdot \vec{f}_K &= \sum_K \psi_K \sum_{j=1}^r \nu_{Kj} J_j \\
\rho \frac{D}{Dt}\psi + \psi \frac{D}{Dt}\rho + \psi\rho\operatorname{div}(\vec{v}) + \rho\vec{v} \cdot \vec{f} + \operatorname{div}\left(\sum_K \rho Y_K \psi_K \vec{V}_K\right) + \sum_K \rho Y_K \vec{V}_K \cdot \vec{f}_K &= \sum_K \psi_K \sum_{j=1}^r \nu_{Kj} J_j \\
\rho \frac{D}{Dt}\psi + \psi \underbrace{\left(\frac{D}{Dt}\rho + \rho\operatorname{div}(\vec{v})\right)}_{=0, \text{eq.(2.167)}} + \rho\vec{v} \cdot \vec{f} + \operatorname{div}\left(\sum_K \rho Y_K \psi_K \vec{V}_K\right) + \sum_K \rho Y_K \vec{V}_K \cdot \vec{f}_K &= \sum_K \psi_K \sum_{j=1}^r \nu_{Kj} J_j \quad (2.237)
\end{aligned}$$

Pode-se mostrar que o termo $\sum_K \psi_K \sum_{j=1}^r \nu_{Kj} J_j$ é nulo. Assim como a massa do sistema se conserva numa reação química, assim também a energia potencial total se conserva, $\sum_k \psi_k \nu_{kj} = 0$. Integrando-se o potencial, eq.(2.233) para a força da gravidade específica entre as cotas $z = 0$ e $z = z$ e entre os potenciais $\psi_k = 0$ e $\psi_k = \psi_k$ tem-se:

$$\int_0^z g \, dz = - \int_0^{\psi_k} d\psi_k \Rightarrow gz = -\psi_k \quad (2.238)$$

então

$$\begin{aligned}
\sum_k \psi_k \nu_{kj} &= - \sum_k gz \nu_{kj} = -gz \underbrace{\sum_k \nu_{kj}}_{\text{pela eq.(2.177)} = 0} = 0 \\
\sum_k \psi_k \nu_{kj} &= 0 \quad (2.239)
\end{aligned}$$

$$\text{Assim, o termo } \sum_K \psi_K \sum_{j=1}^r \nu_{Kj} J_j = \sum_{j=1}^r J_j \underbrace{\sum_K \psi_K \nu_{Kj}}_{=0, \text{eq.(2.239)}} = 0$$

A eq.(2.237) torna-se, então:

$$\rho \frac{D}{Dt}\psi + \operatorname{div}\left(\sum_K \rho Y_K \psi_K \vec{V}_K\right) = -\rho\vec{v} \cdot \vec{f} - \sum_K \rho Y_K \vec{V}_K \cdot \vec{f}_K \quad (2.240)$$

somando-se a equação da energia cinética específica 2.232 e a equação da energia potencial específica 2.240 tem-se:

$$\begin{aligned}
\rho \frac{D}{Dt} \left(\frac{1}{2} v_i v_i + \psi \right) + \rho \frac{1}{2} \frac{D}{Dt} \left(\sum_K Y_K V_{K,i} V_{K,i} \right) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho \sum_K Y_K \psi_K V_{K,j} \right) = \\
\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho \sum_K Y_K V_{K,i} V_{K,i} V_{K,j} \right) \\
+ \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\tau_{ji}^D v_i + \sum_K \tau_{ji}^D V_{K,i} \right) \\
+ \sum_K \frac{\partial}{\partial x_j} (v_{K,i} P_{K,ji}) - \sum_K P_{K,ji} \frac{\partial}{\partial x_j} (v_{K,i}) \\
+ \rho v_i f_i - \rho v_i f_i + \rho \sum_K V_{K,i} Y_K f_{K,i} - \rho \sum_K V_{K,i} Y_K f_{K,i}
\end{aligned} \tag{2.241}$$

então:

$$\begin{aligned}
\rho \frac{D}{Dt} \left(\frac{1}{2} v_i v_i + \psi \right) + \rho \frac{1}{2} \frac{D}{Dt} \left(\sum_K Y_K V_{K,i} V_{K,i} \right) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho \sum_K Y_K \psi_K V_{K,j} \right) = \\
\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho \sum_K Y_K V_{K,i} V_{K,i} V_{K,j} \right) \\
+ \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\tau_{ji}^D v_i + \sum_K \tau_{ji}^D V_{K,i} \right) \\
+ \underbrace{\sum_K \frac{\partial}{\partial x_j} (v_{K,i} P_{K,ji}) - \sum_K P_{K,ji} \frac{\partial}{\partial x_j} (v_{K,i})}_A
\end{aligned} \tag{2.242}$$

Nesta eq.(2.242) duas observações merecem destaque: 1) o trabalho da força de corpo conservativa gravitacional desaparece. Este trabalho fica armazenado na forma da energia potencial específica da mistura; 2) A soma das energias cinética e potencial não se conserva, pois há os termos fontes/sumidouros. O termo A contabiliza a parcela do trabalho das forças de superfície, que foi convertido em energia cinética ou potencial.

2.8 Conservação da Energia

A 1ª lei da termodinâmica aplicada ao sistema solidário com a massa da espécie diz que:

$$\frac{d}{dt} \int_{\sigma} \rho Y_K e_{t,K} d\sigma = \int_{\Omega} (-\vec{J}_{U,K} + \bar{\bar{P}}_K \cdot \vec{v}_K) \cdot \vec{n} d\Omega \quad (2.243)$$

$e_{t,K}$: energia total específica da espécie K , definida como $e_{t,K} \equiv \frac{\bar{v}_K^2}{2} + \psi_K + u_K$.

$\frac{\bar{v}_K^2}{2}$: energia cinética específica da espécie K .

ψ_K : energia potencial específica (associada a forças conservativas) da espécie K .

u_K : energia interna específica da espécie K .

$\vec{J}_{U,K}$: Vetor fluxo difusivo de energia interna da espécie K , discutido no item ?????.

$\bar{\bar{P}}_K$: Tensor das tensões que atuam na superfície do sistema solidário com a espécie K .

As equações para as parcelas cinética, eq.(2.232), e potencial, eq.(2.240), assim como para a soma destas duas parcelas, eq.(2.242), já foram deduzidas.

Para a energia total específica da espécie $e_{t,k}$, aplica-se novamente a relação da eq.(2.194), para expressar a taxa de variação temporal num volume de controle fixo e indeformável. Fazendo-se $\beta_K = e_{t,K} Y_K$; $\beta = \sum_K \beta_{t,K}$ e como $e_t = \sum_K e_{t,K} Y_K$, então $\beta = e_t$, tem-se:

$$\frac{d}{dt} \sum_K \int_{\sigma(t)} \rho Y_K e_{t,K} d\sigma = \int_{\sigma(t)} \left[\rho \frac{De_t}{Dt} + \sum_K \text{div} \left(\rho Y_K e_{t,K} \vec{V}_K \right) \right] d\sigma \quad (2.244)$$

então a 1ª lei da termodinâmica, eq.(2.243), para a mistura torna-se:

$$\frac{d}{dt} \sum_K \int_{\sigma(t)} \rho Y_K e_{t,K} d\sigma = \int_{\sigma(t)} \left[\rho \frac{De_t}{Dt} + \sum_K \text{div} \left(\rho Y_K e_{t,K} \vec{V}_K \right) \right] d\sigma = \int_{\Omega} \sum_K (-\vec{J}_{U,K} + \bar{\bar{P}}_K \cdot \vec{v}_K) \cdot \vec{n} d\Omega$$

(2.245)

aplicando-se o Teorema de Gauss para a integral de superfície e eliminando-se a integração sobre o volume arbitrário σ tem-se:

$$\rho \frac{De_t}{Dt} + \sum_K \operatorname{div} \left(\rho Y_K e_{t,K} \vec{V}_K \right) = \operatorname{div} \sum_K \left(-\vec{J}_{U,K} + \bar{P}_K \cdot \vec{v}_K \right) \quad (2.246)$$

ou

$$\begin{aligned} & \rho \frac{D}{Dt} \left(u + \psi + \sum_K Y_K \frac{\vec{v}_K^2}{2} \right) + \sum_K \operatorname{div} \left(\rho Y_K (u_K + \psi_K + \frac{\vec{v}_K^2}{2}) \vec{V}_K \right) = \operatorname{div} \sum_K \left(-\vec{J}_{U,K} + \bar{P}_K \right) \\ \rho \frac{D}{Dt} (u + \psi) + \rho \frac{D}{Dt} \left(\sum_K Y_K \frac{\vec{v}_K^2}{2} \right) + \sum_K \operatorname{div} \left(\rho Y_K (u_K + \psi_K) \vec{V}_K \right) + \sum_K \operatorname{div} \left(\rho Y_K \left(\frac{\vec{v}_K^2}{2} \right) \vec{V}_K \right) &= \operatorname{div} \sum_K \left(-\vec{J}_{U,K} + \bar{P}_K \right) \end{aligned}$$

mas pela definição de entalpia da espécie e da mistura,

$$\begin{aligned} h_K &= u_K + p_K v_K \\ Y_K h_K &= Y_K u_K + Y_K p_K v_K \\ \sum_K Y_K h_K &= \sum_K Y_K u_K + \sum_K Y_K p_K v_K \\ \sum_K Y_K u_K &= \sum_K Y_K h_K - \sum_K Y_K p_K v_K \\ \sum_K Y_K u_K &= \sum_K Y_K h_K - \sum_K p_K \underbrace{\frac{Y_K}{\rho_K}}_{= \frac{1}{\rho}, \text{eq. (2.4)}} \\ &= \sum_K Y_K h_K - \sum_K \frac{p_K}{\rho} \end{aligned} \quad (2.248)$$

pode-se rescrever a eq.(2.247) como:

$$\begin{aligned} & \rho \frac{D}{Dt} (u + \psi) + \rho \frac{D}{Dt} \left(\sum_K Y_K \frac{\vec{v}_K^2}{2} \right) + \sum_K \operatorname{div} \left(\rho Y_K (h_K + \psi_K) \vec{V}_K \right) + \sum_K \operatorname{div} \left(\rho Y_K \left(\frac{\vec{v}_K^2}{2} \right) \vec{V}_K \right) = \operatorname{div} \sum_K \left(-\vec{J}_{U,K} + \bar{P}_K \cdot \vec{v}_K \right) + \sum_K \operatorname{div} (p_K \vec{V}_K) \\ \rho \frac{D}{Dt} (u + \psi) + \underbrace{\rho \frac{D}{Dt} \left(\sum_K Y_K \frac{\vec{v}_K^2}{2} \right)}_A + \sum_K \operatorname{div} \left(\rho Y_K (h_K + \psi_K) \vec{V}_K \right) + \underbrace{\sum_K \operatorname{div} \left(\rho Y_K \left(\frac{\vec{v}_K^2}{2} \right) \vec{V}_K \right)}_B &= \underbrace{\operatorname{div} \sum_K \left(-\vec{J}_{U,K} + \bar{P}_K \cdot \vec{v}_K \right)}_C + \sum_K \operatorname{div} (p_K (\vec{v}_K - \vec{v})) \end{aligned} \quad (2.249)$$

o termo A pode ser re-escrito como:

$$\begin{aligned}
& \rho \frac{D}{Dt} \left(\sum_K Y_K \frac{\vec{v}_K^2}{2} \right) = \frac{1}{2} \rho \frac{D}{Dt} \left(\sum_K Y_K \vec{v}_K \vec{v}_K \right) \\
& = \frac{1}{2} \rho \frac{D}{Dt} \left(\sum_K Y_K (\vec{v} + \vec{V}_K) (\vec{v} + \vec{V}_K) \right) \\
& = \frac{1}{2} \rho \frac{D}{Dt} \left(\underbrace{\sum_K Y_K \vec{v} \vec{v}}_{=1,eq.(2.2)} + 2 \underbrace{\sum_K Y_K \vec{V}_K \vec{v}}_{=0,eq.(2.186)} + \sum_K Y_K \vec{V}_K \vec{V}_K \right) \\
& = \frac{1}{2} \rho \frac{D}{Dt} \left(\vec{v} \vec{v} + \sum_K Y_K \vec{V}_K \vec{V}_K \right) \tag{2.250}
\end{aligned}$$

o termo B pode ser re-escrito como:

$$\begin{aligned}
& \sum_K \operatorname{div} \left(\rho Y_K \left(\frac{\vec{v}_K^2}{2} \right) \vec{V}_K \right) = \frac{1}{2} \sum_K \operatorname{div} \left(\rho Y_K (\vec{v}_K \vec{v}_K) \vec{V}_K \right) \\
& = \frac{1}{2} \sum_K \operatorname{div} \left(\rho Y_K (\vec{v} + \vec{V}_K) (\vec{v} + \vec{V}_K) \vec{V}_K \right) \\
& = \frac{1}{2} \operatorname{div} \rho \left(\underbrace{\sum_K Y_K \vec{V}_K \vec{v} \vec{v}}_{=0,eq.(2.186)} + 2 \sum_K Y_K \vec{V}_K \vec{V}_K \vec{v} + \sum_K Y_K \vec{V}_K \vec{V}_K \vec{V}_K \right) \\
& = \frac{1}{2} \operatorname{div} \rho \left(2 \sum_K Y_K \vec{V}_K \vec{V}_K \vec{v} + \sum_K Y_K \vec{V}_K \vec{V}_K \vec{V}_K \right) \\
& = \operatorname{div} \rho \left(\sum_K Y_K \vec{V}_K \vec{V}_K \vec{v} \right) + \frac{1}{2} \operatorname{div} \rho \left(\sum_K Y_K \vec{V}_K \vec{V}_K \vec{V}_K \right) \\
& = \operatorname{div} \rho \left(\sum_K Y_K \vec{V}_K \vec{V}_K \vec{v} \right) + \frac{1}{2} \operatorname{div} \rho \left(\sum_K Y_K \vec{V}_K \vec{V}_K \vec{V}_K \right) - \frac{1}{2} \operatorname{div} \rho \left(\sum_K Y_K \vec{V}_K \vec{V}_K \vec{V}_K \right) \\
& = \operatorname{div} \rho \left(\sum_K Y_K \vec{V}_K \vec{V}_K \vec{v} \right) + \operatorname{div} \rho \left(\sum_K Y_K \vec{V}_K \vec{V}_K \vec{V}_K \right) - \frac{1}{2} \operatorname{div} \rho \left(\sum_K Y_K \vec{V}_K \vec{V}_K \vec{V}_K \right) \tag{2.251}
\end{aligned}$$

o termo C pode ser re-escrito como:

$$\begin{aligned}
div \sum_K (-\vec{J}_{U,K} + \vec{P}_K \cdot \vec{v}_K) &= div (-\vec{J}_U) + div \sum_K (\vec{P}_K \cdot \vec{v}_K) \\
&= div (-\vec{J}_U) + div \sum_K (\vec{P}_K \cdot \vec{v}_K) \\
&= div (-\vec{J}_U) + div \sum_K (-p_K \vec{U} + \vec{\tau}_K) \cdot \vec{v}_K \\
&= div (-\vec{J}_U) + div \sum_K (-p_K) \cdot \vec{v}_K + div \sum_K (\vec{\tau}_K) \cdot \vec{v}_K \\
&= div (-\vec{J}_U) + div \sum_K (-p_K) \cdot \vec{v}_K + div \sum_K (\vec{\tau}_K) \cdot (\vec{v} + \vec{V}_K) \\
&= div (-\vec{J}_U) + div \sum_K (-p_K) \cdot \vec{v}_K + div \sum_K (\vec{\tau}_K) \cdot \vec{v} + div \sum_K (\vec{\tau}_K) \cdot \vec{V}_K \\
&= div (-\vec{J}_U) + div \sum_K (-p_K) \cdot \vec{v}_K + div (\vec{\tau}) \cdot \vec{v} + div \sum_K (\vec{\tau}_K) \cdot \vec{V}_K \quad (2.252)
\end{aligned}$$

Substituindo-se as equações (2.250) (2.251) e (2.252) na equação (2.249) tem-se

$$\begin{aligned}
&\rho \frac{D}{Dt} (u + \psi) + \frac{1}{2} \rho \frac{D}{Dt} \left(\vec{v}\vec{v} + \sum_K Y_K \vec{V}_K \vec{V}_K \right) + div \left(\sum_K \rho Y_K (h_K + \psi_K) \vec{V}_K \right) + \\
div \rho \left(\sum_K Y_K \vec{V}_K \vec{V}_K \vec{v} \right) + div \rho \left(\sum_K Y_K \vec{V}_K \vec{V}_K \vec{V}_K \right) - \frac{1}{2} div \rho \left(\sum_K Y_K \vec{V}_K \vec{V}_K \vec{V}_K \right) = \\
div (-\vec{J}_U) + div \vec{\tau} \cdot \vec{v} + div \sum_K \vec{\tau}_K \cdot \vec{V}_K - div \sum_K p_K \vec{v}_K + \sum_K div p_K (\vec{v}_K - \vec{v}) \quad (2.253)
\end{aligned}$$

ou

$$\begin{aligned}
&\rho \frac{D}{Dt} (u + \psi) + \frac{1}{2} \rho \frac{D}{Dt} \left(\vec{v}\vec{v} + \sum_K Y_K \vec{V}_K \vec{V}_K \right) + div \left(\sum_K \rho Y_K (h_K + \psi_K) \vec{V}_K \right) + \\
div \rho \left(\sum_K Y_K \vec{V}_K \vec{V}_K \vec{v} \right) + div \rho \left(\sum_K Y_K \vec{V}_K \vec{V}_K \vec{V}_K \right) - \frac{1}{2} div \rho \left(\sum_K Y_K \vec{V}_K \vec{V}_K \vec{V}_K \right) = \\
div (-\vec{J}_U) + div \vec{\tau} \cdot \vec{v} + div \sum_K \vec{\tau}_K \cdot \vec{V}_K + \sum_K div \underbrace{(p_K - p_K)}_{=0} \vec{v}_K - div \underbrace{\left(\sum_K p_K \vec{v} \right)}_{=p}
\end{aligned}$$

ou ainda

$$\begin{aligned}
& \rho \frac{D}{Dt} \left(u + \psi + \frac{1}{2} \vec{v} \vec{v} \right) + \frac{1}{2} \rho \frac{D}{Dt} \left(\sum_K Y_K \vec{V}_K \vec{V}_K \right) + \operatorname{div} \left(\sum_K \rho Y_K (h_K + \psi_K) \vec{V}_K \right) = \\
& \operatorname{div} \left(\underbrace{-\rho \sum_K Y_K \vec{V}_K \vec{V}_K \vec{v}}_{\sum_K \tau_{K,ij}^D, \text{eq.}(2.218)} \right) + \operatorname{div} \left(\underbrace{-\rho \sum_K Y_K \vec{V}_K \vec{V}_K \vec{V}_K}_{\sum_K \tau_{K,ij}^D, \text{eq.}(2.218)} \right) + \frac{1}{2} \operatorname{div} \rho \left(\sum_K Y_K \vec{V}_K \vec{V}_K \vec{V}_K \right) + \\
& \operatorname{div} (-\vec{J}_U) + \operatorname{div} \bar{\tau} \cdot \vec{v} + \operatorname{div} \sum_K \bar{\tau}_K \cdot \vec{V}_K - \operatorname{div} (p\vec{v}) \quad (2.254)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \rho \frac{D}{Dt} \left(u + \psi + \frac{1}{2} \vec{v} \vec{v} \right) + \frac{1}{2} \rho \frac{D}{Dt} \left(\sum_K Y_K \vec{V}_K \vec{V}_K \right) + \operatorname{div} \left(\sum_K \rho Y_K (h_K + \psi_K) \vec{V}_K \right) = \\
& \operatorname{div} ((\bar{\tau}^D + \bar{\tau}) \cdot \vec{v}) + \operatorname{div} \left(\sum_K (\bar{\tau}_K^D + \bar{\tau}_K) \cdot \vec{V}_K \right) + \frac{1}{2} \operatorname{div} \rho \left(\sum_K Y_K \vec{V}_K \vec{V}_K \vec{V}_K \right) + \\
& \operatorname{div} (-\vec{J}_U) - \operatorname{div} (p\vec{v}) \quad (2.255)
\end{aligned}$$

Observe que o trabalho das forças conservativas desapareceu, pois ele foi computado, com sinal contrário, nas equações da energia cinética, eq.(2.232), e potencial, eq.(2.240).

O tensor da tensão total $\bar{\bar{P}}$, que atua na fronteira do volume de controle, pode ser dividido em duas parcelas: a pressão hidrostática p , que atua mesmo no equilíbrio termodinâmico, ou seja fluido em repouso, e o tensor das tensões viscosas, $\bar{\bar{\Pi}}$:

$$\bar{\bar{P}} = -p\bar{\bar{U}} + \bar{\bar{\Pi}} \quad (2.256)$$

na qual $\bar{\bar{U}}$ é a matriz unitária com os elementos $(U)_{ij} = \delta_{ij}$.

O tensor das tensões viscosas pode ainda ser decomposto em

$$\bar{\bar{\Pi}} = \Pi \bar{\bar{U}} + \overset{\circ}{\bar{\bar{\Pi}}}^s + \bar{\bar{\Pi}}^a \quad (2.257)$$

em que $\overset{\circ}{\bar{\Pi}}^s$ e $\bar{\Pi}^a$ são, respectivamente, as partes simétrica e antisimétrica do tensor de $\bar{\Pi}$.

Subtraindo-se a equação da energia potencial, eq.(2.240), da equação da energia total, eq.(2.255), chega-se à equação da energia interna mais a energia cinética:

$$\begin{aligned} & \rho \frac{D}{Dt} \left(u + \frac{1}{2} \vec{v} \vec{v} \right) + \frac{1}{2} \rho \frac{D}{Dt} \left(\sum_K Y_K \vec{V}_K \vec{V}_K \right) + \text{div} \left(\sum_K \rho Y_K h_K \vec{V}_K \right) = \\ & \text{div} \left((\bar{\tau}^D + \bar{\tau}) \cdot \vec{v} \right) + \text{div} \left(\sum_K (\bar{\tau}_K^D + \bar{\tau}_K) \cdot \vec{V}_K \right) + \frac{1}{2} \text{div} \rho \left(\sum_K Y_K \vec{V}_K \vec{V}_K \vec{V}_K \right) + \\ & \text{div} (-\vec{J}_U) - \text{div} (p\vec{v}) + \rho \vec{v} \vec{f} + \rho \sum_K \vec{V}_K Y_K \vec{f}_K \quad (2.258) \end{aligned}$$

Subtraindo-se a equação da energia cinética, eq.(2.232), tem-se:

$$\begin{aligned} & \rho \frac{Du}{Dt} + \text{div} \left(\sum_K \rho Y_K h_K \vec{V}_K \right) = \text{div} \left(\sum_K \bar{\tau}_K \cdot \vec{V}_K \right) \\ & + \text{div} (\bar{\tau} \cdot \vec{v}) - \sum_K \bar{P}_K \cdot \text{div} v_K - \text{div} \sum_K (\bar{P}_K \cdot v_K) \\ & + \text{div} (-\vec{J}_U) - \text{div} (p\vec{v}) \quad (2.259) \end{aligned}$$

Então usando 2.158 na eq.(??) torna-se

$$\begin{aligned}
\rho \frac{Du}{Dt} &= \text{div}(\rho u \vec{v} - \rho u \vec{v} - \vec{J}_U) - \bar{P} : \text{grad } \vec{v} + \sum_k \vec{J}_k \cdot \vec{F}_k \\
&= -\text{div}(\vec{J}_U) - [p\bar{U} : \text{grad } \vec{v} + \bar{\Pi} : \text{grad } \vec{v}] + \sum_k \vec{J}_k \cdot \vec{F}_k \\
&= -\text{div}(\vec{J}_U) - [p \sum_i \frac{\partial v_i}{\partial x_i} + \bar{\Pi} : \text{grad } \vec{v}] + \sum_k \vec{J}_k \cdot \vec{F}_k \\
&= -\text{div}(\vec{J}_U) - p \text{div } \vec{v} - \bar{\Pi} : \text{grad } \vec{v} + \sum_k \vec{J}_k \cdot \vec{F}_k \\
\frac{Du}{Dt} &= -\frac{1}{\rho} \text{div}(\vec{J}_U) - \frac{p}{\rho} \text{div } \vec{v} - \frac{1}{\rho} \bar{\Pi} : \text{grad } \vec{v} + \frac{1}{\rho} \sum_k \vec{J}_k \cdot \vec{F}_k \\
&\quad \uparrow \text{eq 2.169} \\
\frac{Du}{Dt} &= -\frac{1}{\rho} \text{div}(\vec{J}_U) - p \frac{Dv}{Dt} - v \bar{\Pi} : \text{grad } \vec{v} + \frac{1}{\rho} \sum_k \vec{J}_k \cdot \vec{F}_k \tag{2.260}
\end{aligned}$$

ainda $h = u + pv \Rightarrow \frac{Dh}{Dt} = \frac{Du}{Dt} + p \frac{Dv}{Dt} + v \frac{Dp}{Dt}$

$$\begin{aligned}
\frac{Dh}{Dt} - v \frac{Dp}{Dt} - p \frac{Dv}{Dt} &= -\frac{1}{\rho} \text{div}(\vec{J}_U) - p \frac{Dv}{Dt} - v \bar{\Pi} : \text{grad } \vec{v} + v \sum_k \vec{J}_k \cdot \vec{F}_k \quad (\times \rho) \\
\rho \frac{Dh}{Dt} - \frac{Dp}{Dt} &= -\text{div}(\vec{J}_U) - \bar{\Pi} : \text{grad } \vec{v} + \sum_k \vec{J}_k \cdot \vec{F}_k
\end{aligned}$$

Desprezando-se a influência do coeficiente associado ao efeito Dufour, L_{01}' , na composição do coeficiente D_{00}' , eq.(2.108), ou também D_{00} , eq.(2.114), faz-se $D_{00} = k$ e assim:

$$\vec{J}_U = -k \text{grad } T - D_{0k} \text{grad } C_k \tag{2.261}$$

O efeito Dufour é geralmente desprezado em combustão turbulenta, mas pode ser importante em regime Laminar ou em simulação de combustão turbulenta utilizando-se **Direct Numerical Simulation**. O fluxo de *DUFOUR* é calculado por ???REFERENCIA????:

$$-D_{0k} \text{grad } C_k = R_u T \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \left(\frac{X_j \alpha_i}{W_i D_{ij}} \right) (V_i - V_j) \tag{2.262}$$

V_i : Velocidade de difusão (relativa) de “i” na mistura

X_j : Fração molar de “j”

α_i : coeficiente de difusão térmica da espécie “i”

D_{ij} : coeficiente de difusão binária no sistema i-j

W_i : massa molecular de espécie “i”

Então \vec{J}_U é expresso finalmente por:

$$\vec{J}_U = -k \text{ grad } T + R_u T \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \left(\frac{X_j \alpha_i}{W_i D_{ij}} \right) (V_i - V_j) \quad (2.263)$$

então a equação da entalpia torna-se:

$$\begin{aligned} \rho \frac{Dh}{Dt} - \frac{Dp}{Dt} = & -\text{div}(\rho e \vec{v} + \sum_k (\psi_k \vec{J}_k) + \sum_k (h_k \vec{J}_k) - k \text{ grad } T + R_u T \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \left(\frac{X_j \alpha_i}{W_i D_{ij}} \right) (V_i - V_j)) \\ & - \bar{\Pi} : \text{grad } \vec{v} + \sum_k \vec{J}_k \cdot \vec{F}_k \end{aligned}$$

2.9 Equações Fenomelógicas

A equação de momento linear (momento) ?? torna-se em notação simbólica:

$$\rho \frac{D\vec{v}}{Dt} = -\text{div } \bar{P} + \sum_{k=1}^n \rho_k F_{k\alpha} \quad (\alpha = 1, 2, 3) \quad (2.264)$$

O tensor do gradiente do vetor velocidade \vec{v} é decomposto na forma:

$$\text{grad } \vec{v} = \frac{1}{3} (\text{div } \vec{v}) \bar{U} + \underbrace{(\text{grad } \vec{v})^s}_{\text{parte simétrica}} + \underbrace{(\text{grad } \vec{v})^a}_{\text{parte anti-simétrica}} \quad [1] \quad (2.265)$$

Prova

$$(\mathring{grad} \vec{v})^s \equiv (grad \vec{v})^s - \frac{1}{3}(div \vec{v})\bar{U} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\beta} + \frac{\partial u_\beta}{\partial x_\alpha} \right) - \frac{1}{3} \delta_{\alpha\beta} \sum_\gamma \frac{\partial u_\gamma}{\partial x_\gamma} \quad [2] \quad (2.266)$$

$$(grad \vec{v})^a \equiv \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\beta} - \frac{\partial u_\beta}{\partial x_\alpha} \right) = \frac{1}{2} (\nabla \times \vec{u})_\gamma \quad [3] \quad (2.267)$$

Somando 2.266 + 2.267:

$$\begin{aligned} (\mathring{grad} \vec{v})^s + (grad \vec{v})^a &= \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\beta} + \frac{\partial u_\beta}{\partial x_\alpha} \right) - \frac{1}{3} \delta_{\alpha\beta} \sum_\gamma \frac{\partial u_\gamma}{\partial x_\gamma} + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\beta} - \frac{\partial u_\beta}{\partial x_\alpha} \right) \\ &= \frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\beta} - \frac{1}{3} \delta_{\alpha\beta} \sum_\gamma \frac{\partial u_\gamma}{\partial x_\gamma} \quad [4] \quad (2.268) \end{aligned}$$

Somando-se $\left(\frac{1}{3} \delta_{\alpha\beta} \sum_\gamma \frac{\partial u_\gamma}{\partial x_\gamma} \right)$ nos dois lados de 2.268 tem-se:

$$(\mathring{grad} \vec{v})^s + (grad \vec{v})^a + \underbrace{\left(\frac{1}{3} \delta_{\alpha\beta} \sum_\gamma \frac{\partial u_\gamma}{\partial x_\gamma} \right)}_{\frac{1}{3} \bar{U} div \vec{v}} = \frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\beta} \quad \downarrow \quad grad \vec{v} \quad (2.269)$$

Veja que a decomposição de $\mathring{grad} \vec{v}$ também vale para a decomposição sem o traço, como aparece na equação 9, pág 32 (de Groot)

$$\begin{aligned} \mathring{grad} \vec{v} &= (\mathring{grad} \vec{v})^s + (\mathring{grad} \vec{v})^a \\ &= \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\beta} + \frac{\partial u_\beta}{\partial x_\alpha} \right) - \frac{1}{3} \delta_{\alpha\beta} \sum_\gamma \frac{\partial u_\gamma}{\partial x_\gamma} + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\beta} - \frac{\partial u_\beta}{\partial x_\alpha} \right) \\ &= \frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\beta} - \frac{1}{3} \delta_{\alpha\beta} \sum_\gamma \frac{\partial u_\gamma}{\partial x_\gamma} \\ &= grad \vec{v} - \frac{1}{3} (div \vec{v}) \bar{U} \end{aligned}$$

Isto é possível porque o traço de $(grad \vec{v})^a$ é nulo:

$$\begin{aligned} \text{tr}(\text{grad } \vec{v})^a &= (\text{grad } \vec{v})^a : U = \sum_{\alpha, \beta} (\text{grad } \vec{v})_{\alpha\beta}^a \delta_{\alpha\beta} \\ &= \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\beta} - \frac{\partial u_\beta}{\partial x_\alpha} \right) : \delta_{\alpha\beta} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha} \underbrace{\left(\frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\alpha} - \frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\alpha} \right)}_{=0} \end{aligned}$$

então:

$$(\text{grad } \vec{v})^a = (\overset{\circ}{\text{grad}} \vec{v})^a$$

$$\vec{J}_{cond} = -\lambda \text{grad } T \quad \lambda : \text{condutividade térmica} \quad (2.270)$$

$$\Pi = -\eta_v \text{div } \vec{v} \quad \eta_v : \text{viscosidade volumétrica} \quad (2.271)$$

$$\bar{\Pi}^s = -2\eta(\overset{\circ}{\text{grad}} \vec{v})\eta : \text{viscosidade ordinária ou "shear viscosity"} \quad (2.272)$$

$\overset{\circ}{\text{grad}} \rightarrow$ no livro não tem a exclusão do traço “ \circ ”, mas tem que ser. No livro do A. Munster está com o “ \circ ”.

com estas equações fenomenológicas; a equação do momento torna-se:

$$\rho \frac{D\vec{v}}{Dt} = -\text{div}(p\bar{U} + \Pi\bar{U} + \bar{\Pi}^s + \bar{\Pi}^a) + \sum_{n=1}^k \rho_k F_{k,\alpha} \quad (2.273)$$

Fazendo termo a termo:

$$-\text{div}(p\bar{U}) = -\sum_k \frac{\partial}{\partial x_k} (pU_{ki}) = -\sum_k \frac{\partial}{\partial x_k} (p\delta_{ki}) = -\frac{\partial p}{\partial x_i} = -\nabla p \quad (2.274)$$

$$-\text{div}(\Pi\bar{U}) = -\sum_k \frac{\partial}{\partial x_k} \left(-\eta_v \sum_l \frac{\partial u_l}{\partial x_i} \delta_{ik} \right) = \eta_v \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\sum_l \frac{\partial u_l}{\partial x_l} \right) = \text{grad}(\eta_v \text{div } \vec{v}) \quad (2.275)$$

$$\begin{aligned}
-div(\overset{\circ}{\bar{\Pi}}^s) &= -div(-2\eta(\overset{\circ}{grad} \vec{v})^s) \\
&= + \sum_k \frac{\partial}{\partial x_k} \left(2\eta \left(\underbrace{\frac{1}{2} \left(\frac{\partial v_k}{\partial x_i} + \frac{\partial v_i}{\partial x_k} \right)}_{S_{ki}} - \frac{\delta_{ik}}{3} \sum_l \frac{\partial v_l}{\partial x_l} \right) \right) \\
&= \sum_k \frac{\partial}{\partial x_k} \left(2\eta S_{ki} - \frac{2}{3} \eta \delta_{ik} \sum_l \frac{\partial v_l}{\partial x_l} \right)
\end{aligned}$$

ou de outra forma:

$$\begin{aligned}
&= \sum_k \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\eta \frac{\partial v_i}{\partial x_k} + \eta \frac{\partial v_k}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \eta \delta_{ik} \sum_l \frac{\partial v_l}{\partial x_l} \right) \\
&= \eta \underbrace{\sum_k \frac{\partial^2 v_i}{\partial x_k \partial x_k}}_{\equiv \Delta \vec{v}} + \sum_k \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\eta \frac{\partial v_k}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \eta \delta_{ik} \sum_l \frac{\partial v_l}{\partial x_l} \right) \\
&\quad \text{Laplaciano de } \vec{v} \\
&= \eta \Delta \vec{v} + \eta \sum_k \frac{\partial^2 v_k}{\partial x_k \partial x_i} - \frac{2}{3} \eta \sum_k \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\delta_{ik} \sum_l \frac{\partial v_l}{\partial x_l} \right) \\
-div(\overset{\circ}{\bar{\Pi}}^s) &= \eta \Delta \vec{v} + \eta \sum_k \frac{\partial^2 v_k}{\partial x_i \partial x_k} - \frac{2}{3} \eta \sum_k \frac{\partial^2 v_k}{\partial x_i \partial x_k}
\end{aligned}$$

então

$$-div(\overset{\circ}{\bar{\Pi}}^s) = \eta \Delta \vec{v} + \frac{1}{3} \eta \text{ grad div } \vec{v} \tag{2.276}$$

O quarto termo, $\bar{\Pi}^a$, só é importante em escoamentos nos quais o movimento de rotação do elemento de fluido seja significativo. Neste caso, é necessária a solução da equação de conservação do momento angular e o tensor das tensões totais é, necessariamente, anti-simétrico ($P_{\alpha\beta} \neq P_{\beta\alpha}$). Nos problemas de escoamentos reativos típicos de combustão, este termo é negligenciado. (de Groot pág 305).

Finalmente têm-se a equação do momento linear:

$$\begin{aligned}\rho \frac{D\vec{v}}{Dt} &= -\nabla p + \text{grad}(\eta_v \text{div } \vec{v}) + \eta \Delta \vec{v} + \frac{1}{3} \eta \text{grad div } \vec{v} \\ \rho \frac{D\vec{v}}{Dt} &= -\nabla p + \eta \Delta \vec{v} + \left(\frac{1}{3} \eta + \eta_v \right) \text{grad div } \vec{v} \quad [63 - deGroot]\end{aligned}\tag{2.277}$$

A viscosidade volumétrica η_v também é negligenciada (Schlichting pág?), então:

$$\rho \frac{D\vec{v}}{Dt} = -\nabla p + \eta \Delta \vec{v} + \frac{1}{3} \eta \text{grad div } \vec{v} \tag{2.278}$$

Se o escoamento for incompressível, $\text{div } \vec{v} = 0$ e então:

$$\rho \frac{D\vec{v}}{Dt} = -\nabla p + \eta \Delta \vec{v} \tag{2.279}$$

ou em notação indicial:

$$\rho \frac{Dv_i}{Dt} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \eta \frac{\partial^2 v_i}{\partial x_j \partial x_j} \tag{2.280}$$

2.9.1 Aplicação das Equações Fenomológicas à Equação da Energia

Na equação da energia (eq. 2.260), o termo associado à viscosidade é:

$$\bar{\Pi} : \text{grad } \vec{v}. \tag{2.281}$$

Aplicando as equações de decomposição de $\bar{\Pi}$ e $\text{grad } \vec{v}$, tem-se:

$$(\Pi \bar{U} + \overset{\circ}{\Pi}) : \left(\frac{1}{3} \text{div } \vec{v} \bar{U} + \overset{\circ}{\text{grad}} \vec{v} \right) \tag{2.282}$$

$$\underbrace{\Pi\bar{U} : \frac{1}{3}div \vec{v}\bar{U}}_I + \underbrace{\Pi\bar{U} : grad \vec{v}}_{II} + \underbrace{\overset{\circ}{\Pi} : \frac{1}{3}div \vec{v}\bar{U}}_{III} + \underbrace{\overset{\circ}{\Pi} : grad \vec{v}}_{IV} \quad (2.283)$$

lembrando das operações tensoriais ($\bar{T} : \bar{U} = \sum_i T_{ii}$ e $\bar{S} : \bar{T} = \sum_{ik} S_{ik}T_{ik}$) manipulam-se os termos.

Termo I:

$$\Pi\bar{U} : \frac{1}{3}div \vec{v}\bar{U} \Rightarrow \frac{1}{3}div \vec{v} \sum_i (\Pi U)_{ii} \quad (2.284)$$

mas

$$\Pi \equiv \frac{1}{3}\bar{\Pi} : \bar{U} = \frac{1}{3} \sum_{\alpha=1}^3 \Pi_{\alpha\alpha}, \quad (2.285)$$

ou seja, é 1/3 da diagonal de $\bar{\Pi}$ e $\sum_i (\Pi U)_{ii} = \sum_i \left(\frac{1}{3} \sum_{\alpha} \Pi_{\alpha\alpha} \delta_{ii} \right) = \frac{3}{3} \sum_{\alpha} \Pi_{\alpha\alpha}$

então:

$$\text{Termo I} = \frac{1}{3}div \vec{v} \Pi_{\alpha\alpha} \quad (2.286)$$

A quantidade Π é a parte do tensor das tensões viscosas associada à “Bulk Viscosity” (de Groot pág 33, 34 e 42), na forma:

$$\Pi = -\eta_v div \vec{v} \quad (2.287)$$

então, com a definição de Π (equação 2.285),

$$\frac{1}{3}\bar{\Pi} : \bar{U} = -\eta_v div \vec{v}$$

$$\frac{1}{3} \sum_{\alpha} \Pi_{\alpha\alpha} = -\eta_v div \vec{v} \quad \text{ou} \quad \frac{1}{3}\Pi_{\alpha\alpha} = -\eta_v div \vec{v}$$

substituindo em (2.286)

$$\begin{aligned} \Pi \bar{U} : \frac{1}{3} \operatorname{div} \vec{v} \bar{U} &= \frac{1}{3} \operatorname{div} \vec{v} \times 3 \times (-\eta_v \operatorname{div} \vec{v}) \\ &= -\eta_v (\operatorname{div} \vec{v})^2 \end{aligned}$$

Termo II:

$$\Pi \bar{U} : \overset{\circ}{\operatorname{grad}} \vec{v} \tag{2.288}$$

lembrando que Π é um escalar $(-\eta_v \operatorname{div} \vec{v})$, podemos avaliar simplesmente $\bar{U} : \overset{\circ}{\operatorname{grad}} \vec{v}$

$$\begin{aligned} \bar{U} : \overset{\circ}{\operatorname{grad}} \vec{v} &\underset{(\bar{S} : \bar{T})}{\Rightarrow} \sum_{i,k} U_{ik} (\overset{\circ}{\operatorname{grad}} \vec{v})_{ki} \\ &= \sum_{i,k} \delta_{ik} \left(\frac{1}{2} \left(\frac{\partial v_k}{\partial x_i} + \frac{\partial v_i}{\partial x_k} \right) - \frac{1}{3} \delta_{ki} \sum_{\gamma} \frac{\partial v_{\gamma}}{\partial x_{\gamma}} \right) \\ &= \sum_{i,i} \delta_{ii} \left(\frac{1}{2} \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_i} + \frac{\partial v_i}{\partial x_i} \right) - \frac{1}{3} \delta_{ii} \sum_{\gamma} \frac{\partial v_{\gamma}}{\partial x_{\gamma}} \right) \\ &= \frac{\partial v_i}{\partial x_i} - \frac{1}{3} \times 3 \times \frac{\partial v_{\gamma}}{\partial x_{\gamma}} = \frac{\partial v_i}{\partial x_i} - \frac{\partial v_{\gamma}}{\partial x_{\gamma}} \\ &= 0 \end{aligned}$$

Termo III:

$$\begin{aligned} \overset{\circ}{\Pi} : \frac{1}{3} (\operatorname{div} \vec{v}) \bar{U} &= \frac{1}{3} \operatorname{div} \vec{v} \overset{\circ}{\Pi} : \bar{U} \\ &= \frac{1}{3} \operatorname{div} \vec{v} \sum_{\alpha} \overset{\circ}{\Pi}_{\alpha\alpha} \\ &\quad \swarrow \\ &\quad = 0, \text{ pois o} \\ &\quad \text{tensor } \overset{\circ}{\Pi} \text{ tem traço nulo} \\ &\quad (\sum \overset{\circ}{\Pi}_{\alpha\alpha} = 0) \end{aligned}$$

então

$$\overset{\circ}{\Pi} : \frac{1}{3} (\operatorname{div} \vec{v}) \bar{U} = 0 \tag{2.289}$$

Termo IV:

$$\begin{aligned}\overset{\circ}{\Pi} : \mathring{grad}\vec{v} &= \overset{\circ}{\Pi} : \left[(\mathring{grad}\vec{v})^s + (\mathring{grad}\vec{v})^a \right] \\ &= \underbrace{\overset{\circ}{\Pi} : (\mathring{grad}\vec{v})^s}_{D1} + \underbrace{\overset{\circ}{\Pi} : (\mathring{grad}\vec{v})^a}_{D2}\end{aligned}$$

- Para um tensor simétrico $T_{ij} = T_{ji}$ e para um tensor anti-simétrico $T_{ij} = -T_{ji}$
- Suponha que S_{ij} seja um tensor SIMÉTRICO e A_{ij} um tensor ANTI-SIMÉTRICO, então:

$$S_{ij}A_{ij} = S_{ij}(-A_{ji}) = \underbrace{-S_{ij}}_{-S_{ji}} A_{ji} = -S_{ji}A_{ji}$$

então

$$S_{ij}A_{ij} + \underbrace{S_{ji}A_{ji}}_{\substack{\text{como os índices repetidos são} \\ \text{"dummy", eles podem ser} \\ \text{trocados } S_{ji}A_{ji} = S_{ij}A_{ij}}} = 0$$

e então:

$$\begin{aligned}S_{ij}A_{ij} + S_{ij}A_{ij} &= 0 \\ 2(S_{ij}A_{ij}) &= 0 \implies \boxed{S_{ij}A_{ij} = 0}\end{aligned}$$

ou seja, o produto de um tensor SIMÉTRICO por um ANTI-SIMÉTRICO é nulo.

Da decomposição 2.257, vê-se que $\overset{\circ}{\Pi}$ é a parte simétrica de $\bar{\Pi}$. Assim o termo $D2$ é nulo.

Termo D1

$\overset{\circ}{\Pi} : (\mathring{grad}\vec{v})^s$, lembrando que $S : T = \sum_{i,k} S_{ik}T_{ki}$ e aplicando a equação fenomenológica para $\overset{\circ}{\Pi}^s$ (2.272).

$$\begin{aligned}
& -2\eta \sum_{\alpha,\beta} \left[\underbrace{\frac{1}{2} \left(\frac{\partial v_\alpha}{\partial x_\beta} + \frac{\partial v_\beta}{\partial x_\alpha} \right)}_{e_{\alpha\beta}} - \frac{1}{3} \delta_{\alpha\beta} \sum_\gamma \frac{\partial v_\gamma}{\partial x_\gamma} \right] \left[\underbrace{\frac{1}{2} \left(\frac{\partial v_\beta}{\partial x_\alpha} + \frac{\partial v_\alpha}{\partial x_\beta} \right)}_{e_{\beta\alpha}} - \frac{1}{3} \delta_{\beta\alpha} \sum_\gamma \frac{\partial v_\gamma}{\partial x_\gamma} \right] \\
& -2\eta \sum_{\alpha,\beta} \left[e_{\alpha\beta} e_{\beta\alpha} - e_{\alpha\beta} \frac{1}{3} \delta_{\beta\alpha} \sum_\gamma \frac{\partial v_\gamma}{\partial x_\gamma} - e_{\beta\alpha} \frac{1}{3} \delta_{\alpha\beta} \sum_\gamma \frac{\partial v_\gamma}{\partial x_\gamma} + \frac{1}{3^2} \delta_{\alpha\beta} \delta_{\beta\alpha} \left(\sum_\gamma \frac{\partial v_\gamma}{\partial x_\gamma} \right)^2 \right]
\end{aligned}$$

mas $e_{\alpha\beta} = e_{\beta\alpha}$, então:

$$\begin{aligned}
& -2\eta \sum_{\alpha,\beta} \left[e_{\alpha\beta} e_{\alpha\beta} - \frac{1}{3} \sum_\gamma \frac{\partial v_\gamma}{\partial x_\gamma} \left(\underbrace{e_{\alpha\beta} \delta_{\beta\alpha}}_{e_{\alpha\alpha}} + \underbrace{e_{\beta\alpha} \delta_{\alpha\beta}}_{e_{\alpha\alpha}} \right) + \frac{1}{3^2} \delta_{\alpha\beta} \delta_{\beta\alpha} \left(\sum_\gamma \frac{\partial v_\gamma}{\partial x_\gamma} \right)^2 \right] \\
& -2\eta \sum_{\alpha,\beta} \left[e_{\alpha\beta} e_{\alpha\beta} - \frac{2}{3} e_{\alpha\alpha} \sum_\gamma \frac{\partial v_\gamma}{\partial x_\gamma} + \frac{1}{3^2} \delta_{\alpha\beta} \delta_{\beta\alpha} \left(\sum_\gamma \frac{\partial v_\gamma}{\partial x_\gamma} \right)^2 \right]
\end{aligned}$$

Eliminando o \sum (redundante); lembrando que $\sum_{\alpha,\beta} \delta_{\alpha\beta} \delta_{\beta\alpha} = \sum_\alpha \delta_{\alpha\alpha} = 3$

$$-2\eta \left[e_{\alpha\beta} e_{\alpha\beta} - \frac{2}{3} e_{\alpha\alpha} \frac{\partial v_\gamma}{\partial x_\gamma} + \frac{1}{3^2} \times 3 \left(\frac{\partial v_\gamma}{\partial x_\gamma} \right)^2 \right]$$

$$-\eta \left(2e_{\alpha\beta} e_{\alpha\beta} - \frac{4}{3} e_{\alpha\alpha} \frac{\partial v_\gamma}{\partial x_\gamma} \right) - \frac{2}{3} \eta \left(\frac{\partial v_\gamma}{\partial x_\gamma} \right)^2$$

$$\text{sendo } e_{\alpha\alpha} = \frac{\partial v_\alpha}{\partial x_\alpha}$$

$$-\eta \left[2e_{\alpha\beta} e_{\alpha\beta} - \frac{4}{3} \left(\frac{\partial v_\alpha}{\partial x_\alpha} \right)^2 \right] - \frac{2}{3} \eta \left(\frac{\partial v_\alpha}{\partial x_\alpha} \right)^2$$

$$-\eta \left(2e_{\alpha\beta} e_{\alpha\beta} \right) + \eta \left(\frac{4-2}{3} \right) \left(\frac{\partial v_\alpha}{\partial x_\alpha} \right)^2$$

$$\underbrace{-\eta(2e_{\alpha\beta}e_{\alpha\beta}) + \frac{2}{3}\eta\left(\frac{\partial v_{\alpha}}{\partial x_{\alpha}}\right)^2}_{\text{Termo } D1}$$

Então voltando à equação da Energia (eq. 2.260):

$$\frac{Du}{Dt} = -\frac{1}{\rho}div(\vec{J}_q) - p\frac{Dv}{Dt} - v\left[-\eta_v(div\vec{v})^2 - \eta(2e_{\alpha\beta}e_{\alpha\beta}) + \frac{2}{3}\eta(div\vec{v})^2\right] + v\sum_k\vec{J}_k\cdot\vec{F}_k \quad (2.290)$$

ou ainda, pela equação 2.169, tem-se $p\frac{Dv}{Dt} = \frac{p}{\rho}div\vec{v}$ e então:

$$\frac{Du}{Dt} = -\frac{1}{\rho}div(\vec{J}_q) - \frac{p}{\rho}div\vec{v} - \frac{1}{\rho}\left[-\eta_v(div\vec{v})^2 - 2\eta e_{\alpha\beta}e_{\alpha\beta} + \frac{2}{3}\eta(div\vec{v})^2\right] + v\sum_k\vec{J}_k\cdot\vec{F}_k \quad (2.291)$$

ou na forma da Entalpia Absoluta:

$$\rho\frac{Dh}{Dt} - \frac{Dp}{Dt} = -div(\vec{J}_q) - \left[-\eta_v(div\vec{v})^2 - 2\eta e_{\alpha\beta}e_{\alpha\beta} + \frac{2}{3}\eta(div\vec{v})^2\right] + \sum_k\vec{J}_k\cdot\vec{F}_k \quad (2.292)$$

2.9.2 Aproximação das equações para escoamentos de baixo MACH

Objetivo: Obter as equações do escoamento que contém heterogeneidades de massa específica e temperatura com forma simplificada do problema.

Normalização das equações do escoamento

→ Escalas de normalização utilizadas:

$$\begin{array}{ccccccc} x^* = \frac{x}{L_{ref}} & t^* = \frac{t}{L_{ref}/U_{ref}} & u^* = \frac{u}{U_{ref}} & \rho^* = \frac{\rho}{\rho_{ref}} & & & \\ T^* = \frac{T}{T_{ref}} & p^* = \frac{p}{\rho_{ref}U_{ref}^2} & h^* = \frac{h}{h_{ref}} & M = \frac{U_{ref}}{\sqrt{\gamma RT_{ref}}} & & & \\ & & & \downarrow & & & \\ Re_{ref} = \frac{\rho_{ref}U_{ref}L_{ref}}{\eta} & & & \underbrace{M^2\gamma RT_{ref}}_{\varepsilon} = U_{ref}^2 & & & \end{array}$$

1) Fazendo-se uma expansão dos termos em função do parâmetro $\varepsilon = \gamma M^2$ e lembrando que, para baixo Mach (M), este parâmetro será sempre menor que 1.0, tem-se:

$$\rho = \rho_0 + \varepsilon \rho_1 + \varepsilon^2 \rho_2 \quad (2.293)$$

$$T = T_0 + \varepsilon T_1 + \varepsilon^2 T_2 \quad (2.294)$$

$$p = p_0 + \varepsilon p_1 + \varepsilon^2 p_2 \quad (2.295)$$

$$h = h_0 + \varepsilon h_1 + \varepsilon^2 h_2 \quad (2.296)$$

obs: O termo p_0 pode ser entendido como a pressão hidrostática, pois existe mesmo quando $\varepsilon = 0$ (fluido em repouso).

2) Adimensionalização da expansão:

Para a equação 2.293:

$$\begin{aligned} \frac{\rho}{\rho_{ref}} &= \frac{\rho_0}{\rho_{ref}} + \varepsilon \frac{\rho_1}{\rho_{ref}} + \varepsilon^2 \frac{\rho_2}{\rho_{ref}} \\ \rho^* &= \rho_0^* + \varepsilon \rho_1^* + \varepsilon^2 \rho_2^* \\ &\quad \mathcal{O}(\varepsilon^0) \quad \mathcal{O}(\varepsilon^1) \quad \mathcal{O}(\varepsilon^2) \end{aligned} \quad (2.297)$$

para a temperatura, equação 2.294:

$$\begin{aligned} \frac{T}{T_{ref}} &= \frac{T_0}{T_{ref}} + \varepsilon \frac{T_1}{T_{ref}} + \varepsilon^2 \frac{T_2}{T_{ref}} \\ T^* &= T_0^* + \varepsilon T_1^* + \varepsilon^2 T_2^* \\ &\quad \mathcal{O}(\varepsilon^0) \quad \mathcal{O}(\varepsilon^1) \quad \mathcal{O}(\varepsilon^2) \end{aligned} \quad (2.298)$$

para a pressão, equação 2.295:

$$\frac{p}{\rho_{ref} U_{ref}^2} = \frac{p_0}{\rho_{ref} U_{ref}^2} + \varepsilon \frac{p_1}{\rho_{ref} U_{ref}^2} + \varepsilon^2 \frac{p_2}{\rho_{ref} U_{ref}^2}$$

mas $M = U_{ref} / \sqrt{\gamma R T_{ref}}$ então

$$U_{ref}^2 = \underbrace{M^2 \gamma}_{\varepsilon} RT_{ref} \quad (2.299)$$

portanto:

$$\begin{aligned} \frac{p}{\rho_{ref} \varepsilon RT_{ref}} = p^* &= \frac{p_0}{\rho_{ref} \varepsilon RT_{ref}} + \varepsilon \frac{p_1}{\rho_{ref} \varepsilon RT_{ref}} + \varepsilon^2 \frac{p_2}{\rho_{ref} \varepsilon RT_{ref}} \\ &= \frac{p_0}{\rho_{ref} \varepsilon RT_{ref}} + \frac{p_1}{\rho_{ref} RT_{ref}} + \varepsilon \frac{p_2}{\rho_{ref} RT_{ref}} \\ &\quad \mathcal{O}(\varepsilon^{-1}) \quad \quad \quad \mathcal{O}(\varepsilon^0) \quad \quad \quad \mathcal{O}(\varepsilon^1) \end{aligned} \quad (2.300)$$

3) Substituindo-se as variáveis adimensionalizadas nas equações de estado, conservação da massa, momento linear e energia, tem-se:

- Equação de Estado $\frac{p}{\rho} = RT \rightarrow p = \rho RT$

Dividindo os dois lados por $\rho_{ref} T_{ref} R$, tem-se

$$\frac{p}{\rho_{ref} T_{ref} R} = \frac{\rho RT}{\rho_{ref} T_{ref} R}$$

mas por 2.299

$$\frac{p}{\rho_{ref} U_{ref}^2 / \varepsilon} = \rho^* T_{ref}^*$$

então:

$$p^* = \frac{\rho^* T_{ref}^*}{\varepsilon} \quad (2.301)$$

Substituindo as expansões para p^* , ρ^* e T^* na eq. (2.301); restando-se somente os termos de ordem mais significativa ($\mathcal{O}(\varepsilon^0)$), tem-se:

$$\frac{p_0}{\rho_{ref} \varepsilon RT_{ref}} + \frac{p_1}{\rho_{ref} RT_{ref}} = \frac{(\rho_0^*)(T_0^*)}{\varepsilon}$$

multiplicando por ε nos dois lados:

$$\frac{p_0}{\rho_{ref}RT_{ref}} + \frac{p_1\varepsilon}{\rho_{ref}RT_{ref}} = \rho_0^*T_0^*$$

$$\mathcal{O}(\varepsilon^0) \quad \mathcal{O}(\varepsilon^1) \quad \mathcal{O}(\varepsilon^0)$$

então, para manter a homogeneidade ($\mathcal{O}(\varepsilon^0)$):

$$p_0 = \rho_{ref}RT_{ref}\rho_0^*T_0^*$$

$$p_0 = \rho_0T_0R$$

ou seja, na equação de Estado não é necessário computar as oscilações de pressão (p_1), massa específica (ρ_1) e temperatura (T_1)

• Equação da Continuidade

– adimensionalizando-se a equação 2.159; tem-se

$$\frac{\partial \rho^*}{\partial t^*} + \frac{\partial \rho^* u_i^*}{\partial x_i^*} = 0$$

substituindo-se as expansões para ρ^* e u_i^* :

$$\frac{\partial}{\partial t^*} (\rho_0^* + \varepsilon \rho_1^*) + \frac{\partial}{\partial x_i^*} ((\rho_0^* + \varepsilon \rho_1^*) (u_{i,0}^* + \varepsilon u_{i,1}^*)) = 0$$

$$\frac{\partial \rho_0^*}{\partial t^*} + \varepsilon \frac{\partial \rho_1^*}{\partial t^*} + \frac{\partial}{\partial x_i^*} (\rho_0^* u_{i,0}^* + \varepsilon \rho_1^* u_{i,0}^* + \rho_0^* \varepsilon u_{i,1}^* + \varepsilon^2 \rho_1^* u_{i,1}^*) = 0$$

$$\underbrace{\frac{\partial \rho_0^*}{\partial t^*} + \frac{\partial}{\partial x_i^*} (\rho_0^* u_{i,0}^*)}_{\mathcal{O}(\varepsilon^0)} + \underbrace{\varepsilon \left(\frac{\partial \rho_1^*}{\partial t^*} + \frac{\partial}{\partial x_i^*} (\rho_1^* u_{i,0}^* + \rho_0^* u_{i,1}^*) \right)}_{\mathcal{O}(\varepsilon^1)} + \underbrace{\varepsilon^2 \frac{\partial}{\partial x_i^*} (\rho_1^* u_{i,1}^*)}_{\mathcal{O}(\varepsilon^2)} = \underbrace{0}_{\mathcal{O}(\varepsilon^0)}$$

Assim, para manter a ordem de grandeza nos dois lados da equação:

$$\frac{\partial \rho_0^*}{\partial t^*} + \frac{\partial}{\partial x_i^*} (\rho_0^* u_{i,0}^*) = 0 \tag{2.302}$$

ou seja, na equação da continuidade não é necessário computar as oscilações de (ρ_1) e ($u_{i,1}$)

- Equação de Momento Linear

Partindo-se da equação (2.278) re-escrita aqui na forma:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_i u_j) = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \eta \Delta \vec{v} + \frac{1}{3} \eta \text{grad div } \vec{v} \quad (2.303)$$

e adimensionalizando-a tem-se:

$$\frac{\rho_{ref} U_{ref}^2}{L_{ref}} \frac{\partial \rho^* u_i^*}{\partial t^*} + \frac{\rho_{ref} U_{ref}^2}{L_{ref}} \frac{\partial}{\partial x_j^*} (\rho^* u_i^* u_j^*) = -\frac{\rho_{ref} U_{ref}^2}{L_{ref}} \frac{\partial p^*}{\partial x_i^*} + \eta \frac{U_{ref}}{L_{ref}^2} \left(\Delta v^* + \frac{1}{3} \text{grad div } v^* \right) \quad (2.304)$$

fazendo a equação 2.304 $\times \frac{L_{ref}}{\rho_{ref} U_{ref}^2}$ tem-se:

$$\frac{\partial \rho^* u_i^*}{\partial t^*} + \frac{\partial}{\partial x_j^*} (\rho^* u_i^* u_j^*) = -\frac{\partial p^*}{\partial x_i^*} + \underbrace{\frac{\eta}{U_{ref} \rho_{ref} L_{ref}}}_{\frac{1}{Re_{ref}}} \left(\Delta v^* + \frac{1}{3} \text{grad div } v^* \right) \quad (2.305)$$

Substituindo-se as expansões em ε e retendo-se somente os termos até $\mathcal{O}(\varepsilon^0)$, tem-se:

$$\begin{array}{cccccc} \frac{\partial}{\partial t^*} (\rho_0^* u_{i,0}^*) & + & \frac{\partial}{\partial x_j^*} (\rho_0^* u_{i,0}^* u_{j,0}^*) & = & -\frac{\partial}{\partial x_i^*} \left(\frac{p_0}{\rho_{ref} \varepsilon RT_{ref}} + \frac{p_1}{\rho_{ref} RT_{ref}} \right) & + \frac{1}{Re_{ref}} \left(\Delta v_0^* + \frac{1}{3} \text{grad div } v_0^* \right) \\ \mathcal{O}(\varepsilon^0) & & \mathcal{O}(\varepsilon^0) & & \mathcal{O}(\varepsilon^{-1}) & \quad \mathcal{O}(\varepsilon^0) & \quad \mathcal{O}(\varepsilon^0) \end{array} \quad (2.306)$$

Assim, na equação de momento é necessário computar-se as oscilações da pressão (p_1), mesmo na aproximação de baixo Ma .

- Equação da Energia

Partindo-se da equação da energia (ref):

$$\frac{\partial \rho h}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v} h) = \frac{Dp}{Dt} + \nabla^2 \left(\frac{\mu}{\sigma_h} h \right) + \dot{Q} \quad (2.307)$$

Por simplicidade, faz-se aqui $\dot{Q} = 0$. Fazendo a adimensionalização,

$$\frac{\rho_{ref} h_{ref} U_{ref}}{L_{ref}} \frac{\partial}{\partial t^*} (\rho^* h^*) + \frac{\rho_{ref} h_{ref} U_{ref}}{L_{ref}} \nabla \cdot (\rho^* \vec{v}^* h^*) = \frac{\rho_{ref} U_{ref}^3}{L_{ref}} \frac{Dp^*}{Dt^*} + \frac{\mu}{\sigma_h} \frac{h_{ref}}{L_{ref}^2} \nabla^2 h^* \quad (2.308)$$

fazendo a equação 2.308 $\times \frac{L_{ref}}{\rho_{ref} h_{ref} U_{ref}}$

$$\frac{\partial}{\partial t^*} (\rho^* h^*) + \nabla \cdot (\rho^* \vec{v}^* h^*) = \frac{U_{ref}^2}{h_{ref}} \frac{Dp^*}{Dt^*} + \frac{\mu}{\sigma_h \rho_{ref} U_{ref} L_{ref}} \nabla^2 h^*$$

$$\frac{\partial}{\partial t^*} (\rho^* h^*) + \nabla \cdot (\rho^* \vec{v}^* h^*) = \frac{U_{ref}^2}{h_{ref}} \frac{Dp^*}{Dt^*} + \frac{1}{\sigma_h Re_{ref}} \nabla^2 h^* \quad (2.309)$$

Substituindo-se as expansões em ε e lembrando que, para produtos com dois ou mais fatores, as parcelas resultantes são de ordem $\mathcal{O}(\varepsilon^1)$, $\mathcal{O}(\varepsilon^2)$ ou $\mathcal{O}(\varepsilon^3)$ e não são retidas, tem-se:

$$\frac{\partial}{\partial t^*} (\rho_0^* h_0^*) + \nabla \cdot (\rho_0^* \vec{v}_0^* h_0^*) = \frac{U_{ref}^2}{h_{ref}} \frac{D}{Dt^*} \left(\frac{p_0}{\rho_{ref} \varepsilon RT_{ref}} + \frac{p_1}{\rho_{ref} RT_{ref}} \right) + \frac{1}{\sigma_h Re_{ref}} \nabla^2 h_0^* \quad (2.310)$$

ainda:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t^*} (\rho_0^* h_0^*) + \nabla \cdot (\rho_0^* \vec{v}_0^* h_0^*) &= \frac{M^2 \gamma RT_{ref}}{h_{ref}} \frac{1}{\rho_{ref} \varepsilon RT_{ref}} \frac{Dp_0}{Dt^*} \\ &+ \frac{M^2 \gamma RT_{ref}}{h_{ref} \rho_{ref} RT_{ref}} \frac{Dp_1}{Dt^*} + \frac{1}{\sigma_h Re_{ref}} \nabla^2 h_0^* \end{aligned} \quad (2.311)$$

ainda:

$$\begin{array}{ccccc} \frac{\partial}{\partial t^*} (\rho_0^* h_0^*) & + & \nabla \cdot (\rho_0^* \vec{v}_0^* h_0^*) & = & \frac{1}{h_{ref} \rho_{ref}} \frac{Dp_0}{Dt^*} & + & \frac{\varepsilon}{h_{ref} \rho_{ref}} \frac{Dp_1}{Dt^*} & + & \frac{1}{\sigma_h Re_{ref}} \nabla^2 h_0^* \\ \mathcal{O}(\varepsilon^0) & & \mathcal{O}(\varepsilon^0) & & \mathcal{O}(\varepsilon^0) & & \mathcal{O}(\varepsilon^1) & & \mathcal{O}(\varepsilon^0) \end{array}$$

(2.312)

Assim, o termo de ordem $\mathcal{O}(\varepsilon^1)$ pode ser desprezado na aproximação de baixo M , resultando:

$$\frac{\partial}{\partial t^*}(\rho_0^* h_0^*) + \nabla \cdot (\rho_0^* \vec{v}_0^* h_0^*) = \frac{1}{h_{ref} \rho_{ref}} \frac{Dp_0}{Dt^*} + \frac{1}{\sigma_h Re_{ref}} \nabla^2 h_0^* \quad (2.313)$$

Então, na equação da Energia, na aproximação de baixo M , as oscilações de pressão (p_1) não necessitam ser computadas. O termo $\frac{Dp_0}{Dt^*}$ representa a variação temporal da pressão hidrostática (equação 2.295). No caso de um escoamento não confinado, a pressão hidrostática não varia no tempo e o termo é nulo. No caso de escoamentos: a) confinados reativos em volume constante; b) confinados reativos ou não mas com variação do volume, o termo $\frac{Dp_0}{Dt^*}$ não é nulo e precisa ser mantido na equação 2.313.

– Resumo da aproximação de baixo Mach

1) Para todas as variáveis são feitas expansões em função do M , na forma do parâmetro $\varepsilon (= M^2 \gamma)$. Quanto menor o expoente de ε , mais significativo é o termo da expansão, uma vez que para baixo Mach, tem-se $M < 0.3$.

2) As expansões das variáveis são introduzidas nas equações de Estado, Continuidade, Momento e Energia. Para cada equação são avaliadas as ordens de grandeza ($\mathcal{O}(\varepsilon^n)$) de cada termo. Verifica-se a homogeneidade entre os lados esquerdo e direito de cada equação. Desta análise verifica-se que as oscilações de ρ , T , p , \vec{u} , h não precisam ser computadas nas equações de Estado, Continuidade e Energia. Entretanto, a flutuação de pressão (p_1) deve ser mantida na equação de Momento. Na verdade, o termo de pressão que satisfaz a equação de momento é uma soma das contribuições de p_0 e p_1 .

2.10 Formalismo de Shvab-Zel'dovich para Processos de Combustão

O formalismo de Shvab-Zel'dovich é um conjunto de simplificações das equações de conservação em processos de combustão. Este formalismo é encontrado, se não inte-

gralmente, pelo menos parcialmente em diversos códigos computacionais de combustão. As simplificações do formalismo Shvab-Zel'dovich desprezam o efeito dos seguintes termos (KUO, 1986):

- forças de corpo,
- Efeito Dufour e Soret,
- difusão devido a gradientes de pressão,
- viscosidade *bulk* e
- Efeitos viscosos dissipativos

Aplicando-se estas hipóteses simplificadoras:

- à equação do vetor fluxo de energia energia, Eq. ??, tem-se

$$\vec{J}_q = -k\nabla T + \sum_k h_k \vec{J}_k \quad (2.314)$$

- à equação do fluxo de massa da espécie k , Eq.(2.115), na forma de fração mássica:

$$\vec{J}_k = -\rho D_{k,m} \nabla Y_k \quad (2.315)$$

em que $D_{k,m}$ é o coeficiente de difusão binária da espécie k numa mistura m ;

- à equação da energia, Eq. 2.292, incluindo-se o termo \dot{Q} para a contribuição de radiação térmica e também para taxa de troca de energia entre fases dispersa e contínua, tem-se:

$$\rho \frac{Dh}{Dt} - \frac{Dp}{Dt} = -\nabla \cdot \left(-k\nabla T - \sum_k \rho D_{k,m} h_k \nabla Y_k \right) + \dot{Q} \quad (2.316)$$

XXXXXX

mas

$$\sum_k \nabla(\rho D_{k,m} h_k Y_k) = \sum_k \rho D_{k,m} h_k \nabla Y_k + \sum_k Y_k \nabla(\rho D_{k,m} h_k) \quad (2.317)$$

então

$$\rho \frac{Dh}{Dt} - \frac{Dp}{Dt} = -\nabla \cdot \left(-k \nabla T - \sum_k \nabla(\rho D_{k,m} h_k Y_k) + \sum_k Y_k \nabla(\rho D_{k,m} h_k) \right) + \dot{Q} \quad (2.318)$$

A equação da energia pode ser simplificada no assim chamado *Formalismo de Shvab-Zeldovich*. As principais aproximações desta forma da equação da energia são:

- Calor específico a pressão constante da espécie, $c_{p,i}$, não é função da temperatura e tem o mesmo valor para todas as espécies;
- Calor específico da mistura, \bar{c}_p :

$$\bar{c}_p = \sum_i Y_i c_{p,i} \quad (2.319)$$

- Difusividade de massa igual para todas as espécies, ou seja, uma mistura binária com $\rho D = \rho D_{k,m}$;
- Difusividade térmica α igual à difusividade de espécies, D , ou seja, Número de Lewis unitário: $Le \equiv \frac{\alpha}{D} = \frac{\rho c_p}{D} = 1$ que implica $k = \rho c_p D$

Uma consequência importante das duas primeiras simplificações é que a entalpia de formação das espécies, não é função da temperatura, $h_{f,i}^o \neq h_{f,i}^o(T)$, (ver livro do Kenneth Kuo, pg 50). Assim,

$$h_i = h_{f,i}^o + c_{p,i} \int_{T_{ref}}^T dT \quad (2.320)$$

e a entalpia absoluta da mistura:

$$h = \sum_i Y_i h_i = \sum_i Y_i h_{f,i}^o + \bar{c}_p \int_{T_{ref}}^T dT \quad (2.321)$$

em que a eq.(2.319) foi usada para o calor específico a pressão constante da mistura.

Assim a eq.(2.318) pode ser re-escrita como

$$\rho \frac{Dh}{Dt} - \frac{Dp}{Dt} = -\nabla \cdot \left(-k\nabla T - \rho D \underbrace{\sum_k \nabla(h_k Y_k)}_{\nabla h} + \rho D \sum_k Y_k \nabla h_k \right) + \dot{Q} \quad (2.322)$$

O termo $\sum_k Y_k \nabla(h_k)$ da eq.(2.322) pode ser reescrito como:

$$\begin{aligned} \sum_k Y_k \nabla h_k &= \sum_k Y_k \nabla \left(h_{f,k}^o + c_{p,k} \int_{T_{ref}}^T dT \right) = \sum_k Y_k \nabla \left(c_{p,k} \int_{T_{ref}}^T dT \right) \\ &= \sum_k Y_k c_{p,k} \nabla \left(\int_{T_{ref}}^T dT \right) \\ &= \bar{c}_p \nabla \left(\int_{T_{ref}}^T dT \right) \\ &= \bar{c}_p \nabla T \end{aligned} \quad (2.323)$$

assim, a eq.(2.322) pode ser reescrita:

$$\rho \frac{Dh}{Dt} - \frac{Dp}{Dt} = -\nabla \cdot (-k\nabla T - \rho D \nabla h + \rho D \bar{c}_p \nabla T) + \dot{Q} \quad (2.324)$$

com a quarta simplificação re-escreve-se o termo oriundo da Lei de Fourier na forma $-k\nabla T = -\rho D \bar{c}_p \nabla T$ e então:

$$\rho \frac{Dh}{Dt} - \frac{Dp}{Dt} = -\nabla \cdot (-\rho D \bar{c}_p \nabla T - \rho D \nabla h + \rho D \bar{c}_p \nabla T) + \dot{Q} \quad (2.325)$$

que simplifica para

$$\underbrace{\rho \frac{Dh}{Dt}}_A - \frac{Dp}{Dt} = -\underbrace{\nabla \cdot (-\rho D \nabla h)}_B + \dot{Q} \quad (2.326)$$

O termo A pode ser reescrito usando-se a eq.(2.160) e a equacao da continuidade, eq.(2.159)na forma:

$$\begin{aligned}
\rho \frac{Dh}{Dt} &= \rho \frac{\partial h}{\partial t} + \rho \vec{v} \cdot \nabla h \\
&= \rho \frac{\partial h}{\partial t} + \rho \vec{v} \cdot \nabla \left(\sum_k Y_k h_k \right) \\
&= \rho \frac{\partial h}{\partial t} + \rho \vec{v} \cdot \nabla \left(\sum_k Y_k \left(h_{f,k}^o + c_{p,k} \int_{T_{ref}}^T dT \right) \right) \\
&= \rho \frac{\partial h}{\partial t} + \rho \vec{v} \cdot \nabla \left(\sum_k Y_k h_{f,k}^o + \bar{c}_p \int_{T_{ref}}^T dT \right) \\
&= \rho \frac{\partial h}{\partial t} + \rho \sum_k h_{f,k}^o \vec{v} \cdot \nabla Y_k + \rho \bar{c}_p \vec{v} \cdot \nabla T
\end{aligned} \tag{2.327}$$

Com a mesma manipulaao do termo ∇h feita na eq.(2.327), o termo B pode ser re-escrito para:

$$\nabla \cdot (\rho D \nabla h) = \nabla \cdot \left(\rho D \left(\sum_k h_{f,k}^o \nabla Y_k + \bar{c}_p \nabla T \right) \right) \tag{2.328}$$

substituindo-se as eqs. (2.327) e (2.328) na eq.(2.326) tem-se

$$\rho \frac{\partial h}{\partial t} + \underbrace{\rho \sum_k h_{f,k}^o \vec{v} \cdot \nabla Y_k + \rho \bar{c}_p \vec{v} \cdot \nabla T}_C - \frac{Dp}{Dt} = \nabla \cdot \left(\rho D \left(\sum_k h_{f,k}^o \nabla Y_k + \bar{c}_p \nabla T \right) \right) + \dot{Q} \tag{2.329}$$

o termo C pode ser re-escrito utilizando novamente a hipotese que a entalpia de formaao seja um valor constante

$$\underbrace{\rho \sum_k h_{f,k}^o \vec{v} \cdot \nabla Y_k}_C = \underbrace{\rho \vec{v} \cdot \nabla \left(\sum_k h_{f,k}^o Y_k \right)}_C \tag{2.330}$$

e com uso da equacao da continuidade, eq.(2.159) tem-se:

$$\underbrace{\rho \vec{v} \cdot \nabla \left(\sum_k h_{f,k}^o Y_k \right)}_C = \nabla \cdot \left(\rho \vec{v} \sum_k h_{f,k}^o Y_k \right) + \sum_k h_{f,k}^o Y_k \frac{\partial \rho}{\partial t} \quad (2.331)$$

assim a eq.(2.329) torna-se:

$$\underbrace{\rho \frac{\partial h}{\partial t}}_{D1} + \nabla \cdot \left(\rho \vec{v} \sum_k h_{f,k}^o Y_k \right) + \underbrace{\sum_k h_{f,k}^o Y_k \frac{\partial \rho}{\partial t}}_{D2} + \rho \bar{c}_p \vec{v} \cdot \nabla T - \frac{Dp}{Dt} = \nabla \cdot \left(\rho D \left(\sum_k h_{f,k}^o \nabla Y_k + \bar{c}_p \nabla T \right) \right) + \dot{Q} \quad (2.332)$$

os termos $D1$ e $D2$ podem ser reescritos na forma:

$$\begin{aligned} \underbrace{\rho \frac{\partial h}{\partial t}}_{D1} + \underbrace{\sum_k h_{f,k}^o Y_k \frac{\partial \rho}{\partial t}}_{D2} &= \rho \frac{\partial}{\partial t} \left(\sum_k h_k Y_k \right) + \sum_k h_{f,k}^o Y_k \frac{\partial \rho}{\partial t} \\ &= \rho \frac{\partial}{\partial t} \left(\sum_k Y_k h_{f,k}^o + \bar{c}_p \int_{T_{ref}}^T dT \right) + \sum_k h_{f,k}^o Y_k \frac{\partial \rho}{\partial t} \\ &= \rho \sum_k h_{f,k}^o \frac{\partial Y_k}{\partial t} + \rho \bar{c}_p \frac{\partial T}{\partial t} + \sum_k h_{f,k}^o Y_k \frac{\partial \rho}{\partial t} \end{aligned} \quad (2.333)$$

assim a eq.(2.332) torna-se:

$$\begin{aligned} \rho \sum_k h_{f,k}^o \frac{\partial Y_k}{\partial t} + \rho \bar{c}_p \frac{\partial T}{\partial t} + \sum_k h_{f,k}^o Y_k \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\rho \vec{v} \sum_k h_{f,k}^o Y_k \right) + \rho \bar{c}_p \vec{v} \cdot \nabla T - \frac{Dp}{Dt} \\ = \nabla \cdot \left(\rho D \left(\sum_k h_{f,k}^o \nabla Y_k + \bar{c}_p \nabla T \right) \right) + \dot{Q} \end{aligned} \quad (2.334)$$

agrupando-se os termos com temperatura e entalpia de formação,

$$\begin{aligned} \rho \bar{c}_p \frac{\partial T}{\partial t} + \rho \bar{c}_p \vec{v} \cdot \nabla T - \nabla \cdot (\rho D \bar{c}_p \nabla T) - \frac{Dp}{Dt} \\ = -\rho \sum_k h_{f,k}^o \frac{\partial Y_k}{\partial t} - \sum_k h_{f,k}^o Y_k \frac{\partial \rho}{\partial t} - \nabla \cdot \left(\rho \vec{v} \sum_k h_{f,k}^o Y_k \right) + \nabla \cdot \left(\rho D \sum_k h_{f,k}^o \nabla Y_k \right) + \dot{Q} \end{aligned} \quad (2.335)$$

ou ainda

$$\begin{aligned}
& \rho \bar{c}_p \frac{\partial T}{\partial t} + \rho \bar{c}_p \vec{v} \cdot \nabla T - \nabla \cdot (\rho D \bar{c}_p \nabla T) - \frac{Dp}{Dt} \\
= & -\rho \sum_k h_{f,k}^o \frac{\partial Y_k}{\partial t} - \sum_k h_{f,k}^o Y_k \frac{\partial \rho}{\partial t} - \nabla \cdot \left(\rho \vec{v} \sum_k h_{f,k}^o Y_k \right) + \nabla \cdot \left(\rho D \sum_k h_{f,k}^o \nabla Y_k \right) + \dot{Q} \quad (2.336)
\end{aligned}$$

usando mais uma vez a hipotese de entalpia de formacao constante,

$$\begin{aligned}
& \rho \bar{c}_p \frac{\partial T}{\partial t} + \rho \bar{c}_p \vec{v} \cdot \nabla T - \nabla \cdot (\rho D \bar{c}_p \nabla T) - \frac{Dp}{Dt} \\
= & - \sum_k h_{f,k}^o \left(\underbrace{\rho \frac{\partial Y_k}{\partial t} + Y_k \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v} Y_k) - \nabla \cdot (\rho D \nabla Y_k)}_{\frac{\partial(\rho Y_k)}{\partial t}} \right) + \dot{Q} \\
= & - \sum_k h_{f,k}^o \left(\underbrace{\frac{\partial(\rho Y_k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v} Y_k) - \nabla \cdot (\rho D \nabla Y_k)}_E \right) + \dot{Q} \quad (2.337)
\end{aligned}$$

o termo E é a taxa líquida de produção/consumo da espécie k nas reações químicas, veja ??, então:

$$\rho \bar{c}_p \frac{\partial T}{\partial t} + \rho \bar{c}_p \vec{v} \cdot \nabla T - \nabla \cdot (\rho D \bar{c}_p \nabla T) - \frac{Dp}{Dt} = - \sum_k h_{f,k}^o \left(\sum_{j=1}^r \nu_{kj} J_j \right) + \dot{Q} \quad (2.338)$$

novamente usando-se a equação da continuidade chega-se à **Equação da Energia de Shvab-Zeldovich**:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \bar{c}_p T) + \nabla \cdot (\rho \bar{c}_p \vec{v} T) - \nabla \cdot (\rho D \bar{c}_p \nabla T) - \frac{Dp}{Dt} = - \sum_k h_{f,k}^o \left(\sum_{j=1}^r \nu_{kj} J_j \right) + \dot{Q} \quad (2.339)$$

É interessante verificar esta equação para um escoamento com baixo Ma e sem transferência de calor, ($\dot{Q} = 0$), por exemplo sem radiação térmica ou troca de calor entre fase líquida e gasosa. Para o escoamento com baixo Ma , pode-se mostrar que o termo da pressão é associado à variação temporal local da pressão hidrostática, que por sua vez pode ser negligenciada. Assim,

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \bar{c}_p T) + \nabla \cdot (\rho \bar{c}_p \vec{v} T) - \nabla \cdot (\rho D \bar{c}_p \nabla T) = - \sum_k h_{f,k}^o \left(\sum_{j=1}^r \nu_{kj} J_j \right) \quad (2.340)$$

ou ainda

$$\underbrace{\frac{\partial}{\partial t} (\rho \bar{c}_p T)}_I = - \underbrace{\nabla \cdot (\rho \bar{c}_p \vec{v} T)}_{II} + \underbrace{\nabla \cdot (\rho D \bar{c}_p \nabla T)}_{III} - \underbrace{\sum_k h_{f,k}^o \left(\sum_{j=1}^r \nu_{kj} J_j \right)}_{IV} \quad (2.341)$$

Em palavras, esta equação diz que a taxa de variação temporal da entalpia sensível da mistura gasosa no volume de controle, termo I , é igual ao fluxo líquido de entalpia sensível nas faces do volume de controle, por advecção, termo II , e difusão, termo III , mais a taxa líquida de conversão de entalpia de formação em entalpia sensível, devido às reações químicas, termo IV .

Com a aproximação de baixo Ma e sem transferência de calor, ($\dot{Q} = 0$), a Equação da Energia de Shvab-Zel'Dovich na forma da entalpia absoluta, eq.(Eq. 2.326), torna-se:

$$\rho \frac{Dh}{Dt} = \nabla \cdot (\rho D \nabla h) \quad (2.342)$$

Observando esta equação, nota-se que a entalpia absoluta é um escalar conservativo. Lembre-se que as reações químicas transformam entalpia de formação em entalpia sensível, eq.(2.341), mas a entalpia absoluta da mistura, se ($\dot{Q} = 0$), é sempre conservada.

Capítulo 3

Modelos de Combustão Laminar

Guenther Carlos Krieger Filho

As reações químicas do processo de combustão são fortemente acopladas aos demais processos envolvidos em um escoamento reativo. Como resultado direto dessas reações encontram-se o aumento da temperatura no escoamento e a alteração da composição química da mistura. A implicação deste resultado nas equações que governam o escoamento é a inclusão de termos fontes nas equações de conservação de energia e de espécies químicas, assim como na alteração de propriedades termodinâmicas e de transporte da mistura gasosa. Para escoamentos turbulentos, em que se calculam valores médios ou filtrados, surgem os problemas citados por Jones e Whitelaw (1982) e que serão discutidos no Capítulo 4.3. Esses autores ressaltam a importância da modelagem das flutuações turbulentas para a determinação dos termos fontes das equações de conservação das espécies químicas para casos de escoamentos com reações químicas. Uma das formas para se solucionar este problema é a definição da fração de mistura, que pode ser usada para gerar uma equação de conservação de espécies químicas sem termos fonte (TURNS, 2000). A definição da fração de mistura originalmente foi feita para casos onde apenas uma única reação global, estequiométrica e infinitamente rápida fosse considerada. A Equação 3.1 apresenta uma equação global genérica para a definição da fração de mistura.

$$1 \text{ kg de combustível} + s \text{ kg de oxidante} \rightarrow (1 + s) \text{ kg de produtos.} \quad (3.1)$$

Admitindo que a equação de reação global genérica ocorra em quantidades estequiométricas das espécies envolvidas, a razão estequiométrica de oxidante/combustível em massa é dada por s . Nesse caso, tem-se que a taxa de consumo de combustível ($\dot{\omega}_f$) em relação à taxa de consumo de oxidante ($\dot{\omega}_{ox}$) pode ser dada por

$$\dot{\omega}_f = \frac{1}{s} \dot{\omega}_{ox}. \quad (3.2)$$

Baseando-se na Equação ??, pode-se escrever as equações das frações mássicas para o combustível (subscrito f) e para o oxidante (subscrito ox) como

$$\frac{\partial \rho Y_f}{\partial t} + \frac{\partial \rho Y_f u_j}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho D_f \frac{\partial Y_f}{\partial x_j} \right) + \dot{\omega}_f, \quad (3.3)$$

$$\frac{\partial \rho Y_{ox}}{\partial t} + \frac{\partial \rho Y_{ox} u_j}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho D_{ox} \frac{\partial Y_{ox}}{\partial x_j} \right) + \dot{\omega}_{ox}. \quad (3.4)$$

Definindo a variável φ como

$$\varphi = s Y_f - Y_{ox}, \quad (3.5)$$

e admitindo que os coeficientes de difusão mássica para o combustível e para o oxidante são iguais ($\rho D_f = \rho D_{ox} = \rho D = \Gamma_\varphi$), ao se subtrair a Equação 3.4 da Equação 3.3, chega-se à equação

$$\frac{\partial \rho \varphi}{\partial t} + \frac{\partial \rho \varphi u_j}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\Gamma_\varphi \frac{\partial \varphi}{\partial x_j} \right). \quad (3.6)$$

Turns (2000) define φ como um escalar conservativo, pois sua equação de transporte não possui termo fonte. Ao se normalizar esse escalar, obtém-se então a fração de mistura

$$f = \frac{\varphi - \varphi_0}{\varphi_1 - \varphi_0} = \frac{(sY_f - Y_{ox}) - (sY_f - Y_{ox})_0}{(sY_f - Y_{ox})_1 - (sY_f - Y_{ox})_0}, \quad (3.7)$$

onde o subscrito $(.)_1$ refere-se a um ponto do escoamento onde a fração mássica de combustível é máxima e o subscrito $(.)_0$ é associado a um ponto onde a presença de oxidante é máxima. Desse modo, partindo-se da Equação 3.6 a equação de transporte para a fração de mistura pode ser dada por

$$\frac{\partial \rho f}{\partial t} + \frac{\partial \rho f u_j}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\Gamma_f \frac{\partial f}{\partial x_j} \right). \quad (3.8)$$

Ao se fazer a sua média temporal, com a utilização da decomposição de Favre para a modelagem de escoamentos turbulentos, chega-se em

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{f}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{f} \tilde{u}_j}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\Gamma_f \frac{\partial \tilde{f}}{\partial x_j} \right). \quad (3.9)$$

3.1 Modelo de Folha de Chama (*Flame sheet*)

Versteeg e Malalasekera (2007) consideram que, em estudos cujo interesse se restringe à compreensão global do processo de combustão e à concentração final das espécies químicas predominantes, a simplificação por uma única reação global pode ser aplicada. O modelo de folha de chama (em inglês *Flame sheet*) (TURNS, 2000) considera que a reação global da oxidação do combustível de interesse é infinitamente rápida e ocorre em proporção estequiométrica. Assim sendo, para a determinação das características desse modelo é necessária a definição da equação de reação global do combustível de interesse. Para ilustrar a formulação e os resultados fornecidos pelo modelo de folha de chama é apresentada a reação de combustão estequiométrica do etanol, combustível usado nas simulações que serão discutidas no Capítulo 9.



onde os coeficientes que multiplicam as fórmulas químicas correspondem ao seu número de moles na reação. Para a determinação da razão estequiométrica de oxidante/combustível em massa (s), utilizada na Equação 3.1, é necessário o conhecimento da massa molar do etanol (C_2H_5OH) e do oxigênio (O_2) que são dadas respectivamente por 46,0 kg/kmol e 32,0 kg/kmol. Desse modo, s pode ser calculada

$$s = \frac{n_{O_2} Mw_{O_2}}{n_{C_2H_5OH} Mw_{C_2H_5OH}} = \frac{3,00 \times 32,00}{1,00 \times 46,00} = 2,09, \quad (3.11)$$

onde n_k é o número de moles da espécie k e Mw_k é a massa molar da espécie k . O modelo de folha de chama assume que as reações químicas somente ocorrem quando a mistura é estequiométrica, assim quando esta proporção é atingida no escoamento, não há a presença simultânea de combustível e de oxidante. Além disso, quando a fração de mistura é maior que o seu valor na proporção estequiométrica a mistura contém apenas combustível e inertes. Reciprocamente, quando a fração de mistura é menor que seu valor estequiométrico há, apenas, oxidante e inertes. De acordo com esta definição, a Equação 3.7 pode ser reescrita da seguinte forma:

$$f = \frac{(sY_f - Y_{ox}) - (-Y_{ox,0})}{(sY_{f,1}) - (-Y_{ox,0})} = \frac{sY_f - Y_{ox} + Y_{ox,0}}{sY_{f,1} + Y_{ox,0}}. \quad (3.12)$$

A fração de mistura estequiométrica, f_{st} , é definida por

$$f_{st} = \frac{Y_{ox,0}}{sY_{f,1} + Y_{ox,0}}. \quad (3.13)$$

Para a região da mistura pobre, tem-se

$$f = \frac{-Y_{ox} + Y_{ox,0}}{sY_{f,1} + Y_{ox,0}}, \quad (3.14)$$

e, para a de mistura rica,

$$f = \frac{sY_f + Y_{ox,0}}{sY_{f,1} + Y_{ox,0}}. \quad (3.15)$$

Com a substituição dos valores relacionados à reação de interesse, pode ser montada uma tabela que relaciona a fração mássica das espécies envolvidas na reação com a fração de mistura. Considerando um sistema de combustão com etanol puro como combustível e ar como comburente com $Y_{ox_0} = 0,233$, com uma reação global estequiométrica de etanol, obtém-se as curvas mostradas na Figura 3.1.

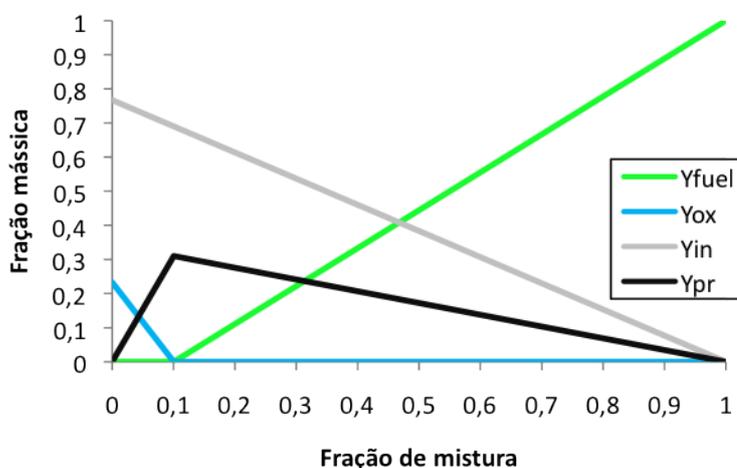


Figura 3.1 – Fração mássica das espécies em função da fração de mistura.

A temperatura da mistura se relaciona através da entalpia absoluta da seguinte forma:

$$T = \frac{h - \sum_k [Y_k (h_k^0 - c_{p,k} T_0)]}{\sum_k Y_k c_{p,k}}, \quad (3.16)$$

onde T é a temperatura da mistura e $c_{p,k}$ é o calor específico sensível da espécie k . Ao normalizar-se a Equação ?? com os valores máximos e mínimos da entalpia total do escoamento, chega-se em

$$h^* = \frac{h - h_{ox,0}}{h_{f,1} - h_{ox,0}}. \quad (3.17)$$

Substituindo esta entalpia normalizada na Equação ?? chega-se que a equação de transporte resultante é semelhante à equação de transporte da fração de mistura e assim, escreve-se a relação

$$f = h^* = \frac{h - h_{ox,0}}{h_{f,1} - h_{ox,0}}. \quad (3.18)$$

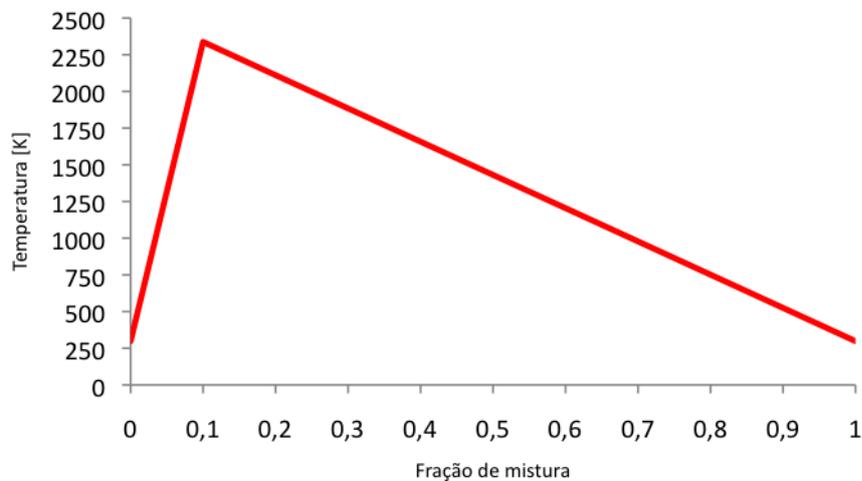


Figura 3.2 – Temperatura da mistura em função da fração de mistura.

A massa específica pode ser escrita em função da temperatura, a qual é mostrada na Figura 3.2. A massa específica da mistura pode ser obtida através da equação dos gases perfeitos:

$$\rho = \frac{p}{R_u T \sum_k \frac{Y_k}{Mw_k}}, \quad (3.19)$$

onde p é a pressão e R_u é constante universal dos gases perfeitos.

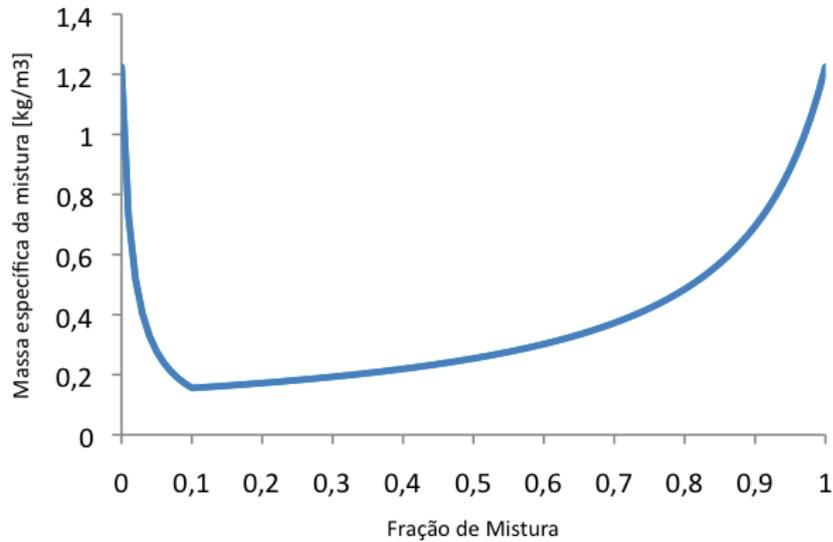


Figura 3.3 – Massa específica da mistura em função da fração de mistura.

Portanto, no modelo de folha de chama, apenas com o transporte da fração de mistura é definida não apenas a composição da mistura, como também é feita a representação da reação de combustão, que determina a temperatura e a massa específica da fase gasosa.

Entretanto, na formulação deste modelo, a reação é considerada adiabática, o que não permite a representação do fenômeno de resfriamento evaporativo de sprays, por exemplo. Deste modo, para que o resfriamento evaporativo pudesse ser representado foi feita uma adaptação no modelo folha de chama para considerar a redução de entalpia sensível do escoamento causada pela evaporação de gotículas de spray de combustível. A adaptação do modelo de folha de chama original pode ser feita com a consideração que a temperatura e massa específica da mistura gasosa seriam dependentes da fração de mistura e da entalpia. Com a representação do resfriamento evaporativo, a aproximação apresentada na Equação 3.18 não é mais válida, pois tanto a fração de mistura quanto a entalpia deixam de ser escalares conservativos. Em uma simulação com spray, a fase gasosa é acoplada à fase dispersa através da adição de termos fonte em suas equações de transporte, tornando a fração de mistura e a entalpia escalares não conservativos. Nesta adaptação as frações mássicas das espécies envolvidas na reação continuaram a ser dependentes apenas da fração de mistura, da mesma forma que no modelo original,

não havendo portanto alteração das reações químicas devido ao resfriamento evaporativo. Com a adaptação proposta, os valores de temperatura e massa específica da fase gasosa foram definidos entre duas condições limite, a condição adiabática e a condição em que um valor máximo de entalpia sensível é retirado do escoamento. Para a definição da condição limite não adiabática foi feita a hipótese de que toda a massa de combustível presente na reação foi proveniente da evaporação da fase líquida. Dessa forma é possível definir as curvas de temperatura da mistura para a reação adiabática e para a não adiabática, as quais são apresentadas na Figura 3.4.

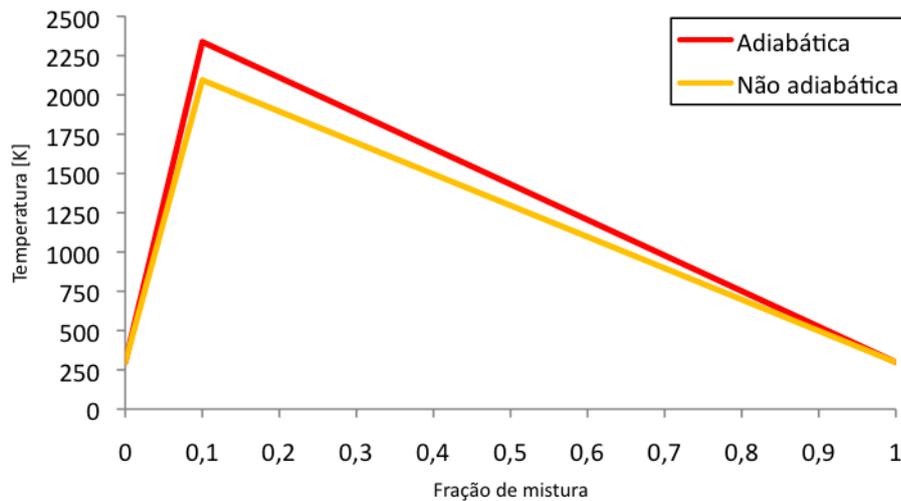


Figura 3.4 – Temperatura da mistura em função da fração de mistura para a reação adiabática e a não adiabática.

Nesse modelo de folha de chama adaptado, os valores da temperatura e massa específica em condições intermediárias são aproximados por interpolações lineares entre os valores dessas grandezas nas curvas limitantes, em função da entalpia absoluta normalizada e da fração de mistura. Com esta adaptação é possível contabilizar os efeitos do resfriamento evaporativo em um sistema de combustão com spray usando o modelo de combustão de folha de chama.

3.2 Modelo de Equilíbrio Químico

Nas aplicações mostradas no Capítulo 9, além do modelo de folha de chama, também o modelo de equilíbrio químico foi utilizado para relacionar a fração de mistura com a temperatura, densidade e frações mássicas das espécies. Este modelo não será apresentado detalhadamente aqui e somente seus aspectos principais serão comentados.

O modelo de equilíbrio químico fundamenta-se na aplicação, para uma mistura reativa, da 2ª lei da termodinâmica, que diz que para um sistema termodinamicamente isolado, o estado de equilíbrio é o de máxima entropia. Para sistemas com pressão termodinâmica constante, é mais comum utilizar-se o mesmo enunciado na forma da minimização da energia livre de Gibbs da mistura (G). A definição da energia livre de Gibbs da mistura é

$$G = H - TS. \quad (3.20)$$

O estado de equilíbrio que a mistura reativa atingirá espontaneamente, num sistema de massa, pressão e temperatura constantes, deve satisfazer

$$(dG)_{P,T,m} \leq 0, \quad (3.21)$$

ou seja, para uma mistura num reator, onde P , T e massa são fixos, todo processo só pode ocorrer na direção em que haja diminuição da energia livre de Gibbs. Para uma mistura de gases ideais, pode-se avaliar a energia livre de Gibbs para a espécie i num reator com P , T e massa fixos, por

$$\bar{g}_i(T) = \bar{g}^o(T) + TR_u \ln \left(\frac{P_i}{P_o} \right). \quad (3.22)$$

na qual o superescrito o indica a pressão termodinâmica de referência e P_i é a pressão parcial da espécie i . A energia livre de Gibbs para a mistura de gases é então

$$G_{mist} = \sum N_i \bar{g}_{i,T} = \sum N_i \left[\bar{g}_{i,T}^o + R_u T \ln \left(\frac{P_i}{P_o} \right) \right], \quad (3.23)$$

em que N_i é o número de mols da espécie i na mistura. Substituindo-se a Equação (3.23) na Equação (3.21)

$$\underbrace{\sum dN_i \left[\bar{g}_{i,T}^o + R_u T \ln \left(\frac{P_i}{P_o} \right) \right]}_A + \underbrace{\sum N_i d \left[\bar{g}_{i,T}^o + R_u T \ln \left(\frac{P_i}{P_o} \right) \right]}_B = 0 \quad (3.24)$$

O termo B é nulo pois $d(\ln P_i) = dP_i/P_i$, mas $\sum dP_i = 0$, e então:

$$dG_{mist} = 0 = \sum dN_i \left[\bar{g}_{i,T}^o + R_u T \ln \left(\frac{P_i}{P^o} \right) \right] \quad (3.25)$$

Para uma reação global genérica na forma



a alteração no número de moles é proporcional ao coeficiente estequiométrico:

$$\begin{aligned} dN_A &= -ka \\ dN_B &= -kb \\ &\vdots \\ dN_E &= +ke \\ dN_F &= +kf. \end{aligned} \quad (3.27)$$

Substituindo-se 3.27 em 3.25, tem-se:

$$\begin{aligned} &-a \left[\bar{g}_{A,T}^o + R_u T \ln \left(\frac{P_A}{P^o} \right) \right] - b \left[\bar{g}_{B,T}^o + R_u T \ln \left(\frac{P_B}{P^o} \right) \right] - \dots \\ &+ e \left[\bar{g}_{E,T}^o + R_u T \ln \left(\frac{P_E}{P^o} \right) \right] + f \left[\bar{g}_{F,T}^o + R_u T \ln \left(\frac{P_F}{P^o} \right) \right] + \dots = 0 \end{aligned} \quad (3.28)$$

re-agrupando, tem-se:

$$-\underbrace{(e\bar{g}_{E,T}^o + f\bar{g}_{F,T}^o + \dots - a\bar{g}_{A,T}^o - b\bar{g}_{B,T}^o - \dots)}_A = R_u T \ln \underbrace{\frac{(P_E/P^o)^e (P_F/P^o)^f \dots}{(P_A/P^o)^a (P_B/P^o)^b \dots}}_B \quad (3.29)$$

O termo A é definido como a variação da energia de Gibbs padrão entre reagentes e produtos (ΔG_T^o):

$$\Delta G_T^o \equiv (e\bar{g}_{E,T}^o + f\bar{g}_{F,T}^o + \dots - a\bar{g}_{A,T}^o - b\bar{g}_{B,T}^o - \dots) \quad (3.30)$$

para $T = T_{ref}$

$$\Delta G_T^o = (e\bar{g}_{f,E}^o + f\bar{g}_{f,F}^o + \dots - a\bar{g}_{f,A}^o - b\bar{g}_{f,B}^o - \dots)_{T_{ref}=T} \quad (3.31)$$

O termo B é definido como a constante de equilíbrio (Kp)

$$Kp \equiv \frac{(P_E/P^o)^e \cdot (P_F/P^o)^f \dots}{(P_A/P^o)^a \cdot (P_B/P^o)^b \dots} \quad (3.32)$$

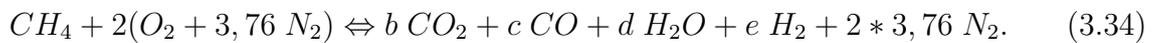
Assim, o estado de equilíbrio químico, para uma dada P e T , fica definido por:

$$\Delta G_T^o = -R_u T \ln(Kp) \quad (3.33)$$

Para sistemas complexos com mais de uma reação global, pode-se escrever a Equação(3.33) para cada uma das reações. O lado esquerdo desta equação é somente função de propriedades termodinâmicas da mistura e dos coeficientes estequiométricos da reação global. Estes valores são facilmente encontrados na literatura de termodinâmica.

O modelo de equilíbrio químico é mais completo que o de folha de chama por não impedir a coexistência de oxidante e combustível para fração de mistura estequiométrica, além de permitir reações de dissociação.

Para exemplificar a aplicação do modelo de equilíbrio químico, considere a combustão de metano (CH_4) em ar, na proporção estequiométrica, pressão termodinâmica constante e sistema adiabático:



Deseja-se saber as pressões parciais da mistura, calculada com os coeficientes b, c, d e e e sua temperatura no equilíbrio químico. Assim o problema tem 5 incógnitas. O sistema de equações a ser resolvido é composto por:

- 1ª lei da termodinâmica para a mistura

Aplica-se a 1ª lei da termodinâmica para um sistema adiabático e a pressão constante, na forma

$$H_{reagentes} = H_{produtos}, \quad (3.35)$$

ou seja, a entalpia absoluta dos reagentes $H_{reagentes}$ é igual à entalpia absoluta dos produtos $H_{produtos}$.

- Balanço atômico para os elementos C, H e O .

É claro que se não fosse permitida a dissociação de CO_2 , como no modelo de folha de chama, os coeficientes $b = 1$ e $d = 2$ seriam determinados diretamente do balanço atômico para os elementos C e H e o sistema estaria determinado. Considerando-se a dissociação, o balanço atômico para os elementos C , H e O fornece-se três equações para o sistema:

$$1 = b + c, \quad (3.36)$$

$$4 = 2d + 2e \quad (3.37)$$

e

$$4 = 2b + c + d \quad (3.38)$$

- 2ª lei da termodinâmica, ou equilíbrio químico, na forma da Equação (3.33)

A última equação vem da aplicação do equilíbrio químico à reação de dissociação de CO_2 , conhecida como reação de deslocamento gás-água:



A equação do equilíbrio químico, Equação (3.33), para esta reação é:

$$Kp \equiv \frac{(P_{CO_2}/P^o) \cdot (P_{H_2}/P^o)}{(P_{CO}/P^o) \cdot (P_{H_2O}/P^o)} = \frac{(b/N_T) \cdot (e/N_T)}{(c/N_T) \cdot (d/N_T)} = \frac{be}{cd}, \quad (3.40)$$

em que N_T é o número total de mols da mistura. Kp , como já dito, é obtido de tabelas termodinâmicas em função da temperatura da mistura.

Assim, resolve-se o sistema iterativamente e são obtidas as pressões parciais das espécies e a temperatura.

É bastante comum utilizar-se a grandeza fração de mistura em conjunto com o modelo de equilíbrio químico. A fração de mistura é uma grandeza conservativa e portanto pode ser associada aos elementos químicos presentes na mistura. Assim pode-se (KUO,

1986) relacionar a massa dos elementos C , H e O diretamente ao valor da fração de mistura. Com esta formulação pode-se obter a estrutura da chama laminar em função da fração de mistura como mostrado na figura a seguir.

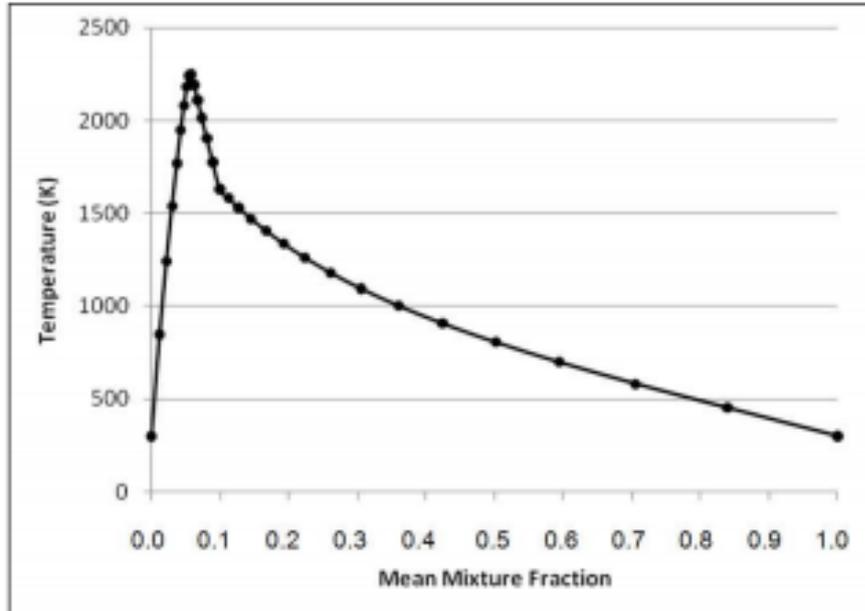


Figura 3.5 – Evolução da temperatura com a fração de mistura usando o modelo de equilíbrio químico.

É importante ressaltar que o modelo de equilíbrio químico não leva em consideração a dimensão temporal. O resultado da aplicação da 1ª e da 2ª leis da termodinâmica e da conservação da massa indica a temperatura e frações mássicas das espécies presentes no sistema reativo, independente do tempo disponível para a reação atingir o estado de equilíbrio termodinâmico. Os modelos de combustão folha de chama e de equilíbrio químico adotam a hipótese fundamental que o tempo característico das reações químicas do processo de combustão (τ_{chem}) é infinitamente menor que o tempo característico dos processos de transporte por advecção e difusão no escoamento (τ_{flow}). O número adimensional que expressa esta razão é o Número de Damköhler (Da) definido como

$$Da = \frac{\tau_{flow}}{\tau_{chem}}. \quad (3.41)$$

Os modelos folha de chama e equilíbrio químico são válidos em processos de combustão

nos quais $Da \rightarrow \infty$. Em situações em que processos transitórios sejam relevantes, como ignição e extinção, esta aproximação não é válida.

3.3 Modelo de Elemento de Chama (*Flamelet*)

Além dos modelos de folha de chama e de equilíbrio químico, utiliza-se amplamente o modelo de Elemento de Chama Laminar, em inglês *Laminar Flamelet*, que será discutido nesta secção. Este modelo é mais completo que os dois anteriores, por incluir a dimensão temporal. Assim, o modelo estabelece uma relação entre os tempos característicos das reações químicas e do escoamento numa chama laminar. Esta estrutura de chama laminar será utilizada também nos modelo de combustão turbulenta.

O modelo de Elemento de Chama Laminar relaxa a hipótese de $Da \rightarrow \infty$ e, portanto, é mais geral que os modelos de folha de chama e equilíbrio químico. A hipótese fundamental do modelo de Elemento de Chama Laminar é que, para grandes valores de Da , as reações de combustão ocorrem numa camada, de pequena espessura, na vizinhança da superfície de fração de mistura estequiométrica, $f = f_{st}$. Como consequência, os gradientes da fração de mistura, na vizinhança de $f = f_{st}$ são extremamente elevados. As equações básicas do modelo de Elemento de Chama Laminar são as equações de conservação da energia ?? e da fração de mistura 3.8. A equação da energia (??) pode ser reescrita na forma da equação da temperatura da mistura. Por simplicidade, adota-se um valor fixo de calor específico a pressão constante. Adicionalmente, mantém-se o termo de variação temporal da entalpia da mistura e utilizam-se as simplificações para escoamentos de baixo Numero de Mach, ou seja, são negligenciados os gradientes espaciais da pressão e os efeitos de dissipação viscosa. Com estas modificacoes, tem-se a equação da temperatura da mistura

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} + \rho c_p u_j \frac{\partial T}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho c_p D \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) - \sum_{i=1}^N h_{f,i}^o \dot{\omega}_i + \frac{\partial p}{\partial t}, \quad (3.42)$$

A solução da equação de transporte da fração de mistura, com as devidas condições de contorno, possibilita a determinação do lugar geométrico dos pontos de fração de mis-

tura estequiométrica, ou seja,

$$f(x_i, t) = f_{st} \quad (3.43)$$

No modelo de Elemento de Chama Laminar faz-se a hipótese que as reações ocorrem numa fina camada na vizinhança da superfície definida pela Equação 3.43 e assim define-se um sistema de coordenadas ortogonais local $\zeta_1, \zeta_2, \zeta_3, t$ solidário com esta superfície de fração de mistura estequiométrica. Neste sistema de coordenadas local, a direção ζ_1 é normal à superfície $f = f_{st}$ e as direções ζ_2, ζ_3 são tangentes à mesma superfície. Para introduzir a fração de mistura no sistema de coordenadas, transforma-se a direção ζ_1 em f e o sistema de coordenadas torna-se $f, \zeta_2, \zeta_3, \tau$. As regras da transformação do sistema de coordenadas ortogonais local são:

$$\frac{\partial}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial \tau} + \frac{\partial f}{\partial t} \frac{\partial}{\partial f} \quad (3.44)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_1} = \frac{\partial f}{\partial \zeta_1} \frac{\partial}{\partial f} \quad (3.45)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial \zeta_i} + \frac{\partial f}{\partial \zeta_i} \frac{\partial}{\partial f} \quad (3.46)$$

com $i = 2, 3$. As regras de transformação são aplicadas à equação da temperatura (Equação 3.42). Adicionalmente, faz-se a aproximação de que a velocidade na direção ζ_1 é desprezível em relação às outras. Admite-se também que $\rho D \neq \rho(f)D(f)$. Chega-se, então à equação da temperatura

$$\rho \left(\frac{\partial T}{\partial \tau} + u_2 \frac{\partial T}{\partial x_2} + u_3 \frac{\partial T}{\partial x_3} \right) = \quad (3.47)$$

$$\rho D \left[\left(\sum_{i=1}^3 \left(\frac{\partial f}{\partial \zeta_i} \right)^2 \right) \frac{\partial^2 T}{\partial f^2} + 2 \frac{\partial f}{\partial \zeta_2} \frac{\partial^2 T}{\partial f \partial \zeta_2} + 2 \frac{\partial f}{\partial \zeta_3} \frac{\partial^2 T}{\partial f \partial \zeta_3} + \sum_{i=2}^3 \frac{\partial^2 T}{\partial \zeta_i^2} \right] \quad (3.48)$$

$$- \frac{\partial(\rho D)}{\partial \zeta_2} \frac{\partial T}{\partial \zeta_2} - \frac{\partial(\rho D)}{\partial \zeta_3} \frac{\partial T}{\partial \zeta_3} - \frac{1}{c_p} \sum_{i=1}^N h_{f,i}^o \dot{\omega}_i + \frac{1}{c_p} \frac{\partial p}{\partial t}, \quad (3.49)$$

Fazendo-se a análise da ordem de grandeza das derivadas parciais, com a hipótese de que a espessura da camada de reação é pequena, conclui-se que o gradiente de temperatura normal à superfície de fração de mistura estequiométrica (Equação 3.43) é dominante. Assim,

$$\frac{\partial^2}{\partial f^2} \gg \frac{\partial^2}{\partial \zeta_i} \quad (3.50)$$

com $i = 2, 3$. Com estas simplificações de ordem de grandeza, e negligenciando-se a variação temporal da pressão, reescreve-se a Equação 3.49 na forma

$$\left(\frac{\partial T}{\partial \tau} - \frac{\chi}{2} \frac{\partial^2 T}{\partial f^2} \right) = -\frac{1}{\rho c_p} \sum_{i=1}^N h_{f,i}^o \dot{\omega}_i \quad (3.51)$$

na qual χ é a Taxa de Dissipação Escalar

$$\chi \equiv 2D \sum_{i=1}^3 \left(\frac{\partial f}{\partial \zeta_i} \right)^2 = 2D \left[\left(\frac{\partial f}{\partial \zeta_1} \right)^2 + \left(\frac{\partial f}{\partial \zeta_2} \right)^2 + \left(\frac{\partial f}{\partial \zeta_3} \right)^2 \right] \quad (3.52)$$

A dimensão da Taxa de Dissipação Escalar χ é s^{-1} . Assim, χ_{st} evidencia o tempo característico do processo de transporte difusivo na direção normal à superfície de fração de mistura estequiométrica. Este tempo concorre com o tempo característico das reações químicas do processo de combustão (lado direito da Equação (3.51)). Verifica-se, então, que no modelo de Elemento de Chama Laminar, o Número de Damköhler não é intrinsecamente infinito, como no caso dos modelo de folha de chama e equilíbrio químico. Um caso limite interessante do modelo de Elemento de Chama Laminar é quando $\chi \rightarrow 0$, ou seja, o tempo característico para difusão da energia na chama é infinitamente maior que o tempo característico das reações químicas. Isto significa, veja a Equação 3.52, que os gradientes de temperatura tendem a zero e conseqüentemente a taxa de transferência de calor também. Assim, toda a energia das ligações químicas rompidas no processo de combustão é convertido em temperatura da mistura:

$$\left(\frac{\partial T}{\partial \tau} \right) = -\frac{1}{\rho c_p} \sum_{i=1}^N h_{f,i}^o \dot{\omega}_i. \quad (3.53)$$

Da mesma forma como feito para a equação da energia e da temperatura, faz-se a transformação de coordenadas para a equação de transporte das espécies químicas (Equação ??) e tem-se

$$\left(\frac{\partial Y_k}{\partial \tau} - \frac{\chi}{2} \frac{\partial^2 Y_k}{\partial f^2} \right) = \frac{\dot{\omega}_k}{\rho} \quad (3.54)$$

Para o cálculo de uma chama com o modelo de elementos de chama laminar, deve-se usar as Equações (3.51) e (3.54), um modelo de cinética química adequado para o cálculo do termo de fonte $\dot{\omega}_k$ e um valor arbitrário de χ representativo. A Figura 3.6 mostra a estrutura de uma chama laminar de ar com metano calculada desta forma.

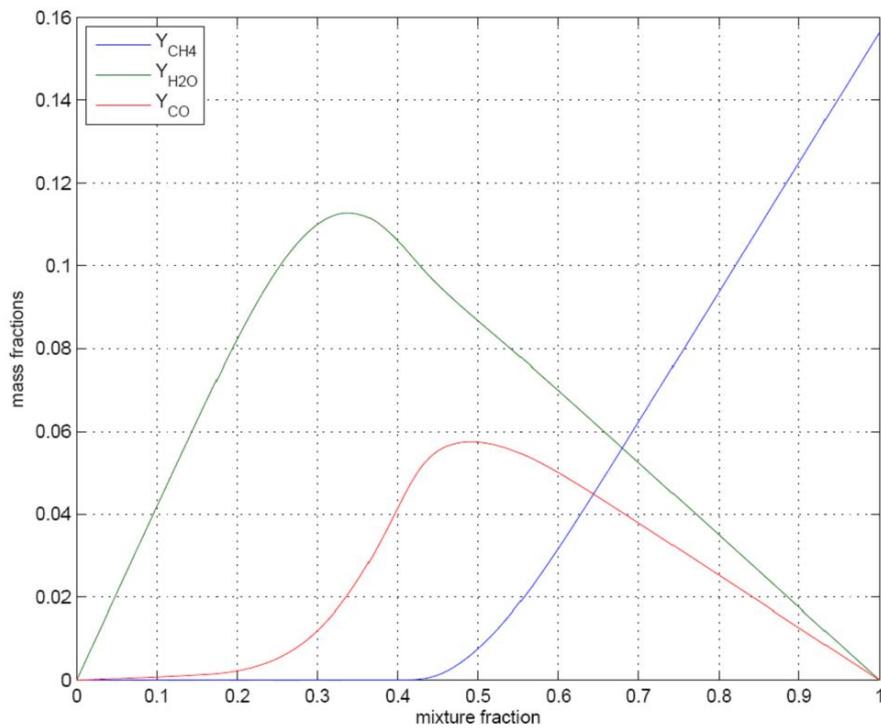


Figura 3.6 – Exemplo de flamelet.

Capítulo 4

Modelos para escoamentos turbulentos

Guenther Carlos Krieger Filho

Flavio Cesar Cunha Galeazzo

Sávio Vianna

Escoamentos turbulentos desafiam pesquisadores na proposição de uma descrição precisa de escoamentos reativos. Turns (2000) menciona que em dispositivos práticos os escoamentos turbulentos são encontrados com maior frequência que os laminares. Essa observação é válida não só para equipamentos não reativos, mas também para dispositivos que envolvem combustão. A importância da turbulência é justificada pelo fato dela influenciar fortemente a taxa de mistura dos reagentes em processos de combustão (KUO, 1986). O comprimento de chamas turbulentas é menor que a de chamas laminares, para um mesmo fluxo mássico de mistura, mesma razão ar-combustível, porém com dimensões da abertura de injeção diferentes. Em relação às chamas laminares, as turbulentas apresentam uma zona de reação, em média, mais espessa (FAETH, 1977). Logo, escoamentos turbulentos permitem alcançar uma potência específica mais alta que os escoamentos laminares, permitindo o projeto de equipamentos mais compactos para uma dada demanda de potência.

Na literatura encontram-se vários exemplos de modelagens de escoamentos rea-

tivos turbulentos. Os modelos dividem-se em sua maioria nas abordagens baseadas na média de Reynolds (em inglês *Reynolds-averaged Navier Stokes* - RANS), devido à sua vasta aplicação no campo das engenharias, e em menor quantidade nas abordagens baseadas nas simulações das grandes escalas (em inglês *Large Eddy Simulation* - LES).

O texto a seguir começa apresentando uma breve introdução sobre turbulência, em que se discute os conceitos da cascata de energia de Richardson e o espectro turbulento. Em seguida se discutem em maior profundidade os modelos do tipo LES e do tipo RANS.

Na parte final do texto, alguns exemplos e comparações com simulações similares usando LES e RANS são discutidas. O capítulo é fechado sintetizando os avanços da modelagem de escoamentos turbulentos e os principais desafios para o futuro.

4.1 Uma breve abordagem sobre turbulência

Obviamente que o tópico de turbulência é demasiado extenso para ser tratado em apenas uma seção. Existem contudo, alguns pontos que merecem destaque de forma que a compreensão das técnicas de modelagem LES e RANS sejam melhor absorvidas.

O leitor que esteja familiarizado com os conceitos básicos de turbulência pode pular esta parte do capítulo sem prejuízo da compreensão dos assuntos discutidos nas próximas seções.

Quando o tópico de escoamentos de fluidos é discutido, um dos pontos de questionamento é se o escoamento é laminar ou turbulento. Certamente, é possível ter uma ideia, ou mesmo uma vaga ideia, do que seja um escoamento turbulento do ponto de vista qualitativo. O tipo de escoamento provocado pela hélice de uma lancha, o qual pode ser observado na parte traseira da embarcação, remete facilmente ao conceito de algo turbulento. Observação contrária, seria um escoamento "comportado" de um filete de água na pia do banheiro, por exemplo.

Com base no exposto acima, pode-se dizer que o escoamento turbulento apresenta algumas características.

- Desorganização.

- Vórtices
- Mistura.

Alguns autores, como sugerido pelo excelente vídeo produzido pelo *National Committee for Fluid Mechanics Films* (https://www.youtube.com/watch?v=1_oyqL0qwnI) e apresentado por Dr. Robert W. Stewart, da University of British Columbia, definem a turbulência como uma síndrome. Em que há a necessidade de que três "sintomas" estejam presentes. Os mesmos citados anteriormente.

Leonardo da Vinci (1452-1519) dedicou parte de seu tempo a observar quedas d'água e escoamentos ao redor de obstáculos. Notavelmente, teceu o seguinte comentário;

"Observe the motion of the water surface, which resembles that of hair, that has two mentions: one due to weight of the shaft, the other to the shape of the curls; thus, water has eddy motions, one part of which is due to the principal current, the other to the random and reverse motion"

Embora sem a fundamentação e o formalismo matemático, uma antecipação da decomposição de Reynolds da velocidade, aonde tem-se um valor médio e uma parte flutuante em torno da média e que pode ser escrita como;

$$v = \bar{v} + v'$$

em que a velocidade v é apresentada como um componente médio \bar{v} e um componente flutuante v' .

De forma simples, pode-se pensar nessas flutuações em torno da média como uma "manifestação" das diversas escalas de tamanho, e por consequência de tempo, que estão presentes na fenômeno da turbulência. Neste sentido, pode-se pensar num quadro físico do problema de turbulência, de bastante utilidade para modelagem da turbulência, a cascata de Richardson.

A ideia sugerida por Richardson, é de que os turbilhões de grandes escalas são sucessivamente fragmentados em menores, até que os últimos seja destruídos pelas viscosidade, em que a energia dos turbilhões transforma-se em energia desordenada do movimento molecular, ou seja, calor.

A Figura 4.1 apresenta o conceito da cascata de energia mostrando as diversas escalas de tamanho dos turbilhões bem com a transferência de energia (cascata), apresentada na zona inercial do espectro. Nesta figura o eixo vertical apresenta o logaritmo da energia cinética turbulenta dos turbilhões e o eixo horizontal apresenta o logaritmo do comprimento de onda (inverso do comprimento do turbilhão).

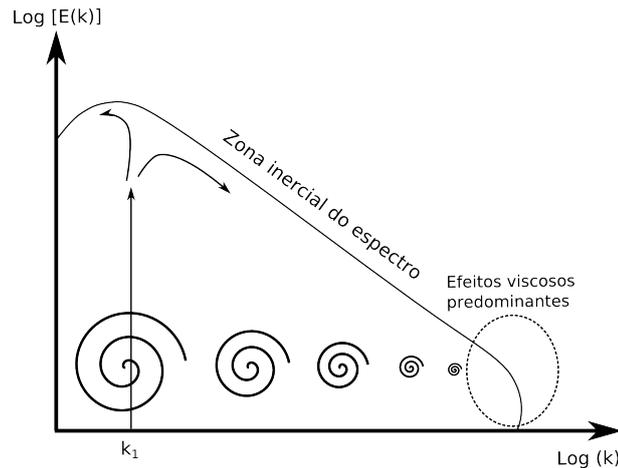


Figura 4.1 – Espectro de energia turbulenta. No eixo vertical esta apresentado o logaritmo da energia cinética turbulenta em função número de onda k , o qual representa o inverso da escala de tamanho dos turbilhões.

Enquanto na modelagem RANS toda a turbulência é modelada, a modelagem LES está baseada, na solução na malha computacional de parte das escalas de tamanho apresentadas na Figura 4.1. As escalas de tamanho que forem menores do que a malha computacional serão modeladas.

Nas próximas seções será discutido o procedimento para obtenção de um modelo matemático que viabilize a resolução do escoamento principal e uma faixa de tamanho das escalas turbulentas.

4.2 Modelos de turbulência - LES

Esta seção tem como objetivo apresentar os conceitos fundamentais e iniciais da modelagem LES para escoamentos turbulentos. LES, do inglês, significa *Large Eddy Simulation* o que implica que além do escoamento principal, as maiores escalas de tamanho

da turbulência serão resolvidas na malha computacional.

Desta forma, a modelagem LES está no meio do caminho entre a modelagem RANS (*Reynolds Averaged Navier Stokes*), em que o escoamento médio é resolvido e a abordagem DNS (*Direct Numerical Simulation*) em que todo o espectro turbulento é resolvido.

4.2.1 Equacionamento

O Capítulo 2 apresenta o conjunto de equações que governa o escoamento reativo. Ao que diz respeito a conservação da quantidade de movimento, pode-se aplicar a segunda Lei de Newton a um elemento de fluido, a qual leva a clássica equação de Navier-Stokes.

Em sua essência, a equação de Navier-Stokes representa um balanço de forças em um elemento de fluido. Conjuntamente ao princípio da conservação de massa e energia, pode-se descrever o escoamento de grande parte dos fluidos. No entanto, conforme discutido na seção anterior, o fenômeno de turbulência tem como característica uma grande variedade de escalas de tamanho e de tempo.

Os diversos turbilhões oriundos do escoamento turbulento apresentam tamanhos da ordem de grandeza do escoamento variando até as menores escalas turbulentas, na qual a energia cinética turbulenta é dissipada na forma de calor. Estas escalas menores, conhecidas como escala de Komolgorov, ficam encarregadas de dissipar toda a energia cinética turbulenta transportada desde as maiores escalas dos turbilhões.

A Figura 4.1 ilustra como a cascata de energia ocorre levando em conta as escalas de tamanho dos turbilhões.

Conforme apresentado inicialmente, o conceito por trás da abordagem LES (do inglês, *Large Eddy Simulation*) é calcular o escoamento principal e os grandes turbilhões. As estruturas menores, ou seja, os turbilhões de menor escala de tamanho, não são simulados. De fato a contribuição dos turbilhões de menor tamanho para o fenômeno de turbulência é realizada através de modelos.

O primeiro passo na modelagem LES é introduzir um limite que estabeleça a divisão entre a escala de tamanho a qual deseja-se que seja resolvida e a escala de tamanho

a qual será modelada. A partir da análise do espectro de energia turbulento, pode-se identificar um tamanho de turbilhão para qual todos os demais turbilhões menores do que esse serão modelados.

A Figura 4.2 ilustra a filosofia da modelagem LES. A linha contínua no gráfico indica a faixa de tamanho dos turbilhões que será resolvida computacionalmente. Pode-se notar na Figura 4.2 que há um direcionamento para uma caixa, a qual pode ser interpretada com o limite entre a escala de tamanho do que será resolvido na malha computacional e o que será menor do que a malha computacional. A faixa de tamanho menor do que a malha, representado na Figura 4.2 pela linha pontilhada, terá de ser modelada. Como trata-se de uma faixa de tamanho menor do que a malha computacional, fica razoável sugerir em modelos sub-malha, ou *sub-grid*, como é mais comumente utilizada na literatura inglesa.

Dentro deste contexto, é natural pensar na ideia de um filtro, o qual estabelece a faixa de escalas de tamanhos turbulentas que serão resolvidas e a faixa de escala de tamanho que será modelada. Na próxima seção será discutido a operação de filtragem e que impactos essa abordagem traz para o equacionamento do problema do escoamento turbulento.

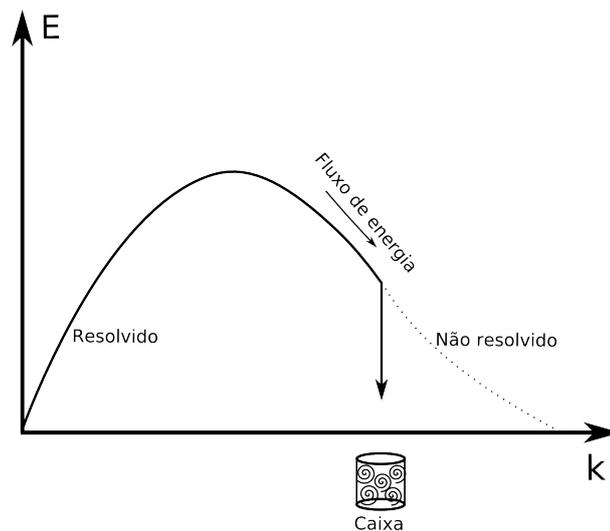


Figura 4.2 – Espectro de energia turbulenta. No eixo vertical esta apresentado o logaritmo da energia cinética turbulenta em função número de onda k , o qual representa o inverso da escala de tamanho dos turbilhões.

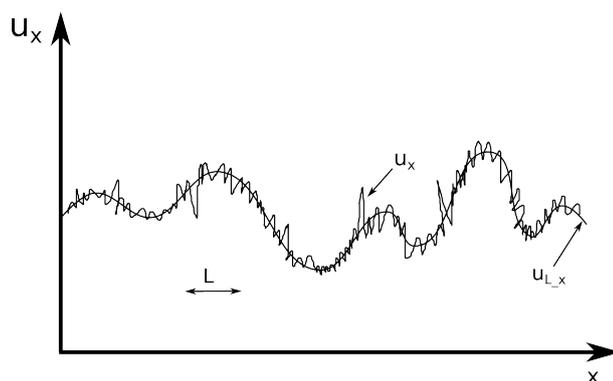


Figura 4.3 – Velocidade ao longo do eixo x . A linha sólida apresenta o valor médio da velocidade e a linha irregular, apresenta as flutuações em torno da média. Na análise LES, o sinal da velocidade é filtrado de acordo com o tamanho L da malha computacional.

4.2.1.1 Filtragem

Considerando-se o componente x da velocidade, u_x , medido ao longo de uma linha, este irá conter as flutuações em torno do valor médio, tanto devido as escalas pequenas quanto as escalas grandes. A equação abaixo apresenta o componente médio da velocidade, \bar{u}_x e suas respectiva flutuação em torno do valor médio, u'_x .

$$u_x = \bar{u}_x + u'_x$$

Na abordagem LES, é necessário que haja uma distinção entre as duas escalas de tamanho, uma distinção entre a escala dos grandes turbilhões e dos pequenos turbilhões. Esta separação pode ser obtida a partir da ideia de filtragem que está baseada no conceito de convolução do campo de velocidade com uma função filtro. Considere a seguinte função,

$$u_x^L = \int_{-\infty}^{\infty} u_x(x-r)G(r)dr$$

em que $G(r)$ é uma função filtro definida por

$$G(r) = \frac{1}{L}, |r| < L/2$$

$$G(r) = 0, |r| > L/2$$

Evidentemente que u_x^L é a média local de u_x na vizinhança de x e a média foi calculada ao longo de um comprimento L , conforme ilustrado na Figura 4.3. Conseqüentemente, u_x^L é um valor suavizado, ou melhor dito, filtrado de u_x , no qual as flutuações devido as escalas menores do que L não estão presentes.

Existem, contudo, funções de filtro alternativas. Um exemplo, é o filtro Gaussiano apresentado abaixo;

$$G(r) = \frac{\exp\left(-\frac{r^2}{L^2}\right)}{\pi^{\frac{1}{2}} L}$$

Em geral três tipos de filtro são os mais comuns;

- Filtro do tipo caixa
- Filtro Gaussiano
- Filtro senoidal

De forma análoga a decomposição de Reynolds, aplicada na modelagem RANS, pode-se introduzir a notação $\bar{u}_x = u_x^L$, de tal forma que \bar{u}_x representa o sinal filtrado.

Neste momento, ainda que haja alguma analogia com a modelagem RANS, não deve-se confundir o valor de \bar{u}_x com o valor médio apresentado no início desta seção.

O mesmo raciocínio pode ser facilmente estendido para três dimensões em que a seguinte notação é apresentada

$$u = \bar{u} + u'$$

na qual u' pode ser definido como $u - \bar{u}$. Cujo valor de \bar{u} consiste na velocidade filtrada e u' na velocidade residual. Conforme antecipado, ainda que a abordagem acima seja remanescente da decomposição de Reynolds, existem alguma diferenças as quais são

importantes. Por exemplo, em geral $\bar{u} \neq \bar{u}$ e conseqüentemente $\bar{u}' \neq 0$, o que significa que os valores filtrados na velocidade residual são diferentes de zero. Além disso, \bar{u} não representa a velocidade média do escoamento, mas a soma dos valores médios mais as grandes escalas de tamanho da turbulência.

4.2.1.2 Filtragem aplicada às equações de Navier - Stokes

Voltando nossa atenção para a equação de Navier - Stokes previamente discutida, é conveniente apresentar a equação de acordo com a notação de Einstein para as derivadas;

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (u_i u_j) = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial x_i} + \nu \nabla^2 u_i$$

Aplicando o filtro a equação de Navier - Stokes e considerando que as operações de filtragem e diferenciação comutam, pode-se escrever a equação acima em um formato mais familiar;

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{u}_i \bar{u}_j) = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \bar{P}}{\partial x_i} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial \tau_{i,j}^R}{\partial x_i} + \nu \nabla^2 \bar{u}_i$$

$$\tau_{i,j}^R = \rho [\bar{u}_i \bar{u}_j - \overline{u_i u_j}]$$

o qual muito lembra a abordagem RANS (*Reynolds Averaged Navier Stokes*) . No entanto, o efeito da filtragem na modelagem LES, introduz um componente de tensão, digamos fictício, chamado de tensão residual. Este é análogo a tensão de Reynolds introduzido devido a média temporal, conforme discussão apresentada no equacionamento RANS (*Reynolds Averaged Navier Stokes*).

Cabe chamar a atenção para o fato que a equação filtrada apresentada imediatamente acima leva em conta apenas as escalas de tamanho (turbilhões) L e maiores. Assim, a equação deve ser integrada em uma malha computacional $\sim L$. Em geral L é escolhido de tal forma que sejam consideradas as escalas de tamanho que estejam na faixa

do espectro de energia cinética turbulenta denominada inercial. Em outras palavras, na faixa do comprimento de onda em que a energia cinética turbulenta $E(k)$ "cascateie", se me permite o neologismo, de acordo com $\sim k^{-5/3}$. Neste sentido, nos falta encontrar uma forma de caracterizar o tensor tensão residual que surgiu na equação de Navier Stokes, em função da operação de filtragem.

4.2.2 Modelos de sub-malha

De acordo com a filosofia da modelagem LES e a operação de filtragem, os tamanhos de escala menores do que a malha computacional são considerados na velocidade residual u' . Como consequência o termo adicional (Tensor Tensão Residual) da equação de Navier - Stokes, devido a filtragem necessita ser modelado.

Um dos métodos mais populares para modelagem das escalas de tamanho não resolvidas em LES consiste na aplicação do modelo da viscosidade dos turbilhões, ou como é mais conhecido na literatura inglesa, *eddy-viscosity model*.

Nesta abordagem, o tensor tensão residual é escrito como

$$\tau_{i,j}^R = 2\rho\nu_R\bar{S}_{i,j} + \frac{1}{3}\delta_{i,j}\tau_{k,k}^R$$

cujo ν_R é a viscosidade turbilhonar (*eddy viscosity*) devido a velocidade residual. Desta forma temos;

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{u}_i \bar{u}_j) = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \bar{P}^*}{\partial x_i} + 2 \frac{\partial}{\partial x_j} [(\nu + \nu_R) \bar{S}_{i,j}]$$

Como etapa final, é necessário prescrever o valor de ν_R . Com base em argumentos físicos, é sugerido que ν_R seja determinado pelas escalas de tamanho não resolvidas na malha computacional que tenham o maior conteúdo energético. Neste caso, busca-se os turbilhões com escala de tamanho imediatamente inferiores a L .

Nesta linha, um candidato natural pode ser obtido por

$$\nu_R \sim L(v_L^2)^{\frac{1}{2}}$$

em que v_L^2 é a energia cinética dos turbilhões de tamanho L . De acordo com o modelo sugerido por Smagorinsky, o qual fora desenvolvido dentro do contexto da comunidade científica voltada para a meteorologia, v_L^2 é da ordem de $L^2(\bar{S}_{i,j}\bar{S}_{i,j})$, podendo ser escrito como

$$\nu_R = C_S^2 L^2 (2\bar{S}_{i,j}\bar{S}_{i,j})^{\frac{1}{2}}$$

A constante C_S , a qual usualmente é atribuído o valor de ~ 0.1 , é chamada de constante de Smagorinsky. O modelo proposto por Smagorinsky, o qual é extremamente popular, apresenta algumas deficiências (sendo muito dissipativo nas proximidades de paredes) no entanto parece funcionar bem para modelagem da turbulência isotrópica, escoamentos cisalhantes (*free shear flows*) e escoamentos em tubos. Vários aperfeiçoamentos foram propostos de forma a melhorar o modelo na região próxima a paredes. O modelo em que a constante C_S varia em função do tempo e do espaço é um exemplo. Tal abordagem é comumente chamada de modelo dinâmico (*Dynamic Model*). A ideia por trás da abordagem dinâmica consiste na aplicação de dois filtros com diferentes tamanhos, o que permite a escolha de melhor valor de C_S de acordo com o escoamento do fluido.

Cada vez mais a modelagem LES tem ultrapassado os muros da academia e tem sido empregada em problemas de engenharia. A modelagem evita várias incertezas e constantes dos modelos de fechamento do problema de turbulência, comumente encontrados na modelagem RANS e ao mesmo tempo não está limitada pelas restrições impostas pela simulação direta (DNS - Direct Numerical Simulation). No entanto, a abordagem LES ainda é muito mais custosa do ponto de vista computacional, quando comparada com a abordagem RANS. Além disso, conforme visto, a modelagem em regiões próximas as paredes ainda requer aprimoramento. De forma a capturar as características da camada limite, muitas vezes a malha computacional precisa ser tão refinada, que eventualmente tem-se um modelagem DNS.

4.2.3 Condições de contorno

Conforme discutido anteriormente existem algumas particularidades na modelagem LES, principalmente no que diz respeito a solução do escoamento nas proximidades de paredes.

Desta forma alguns pontos devem ser observados.

Paredes - *Solid walls*

- Condições de não deslizamento ($V = 0$): Alta resolução da malha computacional
- Baixa resolução da malha computacional requer condições artificiais.
- Perfil linear para a subcamada viscosa
- Perfil logarítmico para as demais regiões da camada limite.

Cabe salientar que as funções de parede tem apresentado bons resultados para escoamentos próximos a paredes. Por outro lado, escoamentos com separação do fluido bem como circulação apresentam uma acuracidade dos cálculos discutível.

Aberturas - *Outflow*

- Como de costume, os contornos de saída devem estar o mais distante possível da região do domínio computacional em que os gradientes são significativos
- Para escoamentos em regime transiente e que apresentem circulação, alguns aproximações físicas são necessárias. Neste sentido, deve-se evitar que soluções dentro do domínio computacional sejam extrapoladas para as fronteiras. Ainda, os vórtices devem passar pela fronteira sem grandes perturbações ou reflexões.

Entrada - *Inflow*

- Os valores médios para os componentes da velocidade, não são suficientes para modelagem LES
- Três componentes da velocidade ($u(x, y, z, t), v(x, y, z, t), w(x, y, z, t)$) em função do espaço e do tempo são necessários.

4.2.4 Aspectos numéricos

Diferentes métodos numéricos são utilizados na modelagem LES nos dias de hoje. Em princípio, essencialmente todos os métodos comumente usados em CFD pode ser aplicados desde que sejam 3D e não estacionário. Alguns exemplos são citados a seguir;

- métodos espectrais
- diferença / volume finitos
- elementos finitos

Como finalidade, a abordagem numérica deve estar focada na alta acuracidade do cálculo do escoamento cobrindo uma boa faixa das escalas turbulentas.

No que diz respeito a discretização temporal, métodos explícitos no tempo são empregados, podendo ser de segunda ou quarta ordem. Nas proximidades de paredes, esquemas implícitos para os termos viscosos são provavelmente uma opção e conforme já discutido, o refino da malha, principalmente na direção do escoamento é essencial.

Quanto a discretização espacial, é muito importante que propriedades dissipativas do esquema numérico seja as menores possíveis, tendo em vista a natureza da abordagem da modelagem LES.

Em geral a literatura aponta para experiências não muito satisfatórias com esquemas do tipo *upwind*, de qualquer ordem de acuracidade, i.e QUICK. Normalmente, os esquemas mais adotados são diferenças centrais e métodos espectrais.

Os termos viscosos, face sua natureza elíptica, são em geral discreteados por esquemas de diferenças centrais.

4.3 Modelos de turbulência RANS

Dentre os vários modelos baseados na abordagem RANS destacam-se o modelo $k - \varepsilon$ e o modelo RSM. Versteeg e Malalasekera (2007) consideraram o modelo $k - \varepsilon$ como o modelo mais usado até o momento. Pope (2000a) ressalta a sua versatilidade devido à

capacidade de poder ser usado em uma vasta diversidade de aplicações. Porém, apesar de seus inúmeros sucessos, o modelo $k - \varepsilon$ não apresenta resultados muito apropriados para a modelagem de escoamentos livres. Uma das formas encontradas para melhorar os resultados nesses casos é de ajustar as constantes do modelo, como feito por Fiorina, Gicquel e Veynante (2009), Obliego e Gass (1999), Chen, Yam e Armstrong (1999), Hinz, Hassel e Janicka (1999a) que utilizaram o modelo em questão. Aplicações deste modelo e suas variações para a simulação de sistemas com sprays podem ser encontrados em Düwel et al. (2007), Chrigui (2005), Zhou e Yao (1992), Ge e Gutheil (2008) e Hollmann e Gutheil (1998). O modelo dos tensores de Reynolds (em inglês *Reynolds Stress Model* - RSM) também chamado de modelo de segunda ordem ou *second-moment closure* é considerado o modelo de turbulência mais simples capaz de descrever os tensores de Reynolds sem necessitar de ajustes para cada caso simulado (VERSTEEG; MALALASEKERA, 2007). No entanto, apesar do consumo adicional no tempo de processamento, o modelo dos tensores de Reynolds nem sempre apresenta resultados claramente superiores aos modelos de turbulência mais simples para algumas classes de escoamento. O seu uso justifica-se para a modelagem de escoamentos com características provenientes da anisotropia do tensor de Reynolds, como escoamentos com fortes movimentos helicoidais (ROCHAYA, 2007). Semelhantemente ao modelo $k - \varepsilon$, o RSM não é adequado para a simulação de escoamentos livres. Os trabalhos de Chen (1999), Coelho e Peters (1999) e Hinz, Hassel e Janicka (1999b) mostram exemplos de aplicações do RSM para a simulação de chamas gasosas e os trabalhos de Rochaya (2007) e Chen e Pereira (1996) exemplificam o seu uso para chamas com spray.

Outra forma de modelar a turbulência é através da proposta pela simulação das grandes escalas turbulentas, a abordagem LES. Diferentemente da abordagem em RANS, técnica em LES não faz a média temporal das equações de Navier-Stokes, mas sim, uma filtragem espacial. Com esta filtragem espacial as grandes escalas do movimento turbulento são efetivamente calculadas, enquanto que as demais escalas são modeladas através de relações matemáticas. O modelo LES alcança resultados com grande exatidão quando comparados a dados experimentais e resultados de modelagens baseadas na média de Reynolds. Entretanto, os custos computacionais envolvidos na modelagem da turbulência com LES ainda são mais altos que os custos envolvidos nas modelagens baseadas na média

de Reynolds (CHRIGUI; AHMADI; SADIKI, 2004). Exemplos de chamas turbulentas modelados com LES podem ser encontrados nos trabalhos de Fukumasu (2010), Andrade (2009) e Mustata et al. (2006). Apte, Mahesh e Moin (2009) e Jones, Lyra e Marquis (2010) mostram exemplos de aplicação do modelo LES para a simulação de sprays não reativos.

4.3.1 Modelo de turbulência - $k - \varepsilon$

O modelo $k - \varepsilon$ (LAUNDER; SPALDING, 1974) baseia-se na média temporal das equações envolvidas na modelagem do escoamento de interesse. Para escoamentos com massa específica constante esta média temporal é feita utilizando-se a decomposição de Reynolds. Na decomposição de Reynolds as variáveis instantâneas são decompostas na soma de seu valor médio e sua flutuação turbulenta conforme mostra a Equação 4.1, para a variável ψ .

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

onde, $\bar{\psi}$ corresponde ao valor médio de ψ e ψ' à sua flutuação turbulenta. Após esta decomposição, é feita a média temporal das equações governantes do escoamento reativo (Equações ??, ??, ??, e ??) obtendo-se assim as equações médias baseadas na decomposição de Reynolds. Entretanto, como discutido por Versteeg e Malalasekera (2007) e Jones e Whitelaw (1982) a utilização desta forma de decomposição em escoamentos turbulentos com massa específica variável acarreta no aparecimento de termos relacionados à flutuação de massa específica nas equações. Para evitar esse problema é sugerida a utilização da decomposição de Favre, que é dada por

$$\psi = \tilde{\psi} + \psi'' = \frac{\overline{\rho\psi}}{\bar{\rho}} + \psi'', \quad (4.2)$$

$$\tilde{\psi} = \frac{\overline{\rho\psi}}{\bar{\rho}}. \quad (4.3)$$

Dado o interesse em escoamentos reativos, a decomposição de Favre foi utilizada para deduzir as equações das propriedades médias do escoamento. Ao aplicar esta decomposição ponderada pela densidade nas equações instantâneas que governam o escoamento reativo, e posteriormente fazendo a média temporal, chega-se a

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i}{\partial x_i} = 0, \quad (4.4)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j}{\partial x_j} = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial (\tilde{\tau}_{ij} - \bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j)}{\partial x_j} + \bar{\rho} g_i, \quad (4.5)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Y}_k}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Y}_k \tilde{u}_j}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho D_k \frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial x_j} \right) + \tilde{\omega}_k, \quad (4.6)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{h}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{h} \tilde{u}_j}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu_t}{\sigma_t} \frac{\partial \tilde{h}}{\partial x_j} \right), \quad (4.7)$$

onde $\tilde{\tau}_{ij}$ corresponde ao tensor das tensões viscosas do escoamento médio, $\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j$ é o tensor das tensões turbulentas, ou o tensor de Reynolds, e σ_t é o número de Prandtl turbulento. O tensor das tensões viscosas do escoamento médio pode ser dado por

$$\tilde{\tau}_{ij} = 2\mu \tilde{S}_{ij} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \left(\mu \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \right). \quad (4.8)$$

Os modelos de turbulência baseados na abordagem RANS têm por função a modelagem do tensor de Reynolds. O modelo $k - \varepsilon$ assume que há uma analogia entre esse tensor e o tensor das tensões viscosas do escoamento médio. Esta analogia é dada pela hipótese de Boussinesq que define o tensor de Reynolds como

$$-\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j = 2\mu_t \tilde{S}_{ij} - \frac{2}{3} \bar{\rho} k \delta_{ij}, \quad (4.9)$$

onde μ_t é a viscosidade turbulenta e k é a energia cinética turbulenta dada por

$$k = \frac{1}{2} (\widetilde{u_i u_i}). \quad (4.10)$$

Pope (2000a) destaca que o modelo $k - \varepsilon$ consiste na modelagem da viscosidade turbulenta da seguinte forma:

$$\mu_t = \bar{\rho} C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon}, \quad (4.11)$$

onde C_μ é uma constante de ajuste deste modelo de turbulência, com o valor de 0,09, e ε é a taxa de dissipação de energia cinética turbulenta. O modelo $k - \varepsilon$ focaliza-se nos mecanismos que afetam a energia cinética turbulenta do escoamento (VERSTEEG; MALALASEKERA, 2007). Nesse sentido esse modelo propõe o cálculo do transporte da energia cinética turbulenta (k) e de sua taxa de dissipação (ε).

$$\frac{\partial \bar{\rho} k}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} k \widetilde{u}_j}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu_t}{\sigma_k} \frac{\partial k}{\partial x_j} \right) + 2\mu_t \widetilde{S}_{ij} \cdot \widetilde{S}_{ij} - \bar{\rho} \varepsilon, \quad (4.12)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \varepsilon}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \varepsilon \widetilde{u}_j}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right) + C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k} 2\mu_t \widetilde{S}_{ij} \cdot \widetilde{S}_{ij} - C_{2\varepsilon} \bar{\rho} \frac{\varepsilon^2}{k}, \quad (4.13)$$

onde σ_k , σ_ε , $C_{1\varepsilon}$, $C_{2\varepsilon}$ são constantes de ajustes que neste modelo de turbulência têm os valores de 1,00, 1,30, 1,44 e 1,92, respectivamente (LAUNDER; SPALDING, 1974). Na Equação 4.12 os termos partindo da esquerda correspondem: à taxa de variação temporal, ao transporte advectivo, ao transporte molecular difusivo, à taxa de produção e à taxa de dissipação da energia cinética turbulenta. Os termos da Equação 4.13 são análogos aos da Equação 4.12, porém aplicados a ε .

4.3.2 Modelo das Tensões de Reynolds - RSM

O modelo das tensões de Reynolds compõe-se de equações que representam cada uma das componentes do tensor de Reynolds, presentes nas equações de Navier Stokes após

a aplicação da média de Reynolds. O modelo é composto por equações de transporte das tensões de Reynolds, juntamente com uma equação para a taxa de dissipação da energia cinética turbulenta. Em escoamentos tridimensionais, sete equações de transporte são necessárias.

As equações de transporte das tensões de Reynolds ($\overline{\rho u'_i u'_j}$) (WILCOX, 2006) são

$$\begin{aligned}
& \underbrace{\frac{\partial}{\partial t} (\overline{\rho u'_i u'_j})}_{\text{Derivada temporal local}} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_k} (\rho u_k \overline{u'_i u'_j})}_{\text{Convecção}} \\
&= - \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_k} \left[\overline{\rho u'_i u'_j u'_k} + p (\delta_{kj} u'_i + \delta_{ik} u'_j) \right]}_{\text{Difusão turbulenta}} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_k} \left[\mu \frac{\partial}{\partial x_k} (\overline{u'_i u'_j}) \right]}_{\text{Difusão molecular}} \\
&- \underbrace{\rho \left(\overline{u'_i u'_k} \frac{\partial u_j}{\partial x_k} + \overline{u'_j u'_k} \frac{\partial u_i}{\partial x_k} \right)}_{\text{Termo de produção de tensão}} - \underbrace{\rho \beta (g_i \overline{u'_j \theta} + g_j \overline{u'_i \theta})}_{\text{Produção de empuxo (buoyancy)}} + \underbrace{p \left(\frac{\partial u'_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u'_j}{\partial x_i} \right)}_{\text{Deformação por pressão}} \\
&\quad - \underbrace{2\mu \frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \frac{\partial u'_j}{\partial x_k}}_{\text{Dissipação}} - \underbrace{2\rho \Omega_k (\overline{u'_j u'_m} \varepsilon_{ikm} + \overline{u'_i u'_m} \varepsilon_{jkm})}_{\text{Produção por rotação do sistema}} + \underbrace{S}_{\text{Termo fonte}}
\end{aligned} \tag{4.14}$$

Os termos de convecção, difusão molecular, produção de tensão e produção por rotação do sistema não necessitam de modelagem, enquanto os termos de dissipação, difusão turbulenta, produção de empuxo e deformação por pressão são modelados.

O modelo das tensões de Reynolds requer a imposição de condições de contorno para cada componente do tensor de Reynolds e para a taxa de dissipação turbulenta. Como esses valores raramente são conhecidos, a sua estimativa é uma desvantagem de se utilizar esse tipo de modelo.

4.4 Aplicações

Mais recentemente, a metodologia LES tem sido empregada em problemas de engenharia. Este avanço é devido dentre outros fatores a maior capacidade de processamento dos computadores.

Outro aspecto bastante importante da modelagem LES, assim como DNS é que ambas tem contribuído enormemente para compreensão da turbulência e do escoamento

turbulento.

A Figura 4.4 abaixo apresenta um caso de dispersão de gás metano em uma planta de processamento químico. Casos idênticos foram simulados com modelagem LES e como modelagem RANS. A análise da Figura 4.4 mostra claramente as diferentes escalas de tamanho capturadas na modelagem LES (imagens do lado esquerdo). Por outro lado, a modelagem RANS apresenta um perfil de concentração de gás mais suavizado.

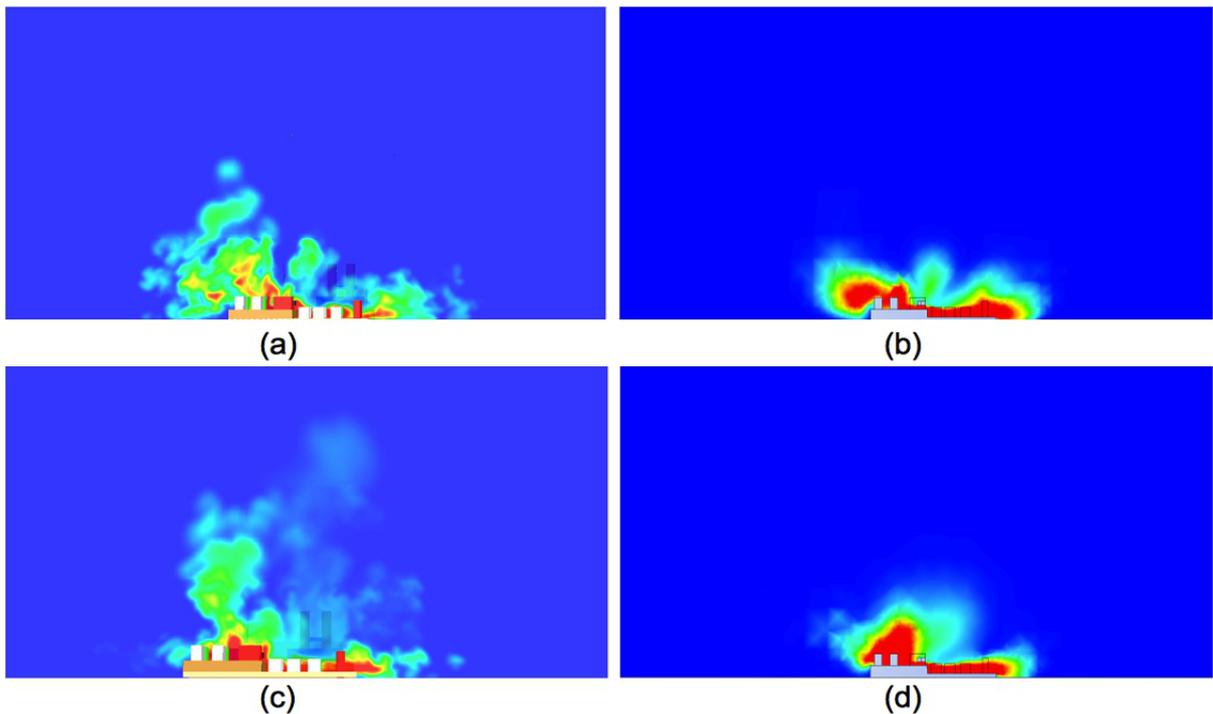


Figura 4.4 – Comparação da modelagem LES e RANS para um caso de dispersão de gás numa planta de processamento químico. (a) Caso modelado como LES para o vento vindo da esquerda para direita. (b) Caso similar modelado via RANS. (c) Caso modelado com LES para vento perpendicular a figura. (d) Caso similar modelado via RANS - (Cortesia L4r1s4 - UNICAMP)

A Figura 4.5 abaixo apresenta uma situação similar a apresentada na Figura 4.4, no entanto os resultados são apresentados para um vista superior. Novamente é fácil observar pela análise da Figura 4.5 a evidência dos diversos turbilhões devido a resolução das grandes escalas turbulentas.

Uma área de modelagem computacional que requer a aplicação da abordagem LES é a modelagem de incêndio. Códigos como o FDS (*Fire Dynamics Simulator*) e

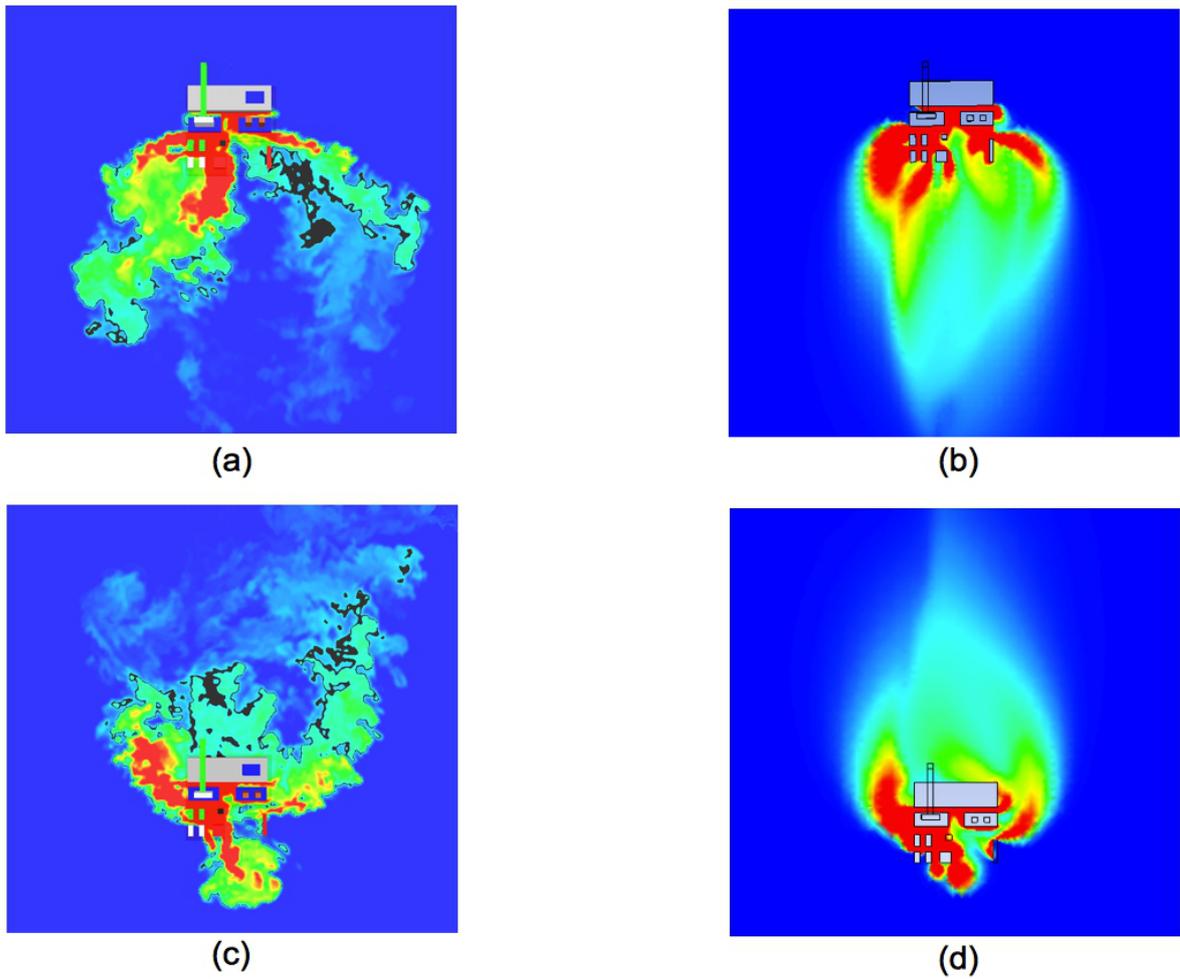


Figura 4.5 – Comparação da modelagem LES e RANS para um caso de dispersão de gás numa planta de processamento químico. Vista superior (a) Caso modelado como LES para o vento vindo de cima para baixo. (b) Caso similar modelado via RANS. (c) Caso modelado com LES para vento de baixo para cima. (d) Caso similar modelado via RANS - (Cortesia L4r1s4 - UNICAMP)

FireFoam, são exemplos de ferramentas computacionais utilizadas para modelagem de cenários de incêndio em que a abordagem LES é empregada.

A Figura 4.6 apresenta o esquema do experimento conduzido por Kim & Ryou, em que hexano e etanol foram queimados em um recipiente colocado dentro de uma capela. Pontos de monitoramento foram espalhados ao redor da chama, conforme apresentada na Figura 4.6.

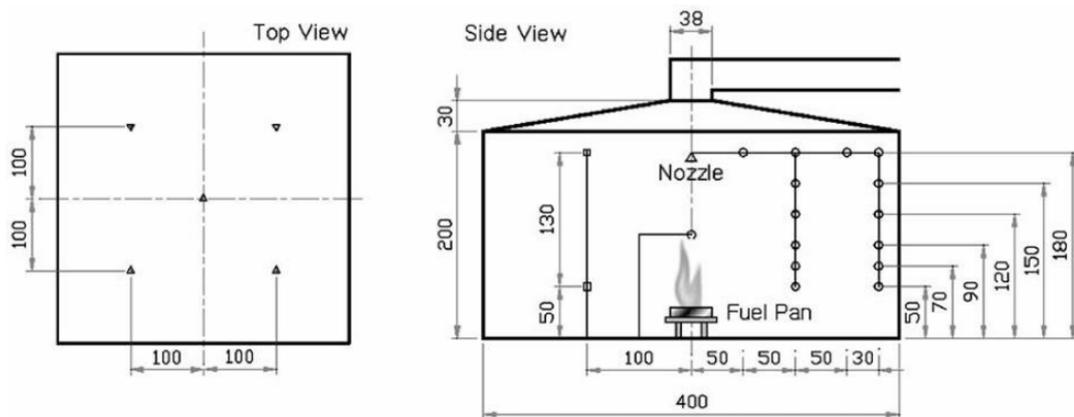


Figura 4.6 – Esquema do aparato experimental sugerido por Kim & Ryou para um incêndio em poça em escala laboratorial. (Kim, S.&H. Ryou (2003). *An experimental and numerical study on fire suppression using a water mist in an enclosure. Building and Environment. 38, pp.1309-1316.*)

O mesmo experimento foi reproduzido numericamente e os resultados da simulação da chama em uma poça de etanol estão apresentados na Figura 4.7. A análise da Figura 4.7 mostra as flutuações da chama tanto no tempo quanto no espaço (tendo em vista que temos duas imagens em instantes de tempo distintos). Note que a Figura 4.7 (a) apresenta uma chama mais espessa enquanto que a Figura 4.7(b) apresenta uma chama menos espessa. Tendo em vista que os dois resultados apresentados são em instantes de tempos diferentes, é fácil notar a flutuação da chama. Além disso também é possível observar a distribuição espacial distintas. Nos dois casos a presença dos turbilhões é nítida.

A Figura 4.8 abaixo apresenta no eixo Y a temperatura medida acima da chama e no eixo X o tempo do incêndio, para o mesmo caso simulado na Figura 4.7. Os resultados foram medidos a cerca 2 metros acima da chama, conforme a Figura 4.6 e uniformemente

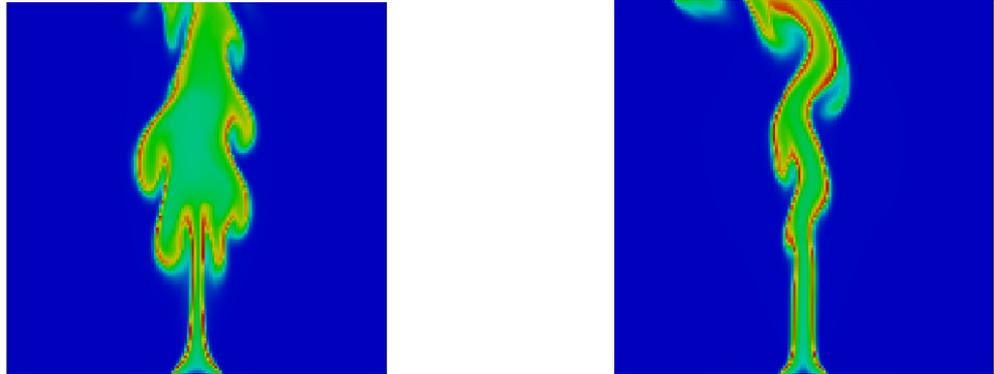


Figura 4.7 – Simulação de fogo em uma poça de etanol em dois instantes de tempo. (a) Presença de uma chama mais espessa com diferentes escalas de tamanho dos turbilhões. (b) Chama menos espessa com modesta distribuição de turbilhões (*Cortesia L4r1s4 - UNICAMP*)

distribuídos próximos ao teto da capela. Os valores obtidos com a simulação LES, usando o FireFoam, foram comparados com dados experimentais.

Análise da Figura 4.8 mostra uma boa concordância dos valores calculados com os dados experimentais.

A Figura 4.9 apresenta a liberação de gás metano a partir da região do jato em que o número de Mach é inferior a 0,3. O cisalhamento decorrente do jato de metano e o ar provoca instabilidades (Kelvin - Helmholtz) as quais se manifestam nos vórtices formados. As irregularidades são prontamente capturadas na modelagem LES apresentada na Figura 4.9.

A modelagem de jatos é de grande importância em vários problemas de engenharia desde a perda de contenção em linhas de unidades de processamento químico até a aplicação de fármacos para tratamento de enfermidades do trato respiratório. Neste sentido, há um grande interesse por parte da comunidade científica do entendimento do fenômeno, bem como sua modelagem numérica.

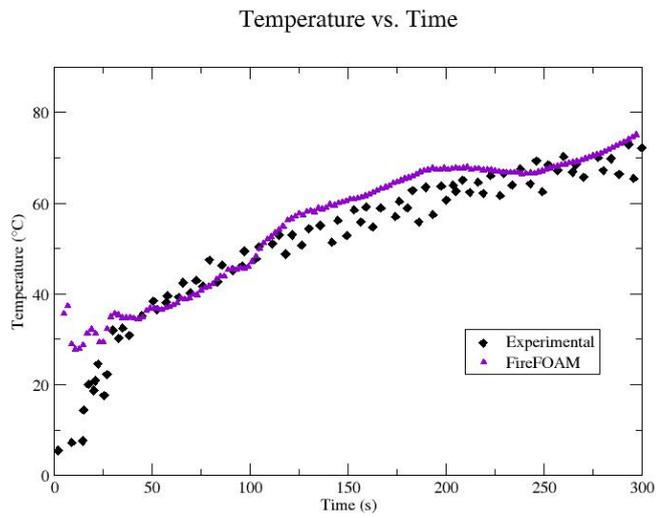


Figura 4.8 – Simulação de uma chama difusiva em uma poça de metano. A temperatura apresentada no eixo Y representa o valor medio de 4 pontos de monitoramento localizados 2 metros acima da poça e igualmente separados. O eixo x apresenta o tempo de evolução da queima da poça. (*Cortesia L4r1s4 - UNICAMP*)

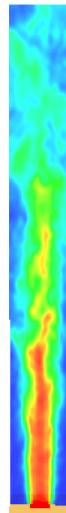


Figura 4.9 – Simulação de uma liberação de metano na região a jusante do furo em que o número de Mach é inferior a 0,3. (*Cortesia L4r1s4 - UNICAMP*)

4.5 Comentários Finais

Certamente a técnica da modelagem LES (*Large Eddy Simulation*) muito contribuiu e continua contribuindo para o estudo da turbulência. A simulação numérica ajuda no entendimento do fenômeno bem como a natureza do escoamento.

De uma forma geral, a metodologia LES pode ser enquadrada como uma abordagem que está entre o DNS (*Direct Numerical Simulation*) e a modelagem RANS (*Reynolds Averaged Navier Stokes*). Apenas as menores escalas turbulentas precisam ser modeladas, sendo as maiores escalas turbulentas resolvidas na malha computacional conjuntamente com o escoamento principal.

Até recentemente LES era aplicado em escoamentos simples, com foco exclusivo em pesquisa. Esse cenário vem mudando rapidamente e existe uma grande tendência para modelagem de problemas complexos de engenharia de interesse prático.

Ainda assim, existem áreas em que a modelagem precisa avançar. Conforme discutido neste capítulo, o aprimoramento dos modelos de parede é um quesito importante e é uma área ativa de pesquisa. Avanços nesta área proporcionarão modelagem de escoamentos entre paredes com custo computacional aceitável. Outro ponto que merece destaque é a investigação nas técnicas de filtragem para modelos *sub-grid* em malhas não estruturadas.

Não obstante, estudos de acústica, incêndio, aerodinâmica e aeroespacial tem utilizado cada vez mais a modelagem LES. Em alguns casos, a análise é combinada com modelos RANS.

Os resultados obtidos são bem promissores e combinados com o aumento da capacidade de computação, a metodologia LES é cada vez mais atrativa.

Capítulo 5

Modelos de Combustão Turbulenta

Guenther Carlos Krieger Filho

Flavio Cesar Cunha Galeazzo

A combustão, tal como outras reações químicas, dependem da mistura ao nível molecular dos reagentes. Após esta condição ser cumprida, a reação química pode ser iniciada. Em fluxos laminares, a difusão de espécies moleculares é responsável por essa mistura. Se o fluxo for turbulento, por outro lado, os elementos do fluido são transportados por flutuações turbulentas, o que aumenta a mistura, em comparação com um fluxo laminar.

Um dos principais desafios na modelagem de sistemas de combustão é a descrição da interação entre mistura turbulenta e reação química. Na literatura, diferentes abordagens de modelagem são conhecidas. Os modelos de reação mais frequentemente utilizados podem ser divididos nas seguintes categorias:

- **Modelos baseados em PDF**

Estes modelos são baseados na função de densidade de probabilidade (em inglês *Probability Density Function* - PDF) das principais variáveis da reação química. Supõe-se que as escalas de tempo e comprimento da mistura e da reação são totalmente descritas na forma do PDF, ou seja, nenhuma hipóteses restritivas em relação à cinética química e ao transporte turbulento são feitos *a priori*.

- **Taxa de dissipação de escalar**

A taxa de dissipação de escalar (em inglês *scalar dissipation rate*) descreve o relaxamento das flutuações devido à mistura molecular. Modelos desta categoria são baseados na hipótese de que a escala de tempo da reação é sempre muito menor do que a escala de tempo da mistura turbulenta. Supõe-se que a velocidade de reação depende apenas da escala de tempo controlada pela mistura molecular, que por sua vez é controlado pela escala de comprimento turbulento. Uma vez que a taxa de reação é proporcional à velocidade em que os reagentes entram em contacto com a frente da chama, a taxa de dissipação de escalar aparece diretamente ou indiretamente no termo da fonte de reação.

- **Geometria da chama**

Esta abordagem de modelagem descreve a cinemática da frente de chama. Supõe-se que a espessura da frente de reação real é pequena em comparação à escala de comprimento integral. Existem diferentes métodos para descrever a topologia da variável de progresso da reação: equações para isosuperfícies do progresso reação (por exemplo usando a equação G), equações de balanço para a densidade da frente de chama e as equações de equilíbrio para a curvatura da frente de chama.

- **Velocidade de queima turbulenta**

Modelos baseados em correlações para a velocidade de queima turbulenta (em inglês *turbulent burning velocity*) descrevem a interação entre turbulência e reações químicas baseando-se em escalas assintóticas de tempo e comprimento. Muitas vezes são usadas as mesmas restrições utilizadas no caso laminar, com apenas uma escala de tempo para a liberação de calor e para o transporte difusivo.

Um exemplo de modelo de combustão baseado em PDF é o *presumed Joint Probability Density Function* (JPDF), um modelo desenvolvido pela Divisão de Engenharia de Combustão do Instituto Engler-Bunte, Instituto de Tecnologia de Karlsruhe, Alemanha. Este modelo é similar ao também popular *Flamelet Generated Manifolds* (FGM). Os detalhes do modelo JPDF são apresentados a seguir.

5.1 Modelo JPDF

O modelo *presumed Joint Probability Density Function* (JPDF) (BORGHI, 1988; LOCKWOOD; NAGUIB, 1975) utiliza a probabilidade conjunta (*joint*) de funções densidade de probabilidade (PDFs) na sua forma presumida (*presumed*). O modelo foi desenvolvido ao longo dos anos pela Divisão de Engenharia de Combustão do Instituto Engler-Bunte (EBI-VBT), Instituto de Tecnologia de Karlsruhe, Alemanha (HOFFMANN et al., 2001; GROßSCHMIDT et al., 2003; BRUNN et al., 2006; WETZEL; HABISREUTHER; ZARZALIS, 2006; KERN et al., 2009; GALEAZZO et al., 2011a; PRATHAP et al., 2012; GALEAZZO et al., 2011b).

A ideia básica do modelo JPDF é que a interação entre a turbulência e reações químicas pode ser descrita pela função densidade de probabilidade de variáveis características do sistema de combustão. O estado da mistura é determinada usando a fração de mistura f e o progresso da reação utilizando uma variável de progresso da reação c . Com este formalismo é possível simular chamas de difusão, parcialmente pré-misturadas e pré-misturadas, utilizando o mesmo modelo.

A fração de mistura f é um escalar passivo e é definida como se segue, assumindo que o combustível é um hidrocarboneto

$$f = \frac{(Z_C + Z_H) - (Z_C + Z_H)_{Ox}}{(Z_C + Z_H)_F - (Z_C + Z_H)_{Ox}} \quad (5.1)$$

onde Z_C e Z_H representam a fração mássica local de átomos de carbono e hidrogênio, respectivamente, e os índices Ox e f representam fluxos com oxidante puro e combustível puro. A fração de mistura de oxidante puro tem um valor de zero, ao mesmo tempo em que o combustível puro tem uma fração de mistura igual a um.

Uma das formas de definir a variável de progresso da reação é usando o oxigênio O_2 como variável característica:

$$c = \frac{Y_{O_2,local} - Y_{O_2,não\ queimado}}{Y_{O_2,queimado} - Y_{O_2,não\ queimado}}. \quad (5.2)$$

onde $Y_{O_2,local}$, $Y_{O_2,não\ queimado}$ e $Y_{O_2,queimado}$ representam a fração mássica local de O_2 , a fração mássica do estado não queimado e do estado completamente queimado, respectivamente. A variável de progresso da reação é definida para assumir o valor de zero na

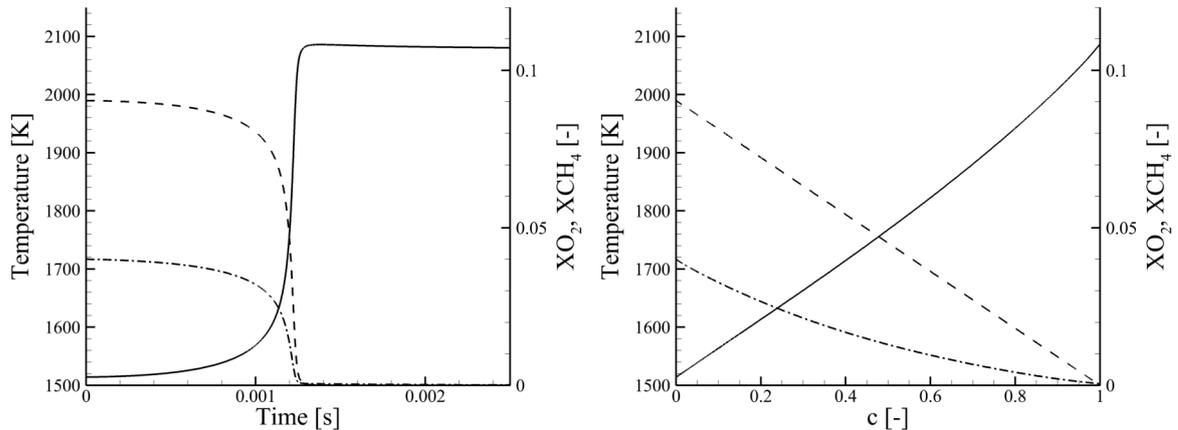


Figura 5.1 – Perfis com os mesmos resultados de um reator de fluxo pistonado usando o tempo (esquerda) e a variável de progresso da reação (direita) como variável independente. Temperatura, linha sólida; fração mássica de O_2 , linha tracejada; fração mássica de CH_4 ; linha traço e ponto

mistura não queimada e o valor unitário na mistura completamente queimada. É um escalar não passivo, o qual é alterado pelo progresso de combustão.

As reações químicas que descrevem a combustão podem ser resolvidas utilizando vários sistemas idealizados, incluindo flamelets, chamas laminares pré-misturados, chamas laminares difusivas e reatores de fluxo pistonado (em inglês *plug flow reactor* - PFR). O modelo *Flamelet Generated Manifolds* (FGM) (OIJEN; LAMMERS; GOEY, 2001; VREMAN et al., 2008) é muito semelhante ao modelo JPDF usando flamelets ou chamas laminares pré-misturados para resolver as reações químicas.

No seguinte exemplo, um PFR foi usado para se resolver as reações químicas, em que um mecanismo químico detalhado foi usado para modelar a combustão. O combustível utilizado é o metano e as reações químicas foram descritas com as 53 espécies químicas e as 325 reações do mecanismo GRI 3.0 (SMITH et al.,).

Para o intervalo de frações de mistura estudado, misturas de oxidante e combustíveis são definidas como eduto de reatores de fluxo pistonado (PFR) e calculadas usando o software Cantera (GOODWIN, 2003). Para cada fração de mistura f , a fração mássica das diferentes espécies mudam ao longo do reator devido à reação entre o combustível e oxidante. A variável independente do PFR é o tempo, que pode ser transformada utilizando a variável de progresso da reação c definida na Equação (5.2); este

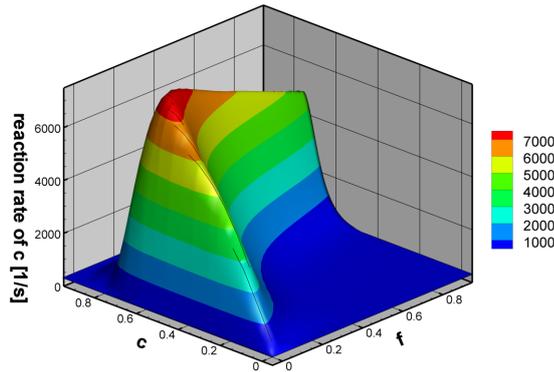


Figura 5.2 – Exemplo da distribuição de taxa de reação de c ($\dot{\omega}_c$) com a fração de mistura f e a variável de progresso da reação c como variáveis independentes.

processo está representado na Figura 5.1. As linhas do gráfico a esquerda mostram a evolução temporal da temperatura e das frações mássicas de O_2 e CH_4 . A zona de reação é claramente determinada pelo aumento acentuado da temperatura, com o consumo simultâneo de combustível (CH_4) e oxidante (O_2). Neste exemplo, o oxidante é ar viciado (isto é, com pouco O_2) e o combustível é CH_4 diluído em ar. A mistura é estequiométrica, então todo O_2 é consumido pela reação com CH_4 . Aplicando a definição da evolução da variável de progresso da reação c e utilizando esta variável como variável independente produz os resultados mostrados na parte direita da Figura 5.1. A fração mássica de O_2 varia agora linearmente, que é uma consequência da utilização O_2 como variável característica na definição de c . As variações de temperatura e a fração mássica de CH_4 também se tornam mais suaves.

O próximo passo é usar a fração de mistura f e a variável de progresso da reação c como variáveis independentes para tabular todas as outras variáveis de interesse: densidade da mistura, frações mássicas de todas as espécies de interesse, taxa de reação c ($\dot{\omega}_c$), viscosidade da mistura, difusividade de calor e mássica da mistura, entre outros. O resultado é uma tabela bidimensional, representada na Figura 5.2, que mostra a taxa de reação da variável de progresso da reação $\dot{\omega}_c$ como uma função de f e c . O leitor interessado pode encontrar as condições de contorno detalhado na Tabela 5.1 com razão de equivalência 1,02.

Os resultados na tabela bidimensional são ainda laminares, sem a influência da

Pressão absoluta (bar)	2
Razão de equivalência	1.02
Temperatura do ar viciado (K)	1696
Composição mássica do ar viciado	
Y_{O_2}	0.1119
Y_{CO_2}	0.1028
Y_{H_2O}	0.0403
Y_{N_2}	0.7450

Tabela 5.1 – Condições de contorno.

turbulência. Para considerar a turbulência, PDFs de cada variável independente são calculadas. A função densidade de probabilidade β é amplamente utilizada no estudo da combustão turbulenta para definir distribuições escalares (POINSOT; VEYNANTE, 2001); essa distribuição depende de apenas dois momentos, o valor médio e a variância. Utilizando a fração mistura f como um exemplo, a β PDF assume a forma

$$P(f) = \frac{\Gamma(\alpha + \beta)}{\Gamma(\alpha)\Gamma(\beta)} f^{\alpha-1} (1-f)^{\beta-1}, \quad (5.3)$$

onde P é a probabilidade, Γ é a função gama, e os parâmetros α e β são relativos a

$$\alpha = \tilde{f}\gamma \quad (5.4)$$

$$\beta = (1 - \tilde{f})\gamma \quad (5.5)$$

onde \tilde{f} é o valor médio de f e γ é definida como

$$\gamma = \frac{\tilde{f}(1 - \tilde{f})}{\tilde{f}''^2} - 1 \quad (5.6)$$

onde \tilde{f}''^2 é a variância de f .

Assumindo a independência estatística entre a fração de mistura f e a variável de progresso da reação c , a probabilidade conjunta é calculada multiplicando-se as PDFs marginais (POPE, 2000a; POINSOT; VEYNANTE, 2001)

$$P(f, c) = P(f)P(c). \quad (5.7)$$

Infelizmente é muito difícil confirmar esta hipótese na prática. A independência estatística de f e c é fraca, porque a fração mistura e a variável de progresso da reação são claramente

interdependentes em processos de combustão. No entanto, a PDF conjunta calculada desta forma tem sido amplamente utilizada na literatura (POINSOT; VEYNANTE, 2001; VREMAN et al., 2008; DOMINGO; VERVISCHA; VEYNANTE, 2008; MICHEL et al., 2009) e em trabalhos anteriores publicados pela Divisão de Engenharia de Combustão do Instituto Engler-Bunte (EBI-VBT) (WETZEL; HABISREUTHER; ZARZALIS, 2006; KERN et al., 2009), com bons resultados.

Aplicando este formalismo, uma tabela de consulta (em inglês *lookup table*) com valores incluindo a influência da turbulência pode ser calculada. As quatro variáveis independentes dessa tabela são os valores médios e as variâncias de f e c . Empregando a β PDF, as PDFs marginais de f e c são calculadas, e usando a Equação (5.7) a probabilidade conjunta é definida. A tabela de consulta é então preenchida com os valores de diversas variáveis, incluindo a densidade, as frações mássicas das espécies e taxas de reação, que são calculadas usando seus valores laminares e a probabilidade conjunta.

O próximo passo é calcular os valores médios e as variâncias de f e c no código CFD, definindo o progresso da mistura e da reação em cada ponto da simulação. Os valores médios de outras variáveis podem ser lidos da tabela de consulta, por exemplo, a densidade média $\bar{\rho}$, a taxa média de reação de c $\bar{\omega}_c$, o termo fonte de d $\overline{\dot{\omega}'_c d'}$ e outras variáveis de interesse.

Na versão detalhada neste texto, o modelo JPDF não leva em consideração as perdas de calor, que estão presentes em sistema de combustão com sprays, por exemplo. As perdas de calor pode afetar significativamente a geometria da chama, influenciando o ajuste entre as medições e as simulações. Uma extensão do modelo JPDF que considera as perdas de calor já foi desenvolvida (WETZEL; HABISREUTHER; ZARZALIS, 2006).

As equações de transporte apropriadas para a fração de mistura f , a variável de progresso da reação c e suas variâncias dependem do tipo de simulação sendo considerado. Para simulações utilizando modelos de turbulência do tipo RANS, as equações de transporte são descritas na próxima seção. Equações de transporte para simulações de grandes escalas (LES), em que as equações não são médias, mas filtradas, são descritas na Seção 5.1.2.

5.1.1 RANS equations

Para simulações usando modelos de turbulência do tipo RANS, as equações de transporte para a fração de mistura média \tilde{f} e sua variância $\tilde{g} = \tilde{f}'^2$ são as seguintes:

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{f}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{f}}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\bar{\rho} D_{Eff} \frac{\partial \tilde{f}}{\partial x_i} \right) = 0 \quad (5.8)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{g}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{g}}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\bar{\rho} D_{Eff} \frac{\partial \tilde{g}}{\partial x_i} \right) &= C_{g,1} \bar{\rho} D_{Eff} \left| \frac{\partial \tilde{f}}{\partial x_i} \right|^2 \\ &- C_{g,2} \bar{\rho} \frac{\epsilon}{k} \tilde{g} \end{aligned} \quad (5.9)$$

onde D_{Eff} é o coeficiente efetivo de difusividade, incluindo o efeito da turbulência, $C_{g,1} = 2.8$ e $C_{g,2} = 2$.

A variável de progresso da reação média \tilde{c} é um escalar ativo, e sua equação de transporte inclui um termo fonte de reação. O mesmo se aplica à sua variância $\tilde{d} = \tilde{c}'^2$:

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{c}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{c}}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_i} \left(D_{Eff} \frac{\partial \tilde{c}}{\partial x_i} \right) = \bar{\omega}_c \quad (5.10)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{d}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{d}}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\bar{\rho} D_{Eff} \frac{\partial \tilde{d}}{\partial x_i} \right) &= C_{d,1} \bar{\rho} D_{Eff} \left| \frac{\partial \tilde{c}}{\partial x_i} \right|^2 \\ &- C_{d,2} \bar{\rho} \frac{\epsilon}{k} \tilde{d} + 2 \cdot \overline{\omega'_c d'} \end{aligned} \quad (5.11)$$

onde $C_{d,1} = 2.8$ e $C_{d,2} = 2$. Os termos fonte são definidos como:

$$\bar{\omega}_c = \bar{\rho} \int_1^0 \frac{\dot{\omega}}{\rho} P(f, c) dc df \quad (5.12)$$

$$\overline{\omega'_c d'} = \bar{\rho} \int_1^0 \frac{(\dot{\omega} - \bar{\omega})(c - \tilde{c})}{\rho} P(f, c) dc df \quad (5.13)$$

onde $P(f, c)$ é a probabilidade conjunta de f e c definida na Equação (5.7).

5.1.2 LES equations

As equações de transporte para os modelos LES são derivadas usando o operador de Favre, que é ponderado pela densidade. A equação de transporte para a fração de mistura filtrada \tilde{f} é:

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{f}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{f}}{\partial x_i} - \frac{\partial \bar{\rho} (\tilde{u}_i \tilde{f} - \tilde{u}_i \tilde{f})}{\partial x_i} = 0 \quad (5.14)$$

Como nas equações RANS, a equação de transporte para a variável de progresso da reação \tilde{c} inclui um termo fonte de reação:

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{c}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{c}}{\partial x_i} - \frac{\partial \bar{\rho} (\tilde{u}_i \tilde{c} - \tilde{u}_i \tilde{c})}{\partial x_i} = \bar{\omega}_c \quad (5.15)$$

onde o termo fonte é definido como:

$$\bar{\omega}_c = \bar{\rho} \int_1^0 \frac{\dot{\omega}}{\rho} P(f, c) dc df \quad (5.16)$$

onde $P(f, c)$ é a probabilidade conjunta de f e c definida da Equação (5.7). As escalas sub-malha não resolvidas $\bar{\rho}(\tilde{u}_i \tilde{f} - \tilde{u}_i \tilde{f})$ e $\bar{\rho}(\tilde{u}_i \tilde{c} - \tilde{u}_i \tilde{c})$ são modeladas pelos modelos de sub-malha descritos na Seção 4.2.

Em simulações LES as variâncias de \tilde{f} e \tilde{c} podem ser calculadas usando relações algébricas, isto é, sem a solução de equações de transporte. As relações algébricas são descritas na próxima seção.

Subgrid scale variance

O modelo JPDF requer a avaliação da variância de algumas variáveis. No contexto RANS, equações de transporte são resolvidas por essas variações. Em simulações LES, os desvios podem ser calculados utilizando uma relação algébrica, uma abordagem semelhante à utilizada por Smagorinsky para aproximar a energia cinética turbulenta da escala sub-malha. A variação sub-malha da fração de mistura f e da variável de progresso da reação c são dadas por

$$\tilde{f}''^2 = C_f \Delta^2 \left(\frac{\partial \tilde{f}}{\partial x_i} \right)^2 \quad (5.17)$$

$$\tilde{c}''^2 = C_c \Delta^2 \left(\frac{\partial \tilde{c}}{\partial x_i} \right)^2 \quad (5.18)$$

onde as constantes C_f e C_c assumem o valor 0.01. Procedimentos similares foram empregados por Branley e Jones (2001), Vreman et al. (2008) e Olbricht et al. (2010), com bons resultados.

5.2 Modelos de Combustão Turbulenta - Método de PDF pré-assumida

Quando o processo de combustão se encontra no regime turbulento, deve-se ter cuidado com a representação dos efeitos da turbulência na modelagem das reações químicas. As reações químicas são dependentes das quantidades instantâneas das concentrações das espécies químicas transportadas no escoamento, as quais são representadas nesse trabalho pela fração de mistura. Entretanto, nos capítulos anteriores foi selecionado um modelo de turbulência que considera, apenas, os valores das médias temporais das quantidades físicas transportadas no escoamento. Logo, não há concentrações instantâneas de fração de mistura disponíveis no cálculo do processo de combustão, apenas seus valores médios no domínio. Essa restrição imposta pelo modelo de turbulência selecionado impede que a formulação apresentada no Capítulo 3 seja usada, pois ela é baseada nos valores instantâneos da fração de mistura. Portanto, deve ser feito algum tratamento estatístico sobre essa formulação, baseada em médias temporais e em função da fração de mistura, para representar a combustão em regime turbulento.

5.2.1 Tratamento Estatístico de Reações Químicas Turbulentas

Como a taxa de reação é não linear modelar os termos $\dot{\omega}_k$ não é simplesmente expressá-lo como uma função das quantidades filtradas \tilde{Y}_F , \tilde{Y}_O e \tilde{T} . Por meio de uma expansão em série de Taylor, obtém-se

$$\begin{aligned} \tilde{\omega}_F = & -A\bar{\rho}^2\tilde{T}^\alpha\tilde{Y}_F\tilde{Y}_O \exp\left(\frac{-T_a}{\tilde{T}}\right) \left[1 + \frac{Y''_O}{\tilde{Y}_O} + \frac{Y''_F}{\tilde{Y}_F} + \frac{Y''_F Y''_O}{\tilde{Y}_O \tilde{Y}_F} + (P_1 + Q_1) \left(\frac{T''}{\tilde{T}} + \frac{Y''_F T''}{\tilde{T} \tilde{Y}_F} + \frac{T'' Y''_O}{\tilde{Y}_O \tilde{T}} + \right. \right. \\ & \left. \left. + \frac{T'' Y''_F Y''_O}{\tilde{T} \tilde{Y}_F \tilde{Y}_O} \right) + (P_2 + P_1 Q_1 + Q_2) \left(\frac{T''^2}{\tilde{T}^2} + \frac{Y''_F T''^2}{\tilde{T}^2 \tilde{Y}_F} + \frac{T''^2 Y''_O}{\tilde{Y}_O \tilde{T}^2} + \frac{T''^2 Y''_F Y''_O}{\tilde{T}^2 \tilde{Y}_F \tilde{Y}_O} \right) + \dots \right] \end{aligned} \quad (5.19)$$

Após filtrar a temperatura, $T = \tilde{T} + T''$, dada uma função $f(T)$ tem-se que $f(T) = f(\tilde{T} + T'')$. Expandindo $f(T)$ em série de Taylor obtém-se

$$f(T) = f(\tilde{T} + T'') = f(\tilde{T}) + T'' f_{\tilde{T}}(\tilde{T}) + \frac{T''^2}{2} f_{\tilde{T}\tilde{T}}(\tilde{T}) + O(T''^3), \quad (5.20)$$

Assim, os termos T^α e $\exp(-T_a/T)$ após a filtragem são substituídos, respectivamente por

$$\begin{aligned} T^\alpha &= \tilde{T}^\alpha \left(1 + \sum_{n=1}^{\infty} Q_n \frac{T''^n}{\tilde{T}^n} \right) \\ &= \tilde{T}^\alpha \left(1 + \alpha \frac{T''}{\tilde{T}} + \frac{\alpha(\alpha-1)}{2} \frac{T''^2}{\tilde{T}^2} + O(T''^3) \right), \end{aligned} \quad (5.21)$$

$$\begin{aligned} \exp\left(\frac{-T_a}{T}\right) &= \exp\left(\frac{-T_a}{\tilde{T}}\right) \left(1 + \sum_{n=1}^{\infty} P_n \frac{T''^n}{\tilde{T}^n} \right) \\ &= \exp\left(\frac{-T_a}{\tilde{T}}\right) \left[1 + \frac{T_a}{\tilde{T}} \frac{T''}{\tilde{T}} + \left(\frac{T_a^2}{\tilde{T}^4} - 2 \frac{T_a}{\tilde{T}^3} \right) \frac{T''^2}{2} + O(T''^3) \right], \end{aligned}$$

onde Q_n e P_n são dados pelas expressões

$$Q_n = \frac{1}{n!} \prod_{k=1}^n (b - k - n) \quad \text{e} \quad P_n = \sum_{k=1}^n \frac{(n-1)!}{(n-k)! [(k-1)!]^2 k} \left(\frac{T_a}{\tilde{T}} \right)^n. \quad (5.22)$$

Assim, verifica-se que somente em situações nas quais o termo $\frac{T_a}{\tilde{T}} \frac{T''}{\tilde{T}}$ for muito menor que a unidade, a aproximação do valor instantâneo da temperatura por seu valor médio será válida.

Uma abordagem estatística comum em modelagem de combustão turbulenta é com o uso de funções de densidade de probabilidade (PDF's). Com o uso de uma função PDF de uma variável ψ , a média de qualquer propriedade $q(\psi)$ que dependa desta variável pode ser feita como (KUO, 1986):

$$\bar{q} = \int_{-\infty}^{\infty} q(\psi) P(\psi) d\psi, \quad (5.23)$$

onde $P(\psi)$ é a PDF da variável ψ . Para modelos em que é utilizada a média de Favre para as quantidades físicas transportadas, é apresentado em Jones e Whitelaw (1982) que o cálculo dessa média pode ser feito como

$$\tilde{q} = \int_{-\infty}^{\infty} q(\psi) \tilde{P}(\psi) d\psi, \quad (5.24)$$

onde $\tilde{P}(\psi)$ se relaciona com a PDF da média temporal da propriedade ψ através da expressão

$$\tilde{P}(\psi) = \frac{\rho(\psi)}{\bar{\rho}} P(\psi). \quad (5.25)$$

As formas das funções de densidade de probabilidade variam para diversos tipos de escoamento e podem ser calculadas através de diferentes métodos. Dentre esses métodos destacam-se os métodos das PDF's presumidas, como, por exemplo, a função do tipo β e a função Gaussiana limitada, e, também, o método das PDF's transportadas. O método das PDF's transportadas é mais elaborado que os das PDF's presumidas, em que equações de transporte são resolvidas para a determinação das PDF's do escoamento. Entretanto, apesar de ser mais exato, o método das PDF's transportadas exige um custo de processamento elevado (VERSTEEG; MALALASEKERA, 2007). Por outro lado, os métodos das funções de densidade de probabilidade dos tipos β e Gaussiana limitada se apresentam como alternativas de baixo custo de processamento para a modelagem de processos de combustão turbulenta. As funções do tipo PDF presumida permitem aproximações razoáveis para a estimativa de temperatura e das espécies de maior concentração no escoamento. Jones e Whitelaw (1982) ao revisarem algumas dessas funções presumidas observam que a função beta produziu os resultados com maior exatidão, juntamente com a função Gaussiana limitada. A β -PDF é considerada por Versteeg e Malalasekera (2007) como a mais utilizada atualmente por programadores e por códigos comerciais de CFD (Computational Fluid Dynamics). Sua facilidade de implementação foi uma das principais razões para ela ser utilizada no código computacional desenvolvido no trabalho [SACOMANO]. A Equação 5.26 ilustra a expressão utilizada para o cálculo da função β -PDF para a fração de mistura (CHEN; CHANG; CHEN, 1994).

$$\tilde{P}(\psi) = \frac{f^{\alpha-1} (1-f)^{\beta-1}}{\int_0^1 f^{\alpha-1} (1-f)^{\beta-1}}, \text{ ou } \frac{f^{\alpha-1} (1-f)^{\beta-1} \Gamma(\alpha-\beta)}{\Gamma(\alpha) \Gamma(\beta)} \quad (5.26)$$

onde $\Gamma(\psi)$ é a função gama, a definição desta função pode ser encontrada em Pope (2000a), enquanto que

$$\alpha = \tilde{f} \left[\frac{\tilde{f} (1 - \tilde{f})}{\widetilde{f''^2}} \right], \quad (5.27)$$

$$\beta = \frac{(1 - \tilde{f})}{\tilde{f}} \alpha. \quad (5.28)$$

No contexto de combustão turbulenta, pode-se usar os modelos laminares - Folha de Chama (item 3.1), Equilíbrio Químico (item 3.2) e Elemento de Chama Laminar (item 3.3), fazendo-se a integração indicada nas Eq.(5.24) a (5.28) com as estruturas de chama laminares parametrizada pela fração de mistura. Estes modelos foram utilizados nas aplicações mostradas no Capítulo 9.

Capítulo 6

Transporte de Função Densidade de Probabilidade

Luis Fernando Figueira da Silva

César Celis

6.1 Introdução

Este capítulo tem por objetivo apresentar conceitos fundamentais associados ao transporte de função densidade de probabilidade (em inglês *Probability Density Function* - PDF) das propriedades do escoamento turbulento reativo. Nesta técnica a PDF é resultado da modelagem, e não objeto de hipóteses *ad-hoc*. O enfoque aqui adotado pretende ser mais fenomenológico do que matemático. Assim, quando for necessário consolidar os conceitos sob a forma de equações, estas serão colocadas sem derivação. A abordagem deste capítulo se aplica tanto à modelagem computacional quanto à experimental, uma vez que se admite que as equações que descrevem com exatidão o movimento do fluido são conhecidas.

A principal vantagem da utilização da técnica de função densidade de probabilidade transportada é descrever de modo completo as propriedades flutuantes, locais e instantâneas, do escoamento turbulento reativo. Desta forma, a partir do conhecimento

da PDF é possível obter todas as propriedades do escoamento como funções desta. Por conseguinte, esta abordagem evita o problema de fechamento dos termos de produção associados à transformação termoquímica e permite um tratamento geral da composição das correntes de reagentes. Entretanto, um problema de fechamento aparece associado ao processo de mistura molecular (micromistura), o que será visto mais adiante.

De modo geral, as propriedades do escoamento reativo que se pretende descrever com a técnica de função densidade de probabilidade transportada são a velocidade, a temperatura (ou a entalpia, ou a energia interna), a composição (frações de massa ou molares) e a pressão. A descrição clássica de escoamentos reativos utiliza as equações de transporte de massa das espécies químicas, quantidade de movimento e de energia. Estas equações devem ser fechadas por equações de estado para as substâncias transportadas e por equações constitutivas descrevendo o comportamento microscópico (molecular). Uma situação física particular é especificada por condições iniciais e de contorno.

No caso de escoamentos turbulentos as propriedades transportadas são admitidas variáveis aleatórias, cujos valores dependem do tempo e da localização no espaço físico. Assim, cada amostragem (muitas vezes chamada de realização) de um escoamento, seja ela obtida mediante simulação ou experimento, leva a valores distintos destas propriedades. Entretanto, por simplicidade, neste texto introdutório é considerada apenas uma variável aleatória, θ , função do tempo t e de uma única direção no espaço, x . Esta variável aleatória pode representar uma temperatura reduzida, $0 \leq \theta = [T(x, t) - T_0]/[T_1 - T_0] \leq 1$, onde T_1 e T_0 são as temperaturas máxima e mínima do escoamento, ou, então, uma fração mássica reduzida de um reagente ou produto de combustão, ou ainda em outras circunstâncias a fração de mistura dos reagentes. Por isto θ é muitas vezes chamada de composição ou, então, de escalar.

Admite-se assim, para fins de apresentação, que as demais propriedades de interesse são conhecidas, muito embora na prática isto possa não ser verdade. Note-se que todas as PDFs consideradas neste capítulo são do tipo uni-ponto, isto é, PDFs de variáveis aleatórias de uma única posição do espaço e de um único tempo. Em particular, estas PDFs não permitem descrever a frequência ou a escala de comprimento das flutuações das propriedades turbulentas.

Nesse contexto, é usual definir a função densidade de probabilidade da propriedade aleatória $\theta(x, t)$, $\mathcal{F}_\theta(\varphi; x, t)$, como sendo a probabilidade \mathcal{P} de se observar, num determinado local e instante, o valor de θ em uma faixa de variação infinitesimal $(\varphi, \varphi + d\varphi)$:

$$\mathcal{F}_\theta(\varphi; x, t) = \mathcal{P} \{ \varphi \leq \theta(x, t) < \varphi + d\varphi \}, \quad (6.1)$$

onde φ é o chamado espaço amostral da PDF. Conhecendo-se $\mathcal{F}_\theta(\varphi; x, t)$ a média de toda função $f = f(\theta)$ pode ser determinada:

$$\langle f \rangle = \langle f(x, t) \rangle = \int_0^1 f(\varphi) \mathcal{F}_\theta(\varphi; x, t) d\varphi. \quad (6.2)$$

Em particular, determina-se assim o valor médio do termo de produção associado à transformação química, bem como dos momentos estatísticos de f . Logo, se $\mathcal{F}_\theta(\varphi; x, t)$ é conhecida, desaparece o problema de fechamento clássico da combustão turbulenta. Materializa-se assim a principal vantagem que justifica o uso da técnica de PDF transportada.

Desde o trabalho pioneiro de revisão de Pope (1985), diversos textos abordam aspectos da técnica de transporte da função densidade de probabilidade. Recomenda-se a leitura destes textos para obter um conhecimento aprofundado nas técnicas de PDF transportada. Dopazo (1994) apresenta as definições estatísticas básicas, noções de modelos estocásticos e a relação existente entre métodos de partículas e de PDF transportada. Pope (2000b) introduz os métodos de PDF transportada e sua aplicação para escoamentos turbulentos de composição fixa. Heinz (2003) discute os métodos estocásticos que podem ser usados para resolver escoamentos turbulentos e reativos, com ênfase em alguns desenvolvimentos recentes. Fox (2003) propõe uma descrição completa do transporte da função densidade de probabilidade conjunta da velocidade e da composição da mistura, com ênfase na apresentação exaustiva dos principais modelos existentes. Haworth (2010) faz um balanço dos progressos recentes das técnicas de função densidade de probabilidade transportada, apontando os principais desenvolvimentos e desafios. Recentemente Celis e Silva (2015a) examinam estado da arte dos modelos de micro-mistura e apontam direções a serem seguidas para a melhoria destes.

Este capítulo prossegue com a descrição do transporte de PDF de um escalar reativo em escoamento de um fluido. Depois se discutem os principais aspectos relacionados à modelagem dos termos abertos na equação de transporte de PDF. Em seguida

apresentam-se os principais modos usados para se descrever o transporte de uma PDF e, também, as equivalências entre formulações Eulerianas e Lagrangeanos. São discutidos alguns resultados ilustrativos do transporte de escalar na ausência e na presença de escoamento. Por fim, aborda-se brevemente os desafios atuais.

6.2 Transporte de PDF de um escalar reativo

As propriedades do fluido em escoamentos turbulentos reativos são modificadas devido aos processos de convecção, difusão molecular e reação química. Uma vez que a PDF quantifica a probabilidade de se observar as propriedades do fluido em um intervalo infinitesimal em torno de um dado valor [Equação 6.1], é de se esperar que estes mesmos processos influenciem o transporte de $\mathcal{F}_\theta(\varphi; x, t)$. Assim, o transporte da PDF é realizado tanto no espaço físico (x) como no espaço de composição (θ).

O transporte de PDF é ilustrado fazendo uso de instantâneos de um volume de controle contendo regiões onde os valores da propriedade considerada (θ) variam. A forma da PDF é inferida da amostragem dos valores medidos em cinco sondas, fixas, localizadas no interior do volume de controle, tal como mostrado na Figura 6.1. Num primeiro momento os processos são analisados de um ponto de vista determinístico (laminar), em seguida os resultados são estendidos ao caso estocástico (turbulento).

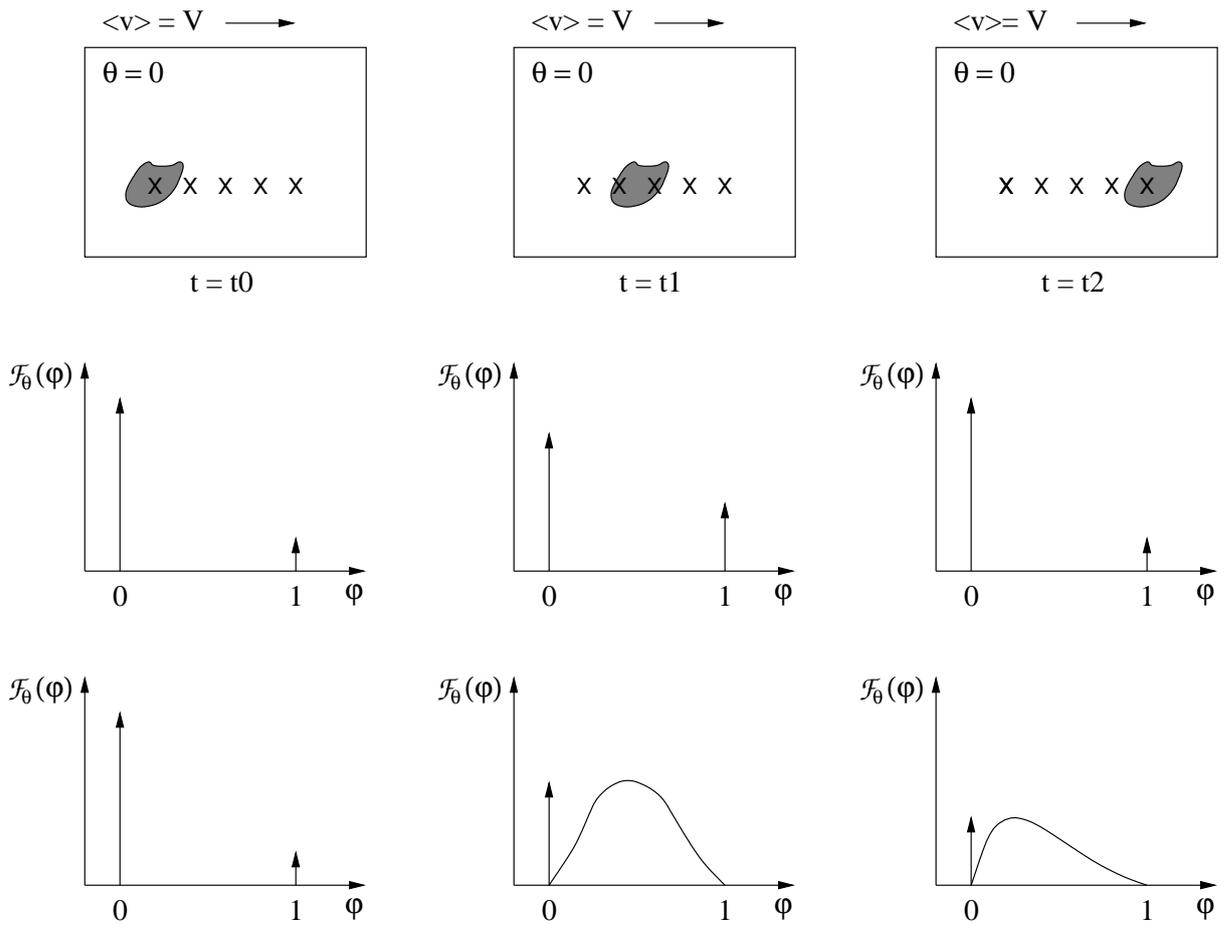


Figura 6.1 – Evolução no tempo do transporte de PDF devido ao processo de convecção. Espaços físico (topo), de composição, caso determinístico (centro), de composição, caso estocástico (baixo).

6.2.1 Transporte determinístico

No caso de transporte determinístico (laminar) todas as realizações do escoamento são idênticas. Assim, num dado ponto e num dado instante, a PDF de θ é representada por $\delta(x)$, função delta de Dirac. Logo, $\mathcal{F}_\theta(\varphi; x, t)$ no volume de controle é dada por uma combinação de funções delta de Dirac.

6.2.1.1 Convecção

O transporte da PDF de escalar reativo devido ao processo de convecção (advecção) é ilustrado na Figura 6.1. Nesta figura são mostrados instantâneos do volume de controle em três momentos diferentes ($t_2 > t_1 > t_0$) e as PDFs correspondentes. O escoamento é monodimensional com velocidade média $\langle v \rangle = V$. O valor da propriedade θ no volume de controle é zero, exceto na região mais escura, onde $\theta = 1$. No instante inicial (t_0), tal como observado no lado esquerdo da Figura 6.1, somente uma sonda de amostragem mede $\theta = 1$. As sondas restantes medem $\theta = 0$, ou seja, $\varphi_1 = 1$ e $\varphi_i = 0, 2 \leq i \leq 5$. Esta situação leva a uma PDF composta por duas funções delta de Dirac, onde a probabilidade de que θ seja igual a 0 é maior do que a probabilidade de que θ seja igual a 1.

O processo puramente advectivo origina um deslocamento no volume de controle da região mais escura do escoamento, de tal forma que no instante t_1 as sondas 2 e 3 registram valores de θ iguais a 1, e as três restantes valores iguais a 0 (Figura 6.1, centro). Como consequência, em t_1 $\mathcal{F}_\theta(\varphi; x, t)$ é diferente da PDF no instante inicial. Finalmente, num instante posterior t_2 , embora exista um deslocamento da região mais escura do escoamento, a PDF é idêntica à do instante t_0 , pois somente $\varphi_5 = 1$.

Neste exemplo simples, caracterizado por uma invariância translacional da composição, é possível constatar que uma mesma situação física pode ser representada por PDFs distintas, dependendo do momento em que a amostragem é realizada. Isto ocorre pois as PDFs usadas fornecem informações em cada ponto e a cada instante separadamente, mas não informações conjuntas (correlacionadas) em dois ou mais pontos.

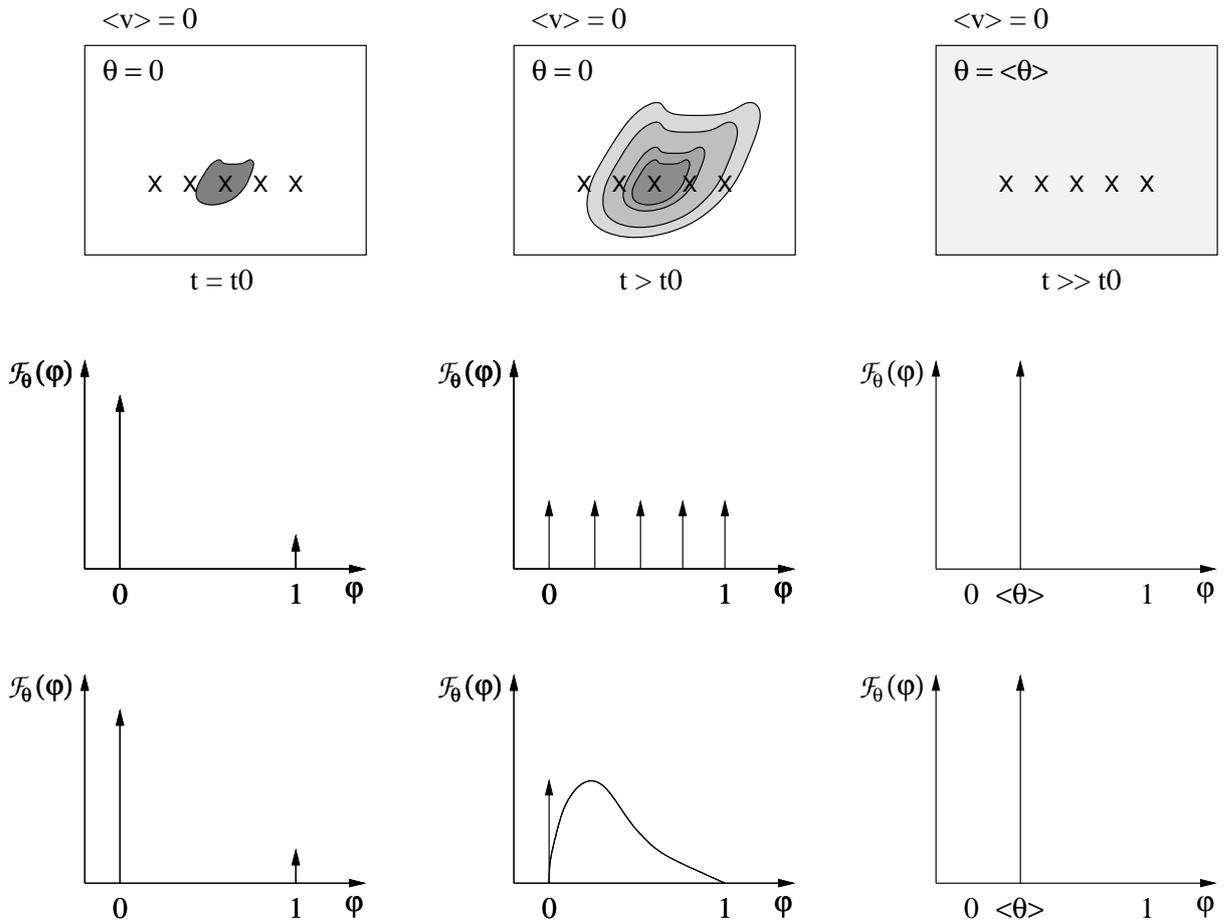


Figura 6.2 – Evolução no tempo do transporte de PDF devido ao processo de difusão. Espaços físico (topo), de composição, caso determinístico (centro), de composição, caso estocástico (baixo).

6.2.1.2 Difusão

Similarmente ao caso convectivo, a análise é realizada observando instantâneos do volume de controle (Figura 6.2), numa situação em que o valor médio de velocidade é zero ($\langle v \rangle = 0$). Como pode ser observado no lado esquerdo da Figura 6.2 (centro), no instante inicial (t_0), a PDF é idêntica àquela considerada no início do processo convectivo discutido acima.

O processo difusivo leva ao espalhamento da região mais escura presente inicialmente no volume de controle. Assim, num instante posterior, $t > t_0$, as sondas de amostragem medem valores diferentes de θ , levando a mudanças significativas na forma da PDF (Figura 6.2, centro). Finalmente, após um lapso de tempo longo o suficiente

($t \gg t_0$), o processo difusivo (no espaço físico) leva à homogeneização da propriedade θ no volume de controle. Neste estágio final, os valores medidos nas sondas de amostragem são idênticos ao valor médio da propriedade dentro do volume de controle, $\varphi_i = \langle \theta \rangle$. Logo, a PDF correspondente é composta por apenas uma única função delta de Dirac, como pode ser observado no lado direito da Figura 6.2 (centro). No espaço de composição (φ) tal comportamento é muitas vezes chamado de anti-difusivo.

Note-se que os processos de convecção e de difusão não alteram $\langle \theta \rangle$ no volume de controle, entretanto a forma da PDF muda. Assim, não é possível determinar a PDF com base apenas neste primeiro momento estatístico. No processo de difusão, a forma da PDF está ligada à escala de comprimento de θ , isto é, à $\langle \theta \rangle / \langle \nabla \theta \rangle$, ou seja quando $\langle \theta \rangle / \langle \nabla \theta \rangle \rightarrow \infty$ a variância de θ , $\langle \theta'^2 \rangle$, tende a zero ($\theta' = \theta - \langle \theta \rangle$).

6.2.1.3 Reação

O transporte de PDF de um escalar reativo é ilustrado considerando que o processo de reação química ocorre num meio homogêneo, onde a velocidade média do escoamento é zero ($\langle v \rangle = 0$). Assim, nos três instantes de tempo analisados (Figura 6.3), uma vez que as sondas de amostragem medem o mesmo valor $\varphi_i = \langle \theta \rangle(t)$, as PDFs características são compostas por uma única função delta de Dirac.

A posição no espaço de composição de cada uma destas funções delta de Dirac corresponde ao valor médio da propriedade no volume de controle. O processo de reação química no meio homogêneo faz com que o valor médio de θ mude ao longo do tempo. Desta forma, como pode ser visto na Figura 6.3, partindo de uma condição inicial (em $t = t_0$), as PDFs correspondentes em instantes posteriores (t_1 e t_2) são transportadas no espaço de composição.

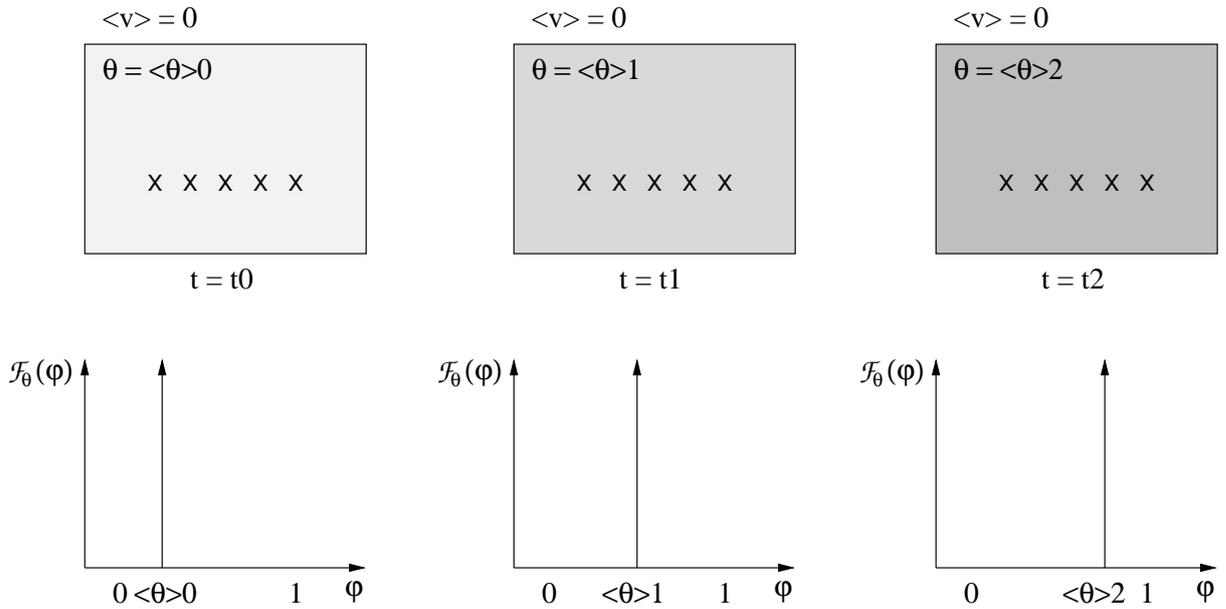


Figura 6.3 – Evolução no tempo do transporte de PDF devido ao processo de reação. Espaços físico (topo), de composição, casos determinístico e estocástico (baixo).

6.2.2 Transporte estocástico

Quando ocorrem flutuações turbulentas, a análise apresentada acima tem que ser refeita com base em um número suficientemente grande de realizações do escoamento. Em cada uma destas realizações o escoamento é diferente, logo, uma análise estocástica é indispensável. Como consequência as PDFs medidas em escoamento turbulento são compostas de funções contínuas da composição.

A fim de facilitar a compreensão das interações turbulentas, o escoamento turbulento é considerado imposto, ou seja, que a velocidade instantânea no volume de controle, $v(x, t)$, é conhecida. Este campo turbulento influencia a distribuição $\theta(x, t)$ a partir das mesmas condições iniciais que no caso determinístico. A parte inferior das Figs. 6.1- 6.3 mostra as PDFs de θ obtidas para um grande número de realizações do escoamento.

6.2.2.1 Convecção

A convecção turbulenta tem por efeito deformar aleatoriamente a região onde $\theta = 1$ sem promover, no entanto, sua mistura com o fluido ao redor ($\theta = 0$), cuja quantidade permanece em excesso. Tal como o mostrado na Figura 6.1 (inferior), as inúmeras

realizações necessárias para construir \mathcal{F}_θ levam, em $t > t_0$ a uma distribuição contínua, à exceção da função delta de Dirac $\delta(0 - \varphi)$. Esta função delta na PDF representa a existência, em todos os instantes e em pelo menos um dos pontos de medição, de fluido com $\theta = 0$, o que ocorre devido à forma como são especificadas as condições iniciais e de contorno. Note-se que a forma da parte contínua desta PDF é determinada pelo processo turbulento. Assim, se a turbulência imposta for do tipo homogênea e isotrópica, à medida em que o tempo passa ($t \gg t_0$), a parte contínua da PDF torna-se mais espalhada, sem que ocorra, no entanto, mistura entre os fluidos caracterizados com $\theta = 0$ e $\theta = 1$.

6.2.2.2 Difusão

Mesmo na ausência de escoamento médio ($\langle v \rangle = 0$) a sobreposição de flutuações turbulentas de velocidade e do processo de difusão molecular leva um comportamento mais complexo do que o de convecção pura. Tal como pode ser constatado na Figura 6.2 (inferior), num primeiro momento ($t > t_0$), \mathcal{F}_θ é constituída de uma parte contínua e de outra discreta. Porém, a medida em que a difusão molecular atua, isto é, que os valores de θ tornam-se mais homogêneos, a forma da PDF aproxima-se de uma função de Gauss – isto pode ser demonstrado. Finalmente, para períodos de tempo mais longos ($t \gg t_0$), a variância desta gaussiana $\langle \theta'^2 \rangle$ tende a zero e $\mathcal{F}_\theta \rightarrow \delta(\theta - \langle \theta \rangle)$.

6.2.2.3 Reação

Na situação analisada, em que o valor inicial de θ é uniforme no interior do volume de controle, no caso estocástico a evolução de \mathcal{F}_θ é idêntica ao caso determinístico. Assim, num determinado instante não ocorrem variações no interior do volume de controle e a PDF permanece sendo uma função delta de Dirac, tal como pode ser visto na Figura 6.3. De fato, mesmo na presença de uma distribuição inicial de θ , o efeito da reação química, que é um processo local, é apenas de deslocar a PDF em θ . Esta observação está relacionada ao fato de que na abordagem de transporte da PDF a produção química não requer fechamento.

6.3 Equação de transporte da PDF

A equação de transporte de PDF do escalar reativo visa representar o transporte da PDF devido aos processos de convecção, difusão e reação discutidos acima. Esta equação é expressa como:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\mathcal{F}_\theta) + \frac{\partial}{\partial x} (\tilde{v}\mathcal{F}_\theta) = -\frac{\partial}{\partial x} \left(\langle v'' | \psi \rangle \mathcal{F}_\theta \right) - \frac{\partial}{\partial \psi} \left(\left\langle D \frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} \middle| \psi \right\rangle \mathcal{F}_\theta \right) - \frac{\partial}{\partial \psi} (S(\psi)\mathcal{F}_\theta) \quad (6.3)$$

Notação um pouco diferente da usada nos capítulos anteriores é empregada para distinguir os valores médios das variáveis e os desvios correspondentes, oriundos das decomposições de Reynolds e de Favre. Assim, a média e flutuação de Reynolds de uma variável Q são denotadas por $\langle Q \rangle$ e $Q' = Q - \langle Q \rangle$, respectivamente. Por sua vez, a média e flutuação de Favre de Q são denotadas por, respectivamente, \tilde{Q} e $Q'' = Q - \tilde{Q}$. Pode ser mostrado que $\tilde{Q} = \langle \rho Q \rangle / \langle \rho \rangle$, onde ρ é a densidade.

Na Equação 6.3, o segundo termo do lado esquerdo representa a convecção (isto é, a advecção) de \mathcal{F}_θ pelo campo de velocidade média \tilde{v} . O primeiro termo do lado direito desta equação descreve os efeitos, sobre \mathcal{F}_θ , da convecção (advecção) turbulenta, pela flutuação da velocidade; o segundo, os efeitos da mistura molecular (difusão); e o terceiro, os efeitos do processo de reação química. Como observado na Equação 6.3, \mathcal{F}_θ muda no tempo devido (i) ao transporte no espaço físico, causado pela velocidade média e sua flutuação, e (ii) ao transporte no espaço de composição, causado pelo processo de difusão e pela reação química. Todos os termos da Equação 6.3 encontram-se fechados, exceto aqueles envolvendo médias condicionadas $\langle \dots | \psi \rangle$. Estas médias condicionais aparecem pois o transporte de \mathcal{F}_θ no espaço de composição depende dos valores locais de v'' e de $\nabla^2 \theta$.

É particularmente importante salientar que a principal virtude dos métodos de PDF transportada vem do fato de que o termo que envolve as reações químicas, último termo do lado direito da Equação 6.3, aparece fechado, ou seja, não é necessário nenhum tipo de modelagem para este termo. Como consequência, escoamentos com densidade variável envolvendo inúmeras reações químicas arbitrariamente complexas podem ser tratados sem aproximação.

Dos termos que precisam de modelos, a modelagem do segundo termo do lado direito da Equação 6.3, envolvendo a divergência do fluxo do escalar reativo, é particularmente desafiadora, pois esta envolve a interação entre turbulência, mistura e o processo de reação química. Ao longo dos anos, diferentes modelos têm sido propostos para este termo; porém ainda não foi desenvolvido um modelo capaz de apresentar todas as características desejáveis (CELIS; SILVA, 2015a).

A solução da Equação 6.3 requer a especificação de condições iniciais, $\mathcal{F}_\theta(x, 0)$, e de condições de contorno. Estas condições de contorno devem representar a PDF nas fronteiras do domínio de interesse no espaço físico, x , e também no espaço de composição, θ . A especificação destas condições de contorno é uma das grandes dificuldades associadas à solução direta desta equação, em particular no caso em que a PDF representa a composição química de uma mistura multicomponentes. As principais abordagens utilizadas para a modelagem dos termos abertos da Equação 6.3 são discutidas a seguir.

6.3.1 Modelagem dos termos abertos

O primeiro dos termos abertos na Equação 6.3 representa o transporte da PDF da composição sob efeito da velocidade turbulenta condicionada, $\langle v'' | \psi \rangle \mathcal{F}_\theta$. O modo mais simples de modelar este termo é tratá-lo como sendo proporcional ao gradiente da quantidade sendo transportada, tal como feito usualmente em modelos de turbulência,

$$\langle v'' | \psi \rangle \mathcal{F}_\theta = -D_T \frac{\partial \mathcal{F}_\theta}{\partial x}, \quad (6.4)$$

onde D_T é um coeficiente de difusão turbulenta, que então governa o transporte da PDF no espaço físico. Além de introduzir a necessidade de prover D_T para permitir a solução da Equação 6.3, esta hipótese de fechamento exerce uma influência mais drástica, pois modifica a natureza matemática da equação de transporte de PDF, que passa a ser anti-difusiva, o que corresponde ao comportamento discutido na seção 6.2.1.2. Como consequência, o problema de transporte da PDF passa a ser matematicamente mal colocado pois, quando $t \rightarrow \infty$, singularidades podem aparecer. No caso simples examinado acima, este comportamento é físico e representa, no problema de difusão turbulenta, a passagem de uma PDF contínua (gaussiana) para uma descontínua (Dirac). Entretanto, a possibilidade de comportamento singular dificulta a obtenção de soluções analíticas ou numéricas

da Equação 6.3. Exemplos de soluções obtidas para problemas simples serão vistos na seção 6.4. Uma técnica geral que substitui esta equação por um sistema equivalente de equações estocásticas será apresentado a seguir.

O segundo termo aberto na Equação 6.3 é o de transporte molecular condicionado. Tal como visto na seção 6.2.2.2, este termo representa o resultado da interação entre o processo de mistura molecular e a agitação turbulenta. O fechamento deste termo requer a especificação de modelos para este processo de mistura. Este é usualmente considerado o termo que controla, por sua interação com o termo de produção $S(\theta)$, os processos de combustão. Por esta razão são apresentados três modelos de mistura usuais. Um dos modelos mais simples que pode ser concebido para fechar este termo é o de interação por troca com a média [IEM (VILLERMAUX; DEVILLON, 1972) ou LMSE (DOPAZO; O'BRIEN, 1974)], o qual impõe uma relaxação linear em relação à composição média,

$$\left\langle D \frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} \middle| \psi \right\rangle \mathcal{F}_\theta = -C\Omega_T (\psi - \langle \theta \rangle) \mathcal{F}_\theta, \quad (6.5)$$

onde C é uma constante de proporcionalidade e Ω_T a escala integral de frequência turbulenta, que se supõe controlar o processo de mistura. Este modelo garante que, num processo de difusão pura, quando $t \rightarrow \infty$, $\theta \rightarrow \langle \theta \rangle$, tal como o observado na Figura 6.2. Isto ocorre pois todas as parcelas de fluido tendem, com a mesma taxa, ao valor médio da composição num dado volume de controle. Uma extensão de segunda ordem que é frequentemente considerada é o modelo de Langevin, LM (SABEL'NIKOV; SILVA, 2002),

$$\left\langle D \frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} \middle| \psi \right\rangle \mathcal{F}_\theta = -C\Omega_T (\psi - \langle \theta \rangle) \mathcal{F}_\theta - \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \psi} \left(\Omega_T \langle \theta'^2 \rangle \mathcal{F}_\theta \right). \quad (6.6)$$

Neste modelo não linear a dispersão em torno da média é controlada pela variância da PDF, $\langle \theta'^2 \rangle$.

Outro tipo de modelo para o processo de mistura é aquele que toma, em um dado volume de controle, parcelas de fluido distintas, promovendo sua mistura completa [modelo de coalescência e dispersão, CD (CURL, 1963)], ou incompleta [MCD, modelo CD modificado (JANICKA; KOLBE; KOLLMANN, 1979)]. Este tipo de modelo é semelhante, no seu conceito, aos modelos de comprimento de mistura de Prandtl usados para descrever a troca de quantidade de movimento em camadas cisalhantes turbulentas.

A substituição das Eqs. 6.4 e 6.6 na Equação 6.3 permite obter uma equação diferencial de segunda ordem para o transporte da PDF:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\mathcal{F}_\theta) &= \frac{\partial}{\partial x} \left(-\tilde{v}\mathcal{F}_\theta + D_T \frac{\partial \mathcal{F}_\theta}{\partial x} \right) \\ &+ \frac{\partial}{\partial \psi} \left(C\Omega_T(\psi - \langle \theta \rangle) \mathcal{F}_\theta + \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \psi} \left(\Omega_T \langle \theta'^2 \rangle \mathcal{F}_\theta \right) - S(\psi)\mathcal{F}_\theta \right), \end{aligned} \quad (6.7)$$

na qual são claramente evidentes os termos de transporte de \mathcal{F}_θ no espaço físico (x) e no espaço de composição (θ). Este tipo de equação é conhecida como Equação de Fokker-Planck (GARDINER, 2010).

6.3.2 Modelos para o transporte turbulento

É importante enfatizar que os modelos clássicos e simples introduzidos acima requerem a especificação de um coeficiente de difusão, D_T [Equação 6.4], e de uma frequência, Ω_T [Eqs. 6.5 e 6.6], que sejam representativos do processo de transporte da função densidade de probabilidade em escoamento turbulento. Ademais, a Equação 6.7 necessita da média da velocidade \tilde{v} para ser resolvida. Assim, é através da determinação destes coeficientes que ocorre o acoplamento entre o movimento do fluido e o processo de combustão. De modo geral, os métodos de determinação das propriedades do escoamento D_T e Ω_T podem ser separados em simulação usando (i) média de Reynolds (RANS), usando (ii) o método das grandes escalas (LES) e (iii) estocástica. Esta última, menos empregada, não é discutida aqui.

No caso do uso de RANS, classicamente são resolvidas equações de transporte de quantidade de movimento para o escoamento médio, acrescidas de equações que modelam o transporte turbulento. Estas permitem a determinação de um coeficiente de viscosidade turbulenta, ν_T , que por sua vez pode ser relacionado a D_T e a Ω_T . Assim, quando é empregado o modelo $k - \epsilon$, onde k é a energia cinética da turbulência e ϵ é sua taxa de dissipação, tem-se: $D_T \propto \nu_T = C_\mu k^2 / \epsilon$ e $\Omega_T = \epsilon / k$.

A LES se propõe a descrever o escoamento turbulento instantâneo nas escalas de comprimento que contenham o essencial da energia do movimento. Isto requer que seja modelado o transporte de energia cinética turbulenta entre estas grandes escalas e

aqueles onde ocorre a dissipação do movimento. O modelo mais simples para este processo de transporte é o de Smagorinsky, cuja aplicação implica em $D_T \propto \nu_T = (C_s \Delta_g)^2 |S|$ e $\Omega_T \propto |S| - C_s$ é uma constante, Δ_g é a menor escala de comprimento resolvida e $|S|$ é o módulo da taxa de deformação do escoamento.

6.3.3 Equação diferencial estocástica equivalente

Conforme foi indicado na seção 6.3.1, a Equação 6.7 possui natureza anti-difusiva, o que dificulta sua solução direta por técnicas clássicas de discretização, devido ao aparecimento de singularidades. A alternativa mais comum para obter soluções é utilizar um sistema equivalente de equações diferenciais estocásticas (SDE),

$$dx^+ = \left(\tilde{v} + \frac{dD_T}{dx} \right) dt + [2D_T]^{1/2} dW_x, \quad (6.8)$$

$$d\theta^+ = - \left(C\Omega_T ((\theta^+ - \langle \theta \rangle) + S(\theta) - \frac{d}{dx} (\Omega_T \langle \theta'^2 \rangle)) \right) dt + \left(2\Omega_T (\langle \theta'^2 \rangle) \right)^{1/2} dW_\theta, \quad (6.9)$$

onde dx^+ e $d\theta^+$ são, respectivamente, os incrementos de posição e de composição de partículas estocásticas que representam o movimento do fluido. A primeira destas equações descreve o transporte no espaço físico da PDF sob efeito da convecção média e da difusão turbulenta sendo, assim, equivalente aos dois primeiros termos do lado direito da Equação 6.7. A segunda realiza o transporte de \mathcal{F}_θ no espaço de composição da mistura. Os diferentes termos desta encontram seus equivalentes naqueles precedidos por $\partial/\partial\psi$ na Equação 6.7. A equivalência entre as duas formulações – equação de Fokker-Planck ou equação diferencial estocástica – pode ser demonstrada exatamente (GARDINER, 2010), entretanto esta demonstração está fora do escopo deste texto. A chave para a compreensão desta equivalência é o processo estocástico de Wiener, cujo incremento dW possui média nula, variância dt e distribuição gaussiana (GARDINER, 2010). Este processo representa o movimento Browniano de uma partícula, que por sua vez nada mais é do que um processo de difusão semelhante ao ilustrado na seção 6.3.1. Note-se que usualmente partículas estocásticas Lagrangeanas são empregadas para simular os processos aleatórios que constituem as equações diferenciais estocásticas [Eqs. 6.8-6.9] que resultam no transporte da PDF.

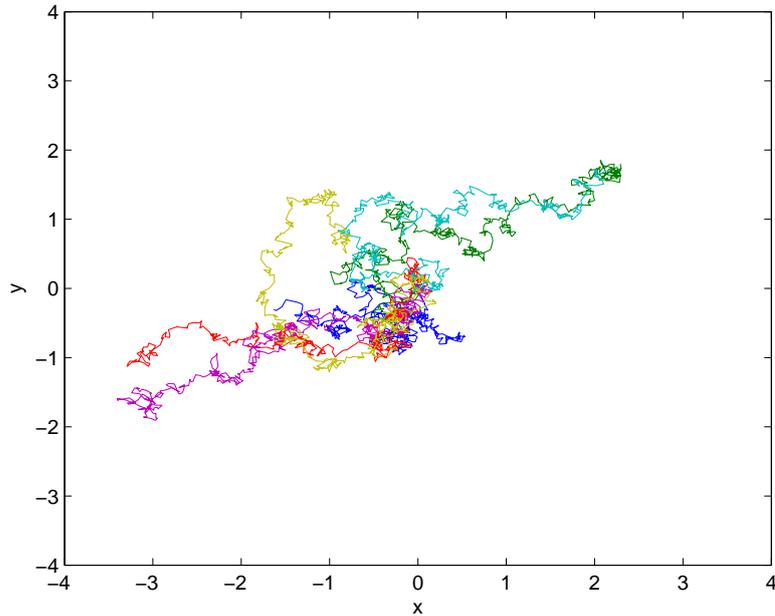


Figura 6.4 – Evolução no plano (x, y) da posição seis de partículas estocásticas, cada qual ilustrada por uma cor diferente.

A fim de ilustrar como as Eqs. 6.8-6.9 representam um processo de difusão simplificado, a Figura 6.4 mostra a trajetória de seis partículas, a partir da origem dos eixos coordenados $(x, y) = (0, 0)$. O deslocamento destas partículas segue a Equação 6.8, as quais estão sujeitas a um campo de velocidade média $(\tilde{u}, \tilde{v}) = (4y, 0)$ e a uma difusividade turbulenta $D_T = 1/2$. Este tipo de escoamento, de cisalhamento simples, é muito semelhante ao que pode ser encontrado em camadas de cisalhamento turbulentas quando o observador se desloca com a velocidade de advecção média do escoamento. O movimento aleatório, superposto ao determinístico, pode ser claramente observado na Figura 6.4. Nesta figura também pode ser constatado que, de modo geral, as partículas tendem a se afastar da origem, tal como se pode esperar em um processo de difusão. Há, no entanto, um movimento preferencial, que é associado à velocidade média do escoamento. No caso em que as partículas transportam um escalar com valor $\theta = 1$, diferente daquele característico do fluido ao seu redor (por exemplo $\theta = 0$), a concentração deste torna-se mais uniforme à medida que o tempo passa. Esta observação é consistente com a natureza anti-difusiva, no espaço de composição, deste processo. Isto ilustra o fato de que a solução

da equação diferencial estocástica é equivalente à da equação de Fokker-Planck.

6.4 Resultados representativos

6.4.1 Transporte de escalar na ausência de escoamento

A fim de permitir a compreensão do comportamento das PDFs em configurações simples, são apresentados aqui os resultados obtidos por Orbegoso e Silva (2009) na ausência de escoamento médio. Nas duas situações consideradas as flutuações turbulentas são impostas pela prescrição da frequência turbulenta, Ω_T .

6.4.1.1 Comportamento de modelos de mistura

A primeira configuração examinada é a de um volume de controle fechado no qual encontram-se inicialmente segregadas quantidades idênticas de pacotes de fluido com $\theta = 0$ e $\theta = 1$. No instante inicial \mathcal{F}_θ é prescrita como sendo uma função beta. A partir do instante inicial as parcelas de fluido misturam-se sem reagir quimicamente. A evolução dessa PDF é mostrada na Figura 6.5 para dois instantes de tempo, $\Omega_T t = 0,5$ e 2. Nesta figura, onde são comparados os resultados obtidos para três modelos de mistura, IEM, CD e MCD, pode ser claramente percebida a tendência de homogeneização da composição do fluido a medida que o tempo passa, pois a variância das PDFs calculadas diminui, sem que sua média ($\langle\theta\rangle = 0,5$) seja alterada. No entanto, a diferença das formas de \mathcal{F}_θ é marcante. Por um lado, o modelo IEM não altera a forma inicial da PDF, que permanece como uma função beta a medida que o processo de mistura ocorre. Por outro, os modelos CD e MCD tendem a uma forma que se assemelha a uma curva de Gauss, que é o comportamento esperado. Resultados semelhantes a estes são obtidos com o modelo de Langevin. Cabe ressaltar que a conservação da forma da PDF é a desvantagem mais grave do modelo IEM. Ainda assim, este modelo é largamente utilizado para modelagem da combustão turbulenta, o que pode ser explicado pela sua simplicidade de implementação e pelo baixo custo computacional envolvido.

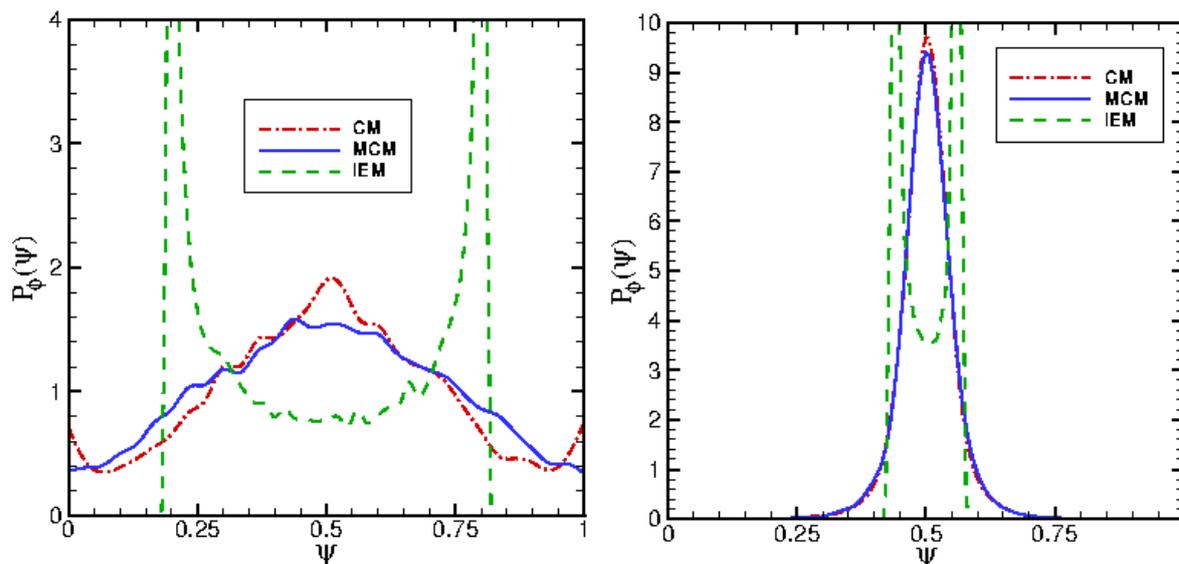


Figura 6.5 – Comparação das PDFs de composição obtidas com diferentes modelos de mistura (IEM, CD, MCD) em uma situação sem reação química: $\Omega_T t = 0,5$ (esquerda) e 2 (direita).

6.4.1.2 Reator parcialmente misturado

A segunda configuração examinada é a de um reator parcialmente misturado (PaSR), no qual ocorre competição entre os processos de mistura e de reação, com uma vazão de reagentes ($\theta = 0$) prescrita, os quais permanecem no reator durante um tempo de residência predeterminado. Contrariamente à situação precedente, de mistura pura, a PDF no PaSR exibe solução estacionária não trivial, a qual é mostrada na Figura 6.6. Nesta figura são comparados os histogramas obtidos da simulação de dois modelos de mistura, o IEM e o LM; a linha sólida é a solução analítica, que existe no caso do modelo IEM (SABEL'NIKOV; SILVA, 2002). Pode ser constatado que o estado estacionário no PaSR é caracterizado por uma quantidade apreciável de gases com composição $0 < \theta < 0,5$, o que corresponde à entrada e ao consumo progressivo de reagentes. Entretanto, a característica mais marcante é a presença de uma singularidade (integrável), que se manifesta sob a forma de valores elevados de \mathcal{F}_θ em $\theta \rightarrow \theta^* < 1$. A presença desta singularidade implica que há uma faixa de composição proibida no PaSR, i.e., $\theta > \theta^*$. Ademais, a integração direta da Equação 6.3 não pode ser feita com técnicas convencionais de discretização, pois estas são incapazes de tratar a presença de singularidades. A Figura 6.6

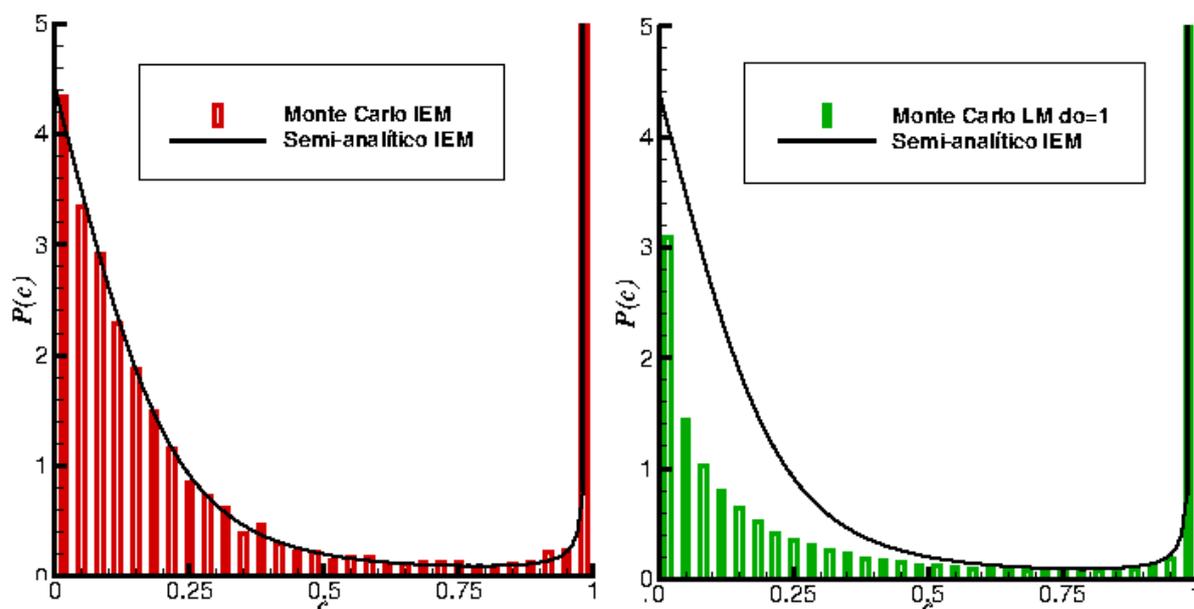


Figura 6.6 – Comparação das PDFs de composição obtidas com diferentes modelos de mistura em um reator parcialmente misturado (PaSR): IEM (esquerda), LM (direita).

também mostra que a escolha do modelo de mistura pode exercer uma influência sobre \mathcal{F}_θ . De fato, a segregação entre reagentes ($\theta = 0$) e produtos de combustão ($\theta \approx \theta^*$) no PaSR é modificada quando o modelo LM é adotado, muito embora a forma da PDF permaneça dominada pela singularidade.

6.4.2 Transporte de escalar em escoamento turbulento

A fim de ilustrar a aplicação da técnica de modelagem apresentada neste capítulo a uma situação na qual encontram-se acoplados os processos de transporte turbulento, de mistura e de reação química, são apresentados, na Figura 6.7, resultados de simulação da combustão de CO e O₂ em uma camada de cisalhamento que se desenvolve no tempo. Este par combustível/oxidante é aquele que corresponde ao menor mecanismo detalhado de cinética química da combustão e, também, um dos que possui as constantes de reação mais bem conhecidas (GARDINER JR, 2000). A configuração de camada de cisalhamento permite impor ao processo turbulento uma taxa de deformação média constante. No presente caso isto é feito tomando-se um domínio computacional de forma cúbica, com, na metade superior, combustível e, na inferior, oxidante. Nas faces laterais deste domínio

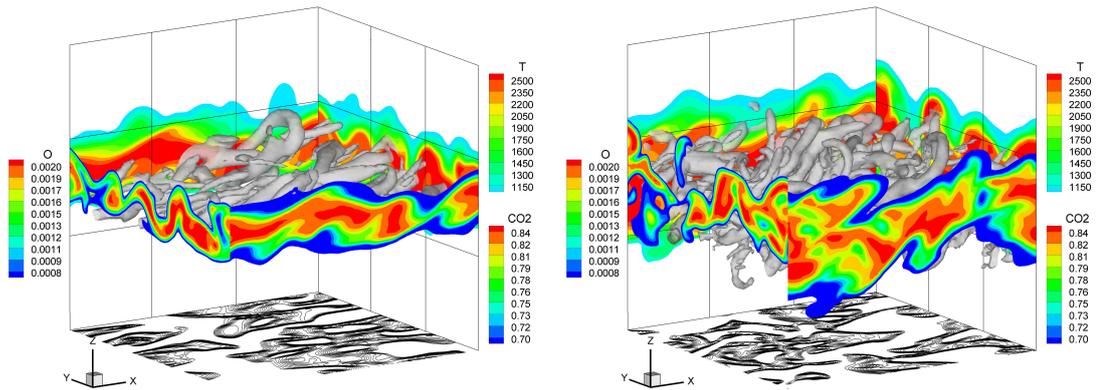


Figura 6.7 – Distribuição de temperatura (K) e de fração de massa de CO_2 e de O (campos) em uma camada de cisalhamento reativa em dois instantes de tempo $t = 1$ e 2. As iso-superfícies representam um valor constante do parâmetro $Q = 100$. Na base da figura são projetados os contornos do parâmetro Q .

são impostas condições de contorno periódicas, e nas faces superior e inferior é prescrita uma velocidade uniforme e paralela a estas, mas de sentido oposto em ambas as faces. A camada de cisalhamento é caracterizada, no instante inicial de seu desenvolvimento, por números de Reynolds e de Damköhler turbulentos de 33 e 0,25. Detalhes das condições iniciais e de contorno são dados em (CELIS; SILVA, 2015b). Nos resultados apresentados nesta seção apenas o modelo de mistura IEM é empregado. O processo de transporte turbulento é modelado empregando-se uma técnica de simulação numérica das grandes escalas [LES, (ANDRADE; SILVA; MURA, 2011; VEDOVOTO et al., 2011, 2015)].

Na Figura 6.7 é possível observar o desenvolvimento do escoamento turbulento e reativo na camada de cisalhamento em dois instantes de tempo diferentes. No centro desta figura são mostradas iso-superfícies de $Q = (|\mathbf{W}|^2 - |\mathbf{S}|^2) / 2$ constante, onde \mathbf{W} e \mathbf{S} são os tensores vorticidade e taxa de deformação, respectivamente. Esta maneira clássica de visualizar estruturas num escoamento indica o desenvolvimento progressivo da camada de cisalhamento. Nas faces laterais desta figura, os campos de temperatura e de fração de massa de O e de CO_2 permitem apreciar o desenvolvimento do processo de combustão e sua interação com o escoamento turbulento. No primeiro instante mostrado a frente de chama se encontra fortemente corrugada, mas parece manter sua continuidade, muito embora importantes flutuações nos valores das propriedades mostradas sejam perceptíveis.

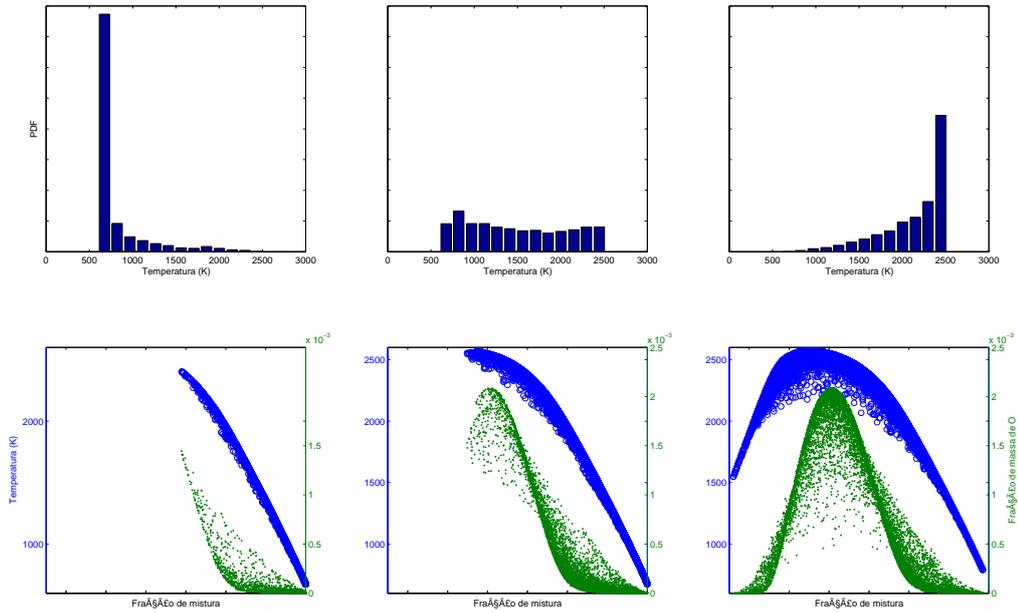


Figura 6.8 – PDF de temperatura (K) (topo) distribuição de temperatura (K) e de fração de massa do átomo de oxigênio como função da fração de mistura (baixo) em três alturas da camada de cisalhamento, 0,3 (esquerda), 0,4 (centro) e 0,5 (direita), $t = 2$.

No segundo instante a interação do processo de combustão e da turbulência resultam em “pacotes” de fração de massa de O isolados, o que caracteriza uma ruptura na estrutura da frente de chama. Simultaneamente, o campo de CO_2 exibe um comportamento não monotônico com a altura, z , a qual está relacionada à segregação inicial dos reagentes e, logo, à fração de mistura média. Modelos clássicos de combustão turbulenta, baseados na hipótese de continuidade da frente de chama, não são capazes de descrever este situação.

Os resultados obtidos também podem ser analisados em termos da PDF das propriedades do escoamento e de sua distribuição, tal como o ilustrado na Figura 6.8. Na parte superior desta figura são mostradas as PDFs da temperatura obtidas em três planos (x, y) , para os valores de $z = 0,3, 0,4, 0,5$, isto é, de uma região onde são encontrados principalmente reagentes ($T = 600$ K) a uma onde tem-se sobretudo produtos de combustão ($T = 2500$ K), passando por uma região em que os gases encontram-se em processo de queima. A forma da PDF calculada reflete esta mudança e pode ser comparada àquelas

postuladas na seção 6.2. Na parte inferior desta figura, onde são mostradas as distribuições instantâneas de temperatura e de fração de massa de O como função da fração de mistura, efeitos de não equilíbrio termoquímico podem ser facilmente constatados. De fato, por um lado, são encontrados valores de temperatura significativamente inferiores ao máximo observado para um dado valor de fração mistura. Por outro lado, a fração de massa de O exibe, nas regiões mais frias, valores que são superiores aos mais prováveis para um dado valor de fração de mistura. Esta riqueza de detalhes não pode ser descrita com técnicas de modelagem nas quais a função densidade de probabilidade é presumida.

6.5 Desafios atuais e perspectivas

Neste capítulo foram apresentados os conceitos básicos da técnica de transporte da função densidade de probabilidade aplicada à modelagem da combustão turbulenta. Estes conceitos podem ser desenvolvidos em diversas direções, em grau crescente de sofisticação.

No que diz respeito à descrição da transformação termoquímica, esta técnica permite acomodar mecanismos cinéticos tão detalhados quanto desejável, entretanto, com maior custo computacional. Técnicas de tabulação adaptativa vêm sendo usadas para reduzir este custo de várias ordens de grandeza (POPE, 1997; LU; POPE, 2009; JR; SILVA, 2014). Ainda assim, no caso de estudos que empregam simulação numérica das grandes escalas, faz-se necessário o emprego de mecanismos de cinética química reduzidos a um punhado de espécies e poucas dezenas de reações químicas (RAMAN; PITSCH, 2007; YANG et al., 2013).

A fim de aumentar o realismo da modelagem do acoplamento entre combustão e turbulência, a descrição em termos de PDF da composição pode ser estendida para a de uma PDF conjunta com a velocidade e com alguma escala de tempo ou comprimento da turbulência (SHEIKHI; GIVI; POPE, 2007, 2009). Esta extensão faz surgir novos problemas de fechamento, análogos por sua natureza aos encontrados acima, para os quais ainda não há modelos suficientemente consensuais e de grande faixa de aplicação.

Entretanto, o calcanhar de Aquiles deste da formulação apresentada, que considera estatísticas em um ponto e um tempo, é a descrição de processos que dependam

de gradientes das propriedades do escoamento. Isto é o caso, em particular, dos processos de transporte molecular, sejam eles de massa, de quantidade de movimento ou de energia. Esta dificuldade tem motivado o desenvolvimento de diversos modelos de mistura ao longo das últimas décadas (SUBRAMANIAM; POPE, 1998; CLEARY; KLIMENKO, 2009; MEYER; JENNY, 2013; POPE, 2013), sem que no entanto um modelo suficientemente abrangente tenha surgido (STÖLLINGER; HEINZ, 2010).

A fim de permitir o desenvolvimento de novos modelos de mistura, duas grandes vias tem sido exploradas num passado recente. A primeira consiste em realizar simulações numéricas diretas em configurações simples, tal como a de chamam turbulentas pré-misturadas ou não (KRISMAN et al., 2014). Mesmo que este tipo de simulação ainda esteja limitada a número de Reynolds moderados, afastados da realidade prática, tem possibilitado o refinamento de modelos existentes. A segunda via é a de desenvolvimento de experimentos realizados em situações simples, mas representativas de queimadores práticos (CAETANO; SILVA, 2015). Somente a medição simultânea de múltiplas propriedades do escoamento, com alta resolução espacial e temporal (CAI et al., 2011) permitirá investigar o detalhe das interações entre combustão e turbulência nestas situações. Um ponto fundamental comum à ambas abordagens experimental e computacional é que as grandes bases de dados geradas ainda necessitam ser exploradas com técnicas matemáticas capazes de extrair delas informações relevantes.

Capítulo 7

Transferência de Calor por Radiação Térmica nos Processos de Combustão

Guenther Carlos Krieger Filho

Rogério Gonçalves dos Santos

Carlos Salinas

7.1 Transferência de Calor por Radiação Térmica nos Processos de Combustão

Radiação Térmica é a transferência de energia, na interação tipo calor entre sistema e vizinhança, pela emissão de ondas eletromagnéticas ou fótons. Na maioria dos problemas de engenharia térmica, a banda do espectro eletromagnético de interesse é de 0.1 a $100\mu\text{m}$. Em problemas de combustão, em especial, onde existem partículas sólidas ou fuligem, o processo de transferência de energia por radiação térmica não pode ser negligenciado.

Como será mostrado adiante, o processo de transferência de calor por radiação

em um meio que interfere neste processo, ou seja, um meio participante, é proporcional à espessura óptica do meio. Assim, quanto maior for o domínio (ou tamanho da chama), maior será a importância da radiação térmica. Há uma grande separação de escalas de tempo entre radiação (ondas eletromagnéticas 3×10^8 m/s) e velocidade do som (3×10^2 m/s). Assim, pode-se assumir que a radiação está em equilíbrio quase-estático, ou seja, o campo de radiação se ajusta quase que instantaneamente em comparação a uma perturbação no campo de pressões e velocidade. Por outro lado, os campos de concentração e temperatura alteram o campo de radiação e as trocas radiativas, as quais alteram as condições de contorno da equação da energia da fase gasosa.

Em problemas de combustão, o meio ou o fluido participa do processo radiativo. O fluido pode emitir, absorver ou espalhar radiação. Assim, estes fluxos de energia radiativa nas fronteiras do volume de controle devem ser computados no balanço de energia.

A contribuição da radiação na equação da energia da fase gasosa (Equação ??) é formulada como um termo de fonte ($\dot{Q} = S_{rad}$).

$$S_{rad} = -\frac{1}{\Delta V} \nabla \cdot \mathbf{q}_{rad} = -\frac{1}{\Delta V} \int_A \mathbf{q}_{rad} \cdot \mathbf{n} dA, \quad (7.1)$$

onde ΔV é o volume do volume de controle, A é a área superficial do volume de controle, \mathbf{q}_{rad} é o vetor fluxo de calor por radiação térmica e \mathbf{n} é o vetor normal do elemento infinitesimal de área dA .

O modelo de radiação, com meio participante, descreve o procedimento de cálculo de \mathbf{q}_{rad} , como apresetado a seguir.

7.1.1 Poder Emissivo e Intensidade de Radiação

Duas grandezas físicas básicas na modelagem de fenômeno de radiação térmica são o Poder emissivo E e a Intensidade de radiação espectral I_λ .

A intensidade de radiação espectral, I_λ , é a taxa de energia radiativa por unidade de ângulo sólido e por unidade de área normal ao feixe radiativo, por unidade de comprimento de onda. Na Figura 7.1 são mostrados os parâmetros geométrico de interesse

intensidade de radiação não é a Distribuição de Planck e, portanto, precisa de um modelo para a sua avaliação. Neste capítulo é mostrado como são calculadas as trocas radiativas, com meio participante, no presente estudo.

7.1.2 Equação da Transferência de Calor por Radiação - (RTE)

A determinação da distribuição da intensidade de radiação no domínio de cálculo é feita pela equação

$$\underbrace{\frac{dI(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}})}{ds}}_I = \underbrace{\kappa I_b(\mathbf{r})}_{II} - \underbrace{\kappa I(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}})}_{III} - \underbrace{\sigma_s I(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}})}_{IV} + \underbrace{\frac{\sigma_s}{4\pi} \int_{4\pi} I(\hat{\mathbf{s}}_i) \Phi(\hat{\mathbf{s}}_i, \hat{\mathbf{s}}) d\Omega_i}_V. \quad (7.3)$$

Na Equação 7.3, $I(\mathbf{r}, \mathbf{s})$ é a Intensidade da radiação no ponto localizado em \mathbf{r} e na direção $\hat{\mathbf{s}}$, num determinado número de onda η . O termo I informa a taxa de variação da Intensidade por unidade de comprimento do caminho do raio; o termo II indica o aumento da Intensidade pela emissão do meio; o termo III indica a diminuição da Intensidade pela absorção do meio; o termo IV informa a diminuição da Intensidade pelo espalhamento do meio e o termo V mostra o aumento da Intensidade pelo espalhamento (convergência) da radiação incidente, vinda na direção $\hat{\mathbf{s}}_i$, num ponto da superfície do volume de controle. A Equação 7.3 em inglês é denominada *Radiative Transport Equation (RTE)*. Esta abreviatura também será utilizada no presente trabalho. A RTE mostra como o meio participante, por exemplo os produtos de combustão, interfere com a energia radiante que trafega no domínio de cálculo.

7.1.3 Atenuação da Intensidade por Absorção e Espalhamento (*scattering*)

A intensidade espectral da radiação I_η , incidente em um volume elementar de espessura ds é atenuada, à medida que atravessa ds , devido à absorção e ao espalhamento de radiação no meio. A absorção é o fenômeno que ocorre quando a energia penetra no meio participante, seja o meio constituído de moléculas de um gás, bolhas ou partículas

sólidas, e este converte a energia radiante incidente em energia interna. O fenômeno de espalhamento é muito mais complexo que o de absorção. Pode ser descrito, de modo simplificado, como o encontro entre um fóton e uma ou mais partículas sofrendo o fóton uma mudança de direção e a perda ou o ganho de energia. Um feixe de luz, ao interceptar, por exemplo, uma nuvem de partículas sólidas, pode sofrer o espalhamento, ou seja, a luz pode ser “espalhada” em diferentes direções. O modo como a luz é espalhada é definida através de uma função de fase a ser apresentada adiante. As teorias que tratam do fenômeno de espalhamento devido a uma partícula, cada qual com aplicação restrita, por exemplo espalhamento Rayleigh e Mie, dependem de parâmetros como o diâmetro de partícula e comprimento de onda.

Experimentalmente foi constatado que a atenuação espectral da intensidade espectral (I_η) é diretamente proporcional à magnitude da intensidade espectral incidente e à distância percorrida no meio participante. Assim,

$$(dI_\eta)_{abs} = -\kappa I_\eta ds, \quad (7.4)$$

onde κ é o coeficiente de absorção do meio e é função da temperatura, pressão, composição do material e do número de onda (η) da radiação incidente. O sinal negativo é devido à atenuação de I_η .

Um parâmetro físico muito utilizado na avaliação de radiação térmica com meio participante é a espessura óptica espectral (τ_η) definida como

$$\tau_\eta = \int_0^S \kappa ds. \quad (7.5)$$

A integração da Equação 7.4 em s leva à Lei de Beer-Lambert-Bourguier:

$$I_\eta(s) = I_\eta(0) \exp \left[- \int_0^s \kappa(s^*) ds^* \right], \quad (7.6)$$

onde $I_\eta(0)$ representa a intensidade na origem do percurso antes de sofrer qualquer atenuação e s^* é uma variável auxiliar de integração no espaço s . A Lei de Bourguier mostra

que a intensidade espectral da radiação, quando atravessa um meio que absorve radiação, é atenuada exponencialmente ao longo do caminho.

7.1.4 Espalhamento

A intensidade de radiação é diminuída ao passar num meio que espalha a radiação incidente para fora da direção s . Assim,

$$(dI_\eta)_{\text{espalha}} = -\sigma_{\text{espalha},\eta} I_\eta ds. \quad (7.7)$$

Pode-se ainda definir um coeficiente espectral de extinção (β_η) ou atenuação como a soma dos coeficientes de absorção (κ) e de espalhamento para fora ($\sigma_{\text{espalha},\eta}$):

$$\beta_\eta \equiv \kappa + \sigma_{\text{espalha},\eta}. \quad (7.8)$$

7.1.5 Solução da Equação da RTE

Para que se possa calcular o fluxo radiativo \mathbf{q}_{rad} necessário à equação da energia (Equação 7.1), é preciso resolver a RTE (Equação 7.3) para todos os números de onda do espectro e para todos os ângulos sólidos. Em função da estimativa da espessura ótica do meio (Equação 7.5), diferentes modelos podem ser utilizados. No presente trabalho, utiliza-se o Método das Ordenadas Discretas em combinação com o Modelo de Soma Ponderada dos Gases Cinzas para resolver a RTE.

O Método das Ordenadas Discretas (MODEST, 2003) representa a dependência direcional da Intensidade de Radiação por um conjunto discreto de direções.

A equação de transferência radiativa (Equação 7.3) é resolvida para um conjunto discreto de direções que varrem o ângulo sólido total de 4π .

A equação geral de transferência radiativa para um meio que emite, absorve e espalha anisotropicamente radiação é

$$\frac{dI}{ds} = \hat{\mathbf{s}} \cdot \nabla I(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}}) = k(\mathbf{r}) I_b(\mathbf{r}) - \beta(\mathbf{r}) I(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}}) + \frac{\sigma_s(\mathbf{r})}{4\pi} \int_{4\pi} I(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}}') \Phi(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}}', \hat{\mathbf{s}}) d\Omega'. \quad (7.9)$$

Dividindo-se toda a Equação 7.9 por $\beta(\mathbf{r})$, tem-se

$$\frac{dI}{\beta ds} = \frac{k(\mathbf{r}) I_b(\mathbf{r})}{\beta(\mathbf{r})} - \frac{\beta(\mathbf{r})}{\beta(\mathbf{r})} I(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}}) + \frac{\sigma_s(\mathbf{r})}{\beta(\mathbf{r}) 4\pi} \int_{4\pi} I(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}}') \Phi(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}}', \hat{\mathbf{s}}) d\Omega' \quad (7.10)$$

e, com

$$\omega \equiv \frac{\sigma_{\text{espalha}}}{k + \sigma} = \frac{\sigma_{\text{espalha}}}{\beta}, \quad (7.11)$$

tem-se

$$\frac{dI}{\beta ds} = -I(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}}) + (1 - \omega(\mathbf{r})) I_b(\mathbf{r}) + \frac{\omega(\mathbf{r})}{4\pi} \int_{4\pi} I(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}}') \Phi(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}}', \hat{\mathbf{s}}) d\Omega'. \quad (7.12)$$

O fator $\frac{1}{4\pi}$ no termo de convergência vem da definição da função de fase espectral Φ_η (Equação 7.13).

Para o caso particular de espalhamento isotrópico, ou seja, a mesma quantidade de energia radiante é espalhada em cada direção do ângulo sólido, tem-se

$$\frac{1}{4\pi} \int_{4\pi} \Phi_\eta(\hat{\mathbf{s}}_i, \hat{\mathbf{s}}) d\Omega \equiv 1. \quad (7.13)$$

A Equação 7.9 é válida para um meio "cinza" ou, em base espectral, monocromático. Considerando-se um contorno (uma parede, por exemplo) opaco, emissor e refletor difuso, a condição de contorno, na posição \mathbf{r}_ω e orientação \hat{n} , para a Equação 7.9 é

$$I(\mathbf{r}_\omega, \hat{\mathbf{s}}) = \varepsilon(\mathbf{r}_\omega) I_b(\mathbf{r}_\omega) + \frac{\rho(\mathbf{r}_\omega)}{\pi} \int_{\hat{n} \cdot \hat{\mathbf{s}}' < 0} I(\mathbf{r}_\omega, \hat{\mathbf{s}}') |\hat{n} \cdot \hat{\mathbf{s}}'| d\Omega', \quad (7.14)$$

onde ε é a emissividade total e ρ é a refletividade total da parede ($\rho = 1 - \alpha$, onde α é a absorptividade total) da parede. I_b é a intensidade de radiação de corpo negro, dada pela Lei de Planck (MODEST, 2003). O fator $\frac{1}{\pi}$ no 2º termo da Equação 7.14 vem da relação entre E_b e I_b para emissores difusos. A região de integração sobre o ângulo sólido, com o critério $\hat{n} \cdot \hat{s}' < 0$, seleciona a radiação incidente sobre o contorno.

No presente trabalho, a Equação 7.9 foi resolvida com o método de Volumes Finitos de Ordenadas Discretas (em inglês, Finite Volume Discrete Ordinates Method (FVDOM)) (MODEST, 2003). Neste método, a Equação 7.9 é integrada no volume de controle, utilizando-se o Teorema da Divergência ou Teorema de Gauss para transformação de integrais de volume em integrais de superfície. Assim, a Equação 7.9 torna-se

$$\int_v \frac{\partial I}{\partial s} dV = \int_v \hat{s} \cdot \nabla I dV = \int_v \nabla \cdot (\hat{s}I) dV = \int_A I \hat{s} \cdot \hat{n} dA, \quad (7.15)$$

onde A é a área superficial do volume de controle e \hat{n} é o vetor unitário normal da face.

A Figura 7.2a ilustra as faces do volume de controle 2D sobre o qual a Equação 7.15 é integrada e também a discretização do domínio direcional de $4\pi sr$ em ângulos sólidos discretos.

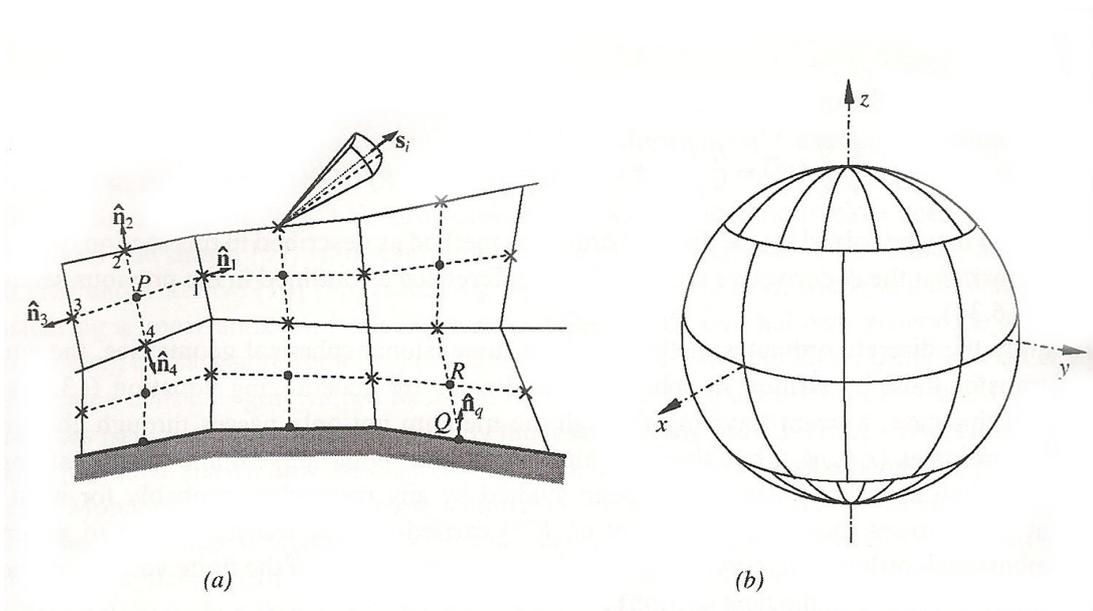


Figura 7.2 – Discretização espacial e direcional para o FVDOM. (a) volumes finitos; (b) discretização das direções em ângulos sólidos. Extraída de Modest (2003)

Aplicando-se a Equação 7.15 à Equação 7.9 e integrando-a para o domínio direcional do ângulo sólido discreto Ω_i , tem-se

$$\int_{\Omega_i} \int_A I \hat{\mathbf{s}} \cdot \hat{\mathbf{n}} dA d\Omega = \int_{\Omega_i} \int_V (\kappa I_b - \beta I) dV d\Omega + \int_{\Omega_i} \int_V \frac{\sigma_s}{4\pi} \int_{4\pi} \Phi(\hat{\mathbf{s}}', \hat{\mathbf{s}}) I(\hat{\mathbf{s}}') d\Omega' dV d\Omega. \quad (7.16)$$

Na forma mais simples do método FVDM, admite-se que a intensidade de radiação na direção i é constante sobre cada face A_k do volume de controle e sobre cada ângulo sólido discreto Ω_i ($i = 1, 2, \dots, n$). Assim, a intensidade de radiação aproximada é denominada I_{ki} . Então,

$$\sum_k I_{ki} (\mathbf{s}_i \cdot \hat{\mathbf{n}}_k) A_k = \beta_p (S_{pi} - I_{pi}) V \Omega_i, \quad (7.17)$$

onde

$$S_{pi} = (1 - \omega_p) I_{bp} + \frac{\omega_p}{4\pi} \sum_{j=1}^n I_{p,j} \bar{\Phi}_{ij}, \quad (7.18)$$

$$\bar{\Phi}_{ij} = \frac{1}{\Omega_i} \int_{\Omega_i} \int_{\Omega_j} \bar{\Phi}(\hat{\mathbf{s}}', \hat{\mathbf{s}}) d\Omega' d\Omega \quad (7.19)$$

e

$$\mathbf{s}_i = \int_{\Omega_i} \hat{\mathbf{s}} d\Omega. \quad (7.20)$$

Os subscritos k e p denotam as faces e o centro do Volume de Controle, respectivamente. O subscrito i indica um valor associado ao ângulo sólido Ω_i . \mathbf{s}_i é um vetor cujo módulo é numericamente igual ao ângulo sólido e aponta para a direção do ângulo sólido Ω_i . $\bar{\Phi}_{ij}$ é a função de fase do espalhamento de radiação no volume de controle. A integração sobre o volume de controle requer a avaliação do fluxo de intensidade de radiação nas faces do volume de controle. A aproximação (MODEST, 2003) mais simples é extrapolar a intensidade do ponto p ou do vizinho k para a face conforme:

- Radiação incidente ($\mathbf{s}_i \cdot \hat{\mathbf{n}}_k < 0$), a intensidade na face é aproximada pela intensidade do volume vizinho (I_{ki}), de onde a radiação vem. Assim,

$$\sum_k I_{ki} (\mathbf{s}_i \cdot \hat{\mathbf{n}}) A_k = - \sum_{k,e} I_{ki} |\mathbf{s}_i \cdot \hat{\mathbf{n}}_k| A_k; \quad (7.21)$$

- Radiação deixando o volume de controle ($\mathbf{s}_i \cdot \hat{\mathbf{n}} > 0$), a intensidade na face é aproximada pela intensidade armazenada no centro do volume de controle I_k . Assim,

$$\sum_k I_{ki} (\mathbf{s}_i \cdot \hat{\mathbf{n}}) A_k = \sum_{k,s} I_{pi} (\mathbf{s}_i \cdot \hat{\mathbf{n}}_k) A_k. \quad (7.22)$$

Assim, substituindo-se a soma das Equações 7.21 e 7.22 no lado esquerdo da Equação 7.17, tem-se a expressão que relaciona a intensidade de radiação na direção i no ponto p e seus vizinhos

$$I_{pi} = \frac{\beta_p S_{pi} V \Omega_i + \sum_{k,e} I_{ki} |\mathbf{s}_i \cdot \hat{\mathbf{n}}_k| A_k}{\beta_p V \Omega_i + \sum_{k,s} (\mathbf{s}_i \cdot \hat{\mathbf{n}}_k) A_k}, \quad (7.23)$$

onde os subscritos e e s denotam radiação que entra ou sai da face, respectivamente.

- Condições de Contorno de Radiação no Método FVDOM

As condições de contorno de radiação utilizadas no presente trabalho foram definidas para superfícies de radiação difusas para emissão e reflexão.

Multiplicando-se a Equação 7.14 por $\hat{\mathbf{n}} \cdot \hat{\mathbf{s}}$ e integrando-se para todas as direções de radiação deixando a superfície, chega-se à expressão da Radiosidade na parede J_ω :

$$J_\omega = \int_{\hat{\mathbf{n}} \cdot \hat{\mathbf{s}} > 0} I \hat{\mathbf{n}} \cdot \hat{\mathbf{s}} d\Omega = \int_{\hat{\mathbf{n}} \cdot \hat{\mathbf{s}} > 0} \varepsilon_\omega I_{b\omega} \hat{\mathbf{n}} \cdot \hat{\mathbf{s}} d\Omega + (1 - \varepsilon_\omega) \int_{\hat{\mathbf{n}} \cdot \hat{\mathbf{s}} < 0} I |\hat{\mathbf{n}} \cdot \hat{\mathbf{s}}| d\Omega. \quad (7.24)$$

Assumindo-se que a intensidade de radiação (I_q) que deixa uma superfície de contorno, como $\hat{\mathbf{n}}_q$ na Figura 7.2a de área A_Q , seja constante sobre toda a área, integra-se a Equação 7.24 para toda a área:

$$I_q \sum_{i,s} \mathbf{s}_i \cdot \hat{\mathbf{n}}_q A_Q = \varepsilon_q I_{bq} \sum_{i,s} \mathbf{s}_i \cdot \hat{\mathbf{n}}_q A_Q + (1 - \varepsilon_q) \sum_{i,e} I_{qe} | \mathbf{s}_i \cdot \hat{\mathbf{n}}_q | A_Q \quad (7.25)$$

ou ainda

$$I_q = \varepsilon_q I_{bq} + (1 - \varepsilon_q) \sum_{i,e} I_{qe} | \mathbf{s}_i \cdot \hat{\mathbf{n}}_q | / \sum_{i,s} (\mathbf{s}_i \cdot \hat{\mathbf{n}}_q). \quad (7.26)$$

Vê-se na Equação 7.26 que o problema de radiação no método FVDOM é iterativo, pois a condição de contorno I_q depende das intensidades de radiação I_{qe} dos volumes internos (R na Figura 7.2a) do domínio de cálculo. A intensidade que chega à superfície de contorno I_{qe} pode ser substituída pela intensidade de Radiação do volume de controle adjacente à parede I_{Ri} , para $\hat{\mathbf{s}}_i \cdot \hat{\mathbf{n}}_q < 0$. Assim,

$$I_q = \varepsilon_q I_{bq} + (1 - \varepsilon_q) \sum_{i,e} I_{Ri} | \mathbf{s}_i \cdot \hat{\mathbf{n}}_q | / \sum_{i,s} (\mathbf{s}_i \cdot \hat{\mathbf{n}}_q). \quad (7.27)$$

7.1.6 Divergência do Fluxo Radiativo em Meio Participante e Termo de Fonte na Equação da Energia

A relação entre o balanço de energia radiativa de um feixe de radiação e o balanço de energia do meio participante é discutida a seguir.

A Equação 7.28 mostra o balanço de energia radiativa, desconsiderada a parcela de espalhamento, no Volume de Controle infinitesimal $dV = dxdydz$:

$$\begin{pmatrix} \text{Taxa de} \\ \text{variação} \\ \text{da energia} \\ \text{radiativa} \\ \text{armazenada} \\ \text{no V. C.} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \text{Taxa de} \\ \text{EMISSÃO} \\ \text{de energia} \\ \text{radiativa} \\ \text{gerada} \\ \text{no V. C.} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \text{Taxa de} \\ \text{ABSORÇÃO} \\ \text{de energia} \\ \text{radiativa} \\ \text{destruída} \\ \text{no V. C.} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \text{FER em } x \\ - \text{FER em } x + \Delta x \\ + \text{FER em } y \\ - \text{FER em } y + \Delta y \\ + \text{FER em } z \\ - \text{FER em } z + \Delta z \end{pmatrix} \quad (7.28)$$

sendo FER uma abreviatura para Fluxo de Energia Radiativa.

O termo *IV* pode ser escrito como

$$\begin{aligned}
q_{rad} &= q_{rad,x} dydz - q_{rad,x+\Delta x} dydz \\
&+ q_{rad,y} dx dz - q_{rad,y+dy} dx dz \\
&+ q_{rad,z} dx dy - q_{rad,z+dz} dx dy.
\end{aligned} \quad (7.29)$$

Fazendo uma expansão em série de Taylor para expressar $q_{rad,x+\Delta x}$ em função de $q_{rad,x}$ (analogamente para $q_{rad,y+dy}$ e $q_{rad,z+dz}$), tem-se

$$q_{rad} = - \left(\frac{\partial q_{rad,x}}{\partial x} + \frac{\partial q_{rad,y}}{\partial y} + \frac{\partial q_{rad,z}}{\partial z} \right) dx dy dz = -\nabla \cdot \mathbf{q}_{rad} dV. \quad (7.30)$$

Em palavras, a Equação 7.30 significa que, se q_{rad} , que é o termo *IV* da 7.28, assume um valor positivo, entrou mais energia radiativa do que saiu no Volume de Controle. Então, na 7.28, esta diferença da energia radiativa foi em parte acumulada no V. C. (termo *I*) ou foi parte destruída, ao ser absorvida pelo fluido, no V. C. (termo *III*). Por outro lado, se q_{rad} assumir um valor negativo, significa que saiu mais energia radiativa do que entrou no volume de controle. Assim, o termo *II*, energia radiativa gerada ou emitida, prepondera em relação aos termos *I* e *III*. Este saldo do balanço de energia radiativa aparece também, como termo fonte, na equação do balanço de energia do fluido

(Equação ?? e Equação 7.1). O balanço da energia radiativa (Equação 7.28), em regime permanente (termo $I = 0$), é positivo quando energia radiativa é absorvida pelo fluido no volume de controle. Esta parcela de energia radiativa absorvida pelo fluido significa um aporte positivo no seu balanço de energia. Assim, o termo de fonte por unidade de volume, devido à radiação, na equação de energia do fluido (Equação ??) é numericamente igual ao termo IV da Equação 7.28:

$$\dot{Q} = S_{rad} = -\nabla \cdot \mathbf{q}_{rad} \quad (7.31)$$

Re-escrevendo-se a Equação 7.9 para um único número de onda (η), tem-se

$$\frac{dI_\eta}{ds} = \hat{\mathbf{s}} \cdot \nabla I_\eta = \kappa I_{b\eta} - \beta_\eta I_\eta(\hat{\mathbf{s}}) + \frac{\sigma_{s\eta}}{4\pi} \int_{4\pi} I_\eta(\hat{\mathbf{s}}_i) \Phi_\eta(\hat{\mathbf{s}}_i, \hat{\mathbf{s}}) d\Omega_i. \quad (7.32)$$

A RTE (Equação 7.32) relaciona a variação da intensidade de radiação espectral numa direção $\hat{\mathbf{s}}$. Integrando-se a Equação 7.32 para todo o domínio do ângulo sólido 4π , tem-se a variação da intensidade de radiação espectral, com as contribuições de todas as direções. Assim,

$$\int_{4\pi} \hat{\mathbf{s}} \cdot \nabla I_\eta d\Omega = \int_{4\pi} \kappa I_{b\eta} d\Omega - \int_{4\pi} \beta_\eta I_\eta(\hat{\mathbf{s}}) d\Omega + \int_{4\pi} \frac{\sigma_{s\eta}}{4\pi} \int_{4\pi} I_\eta(\hat{\mathbf{s}}_i) \Phi_\eta(\hat{\mathbf{s}}_i, \hat{\mathbf{s}}) d\Omega_i d\Omega. \quad (7.33)$$

Como a direção do ângulo sólido ($\hat{\mathbf{s}}$) é independente do sistema de coordenadas do operador gradiente e o coeficiente de absorção κ e a intensidade de corpo negro $I_{b,\eta}$ não dependem do ângulo sólido, pode-se escrever

$$\nabla \cdot \int_{4\pi} I_\eta \hat{\mathbf{s}} d\Omega = 4\pi \kappa I_{b\eta} - \int_{4\pi} \beta_\eta I_\eta(\hat{\mathbf{s}}) d\Omega + \frac{\sigma_{s\eta}}{4\pi} \int_{4\pi} I_\eta(\hat{\mathbf{s}}_i) \left[\int_{4\pi} \Phi_\eta(\hat{\mathbf{s}}_i, \hat{\mathbf{s}}) d\Omega \right] d\Omega_i. \quad (7.34)$$

O termo do lado esquerdo desta equação representa o saldo (saída menos entrada) dos fluxos de energia radiativa nas faces do Volume de Controle. Assim, pode-se escrever

$$\nabla \cdot \mathbf{q}_{rad\eta} = 4\pi\kappa I_{b\eta} - \beta_\eta \int_{4\pi} I_\eta(\hat{\mathbf{s}}) d\Omega + \frac{\sigma_{s\eta}}{4\pi} \int_{4\pi} I_\eta(\hat{\mathbf{s}}_i) \left[\int_{4\pi} \Phi_\eta(\hat{\mathbf{s}}_i, \hat{\mathbf{s}}) d\Omega \right] d\Omega_i. \quad (7.35)$$

Assim, com uso da Equação 7.13, a equação anterior torna-se

$$\nabla \cdot \mathbf{q}_{rad\eta} = 4\pi\kappa I_{b\eta} - \beta_\eta \int_{4\pi} I_\eta(\hat{\mathbf{s}}) d\Omega + \sigma_{s\eta} \int_{4\pi} I_\eta(\hat{\mathbf{s}}_i) d\Omega_i. \quad (7.36)$$

Utilizando-se a Equação 7.8 pode-se escrever

$$\nabla \cdot \mathbf{q}_{rad\eta} = \kappa \left[4\pi I_{b\eta} - \underbrace{\int_{4\pi} I_\eta(\hat{\mathbf{s}}) d\Omega}_{\equiv G_\eta} \right] = \kappa (4\pi I_{b\eta} - G_\eta), \quad (7.37)$$

onde G_η é radiação incidente, vinda de todos ângulos sólidos, no número de onda η . Esta equação indica que o saldo do fluxo (o que sai menos o que entra) de energia radiante nas faces do volume de controle é proporcional à diferença entre a energia radiante emitida ($4\pi I_{b\eta}$) e a energia radiante incidente (G_η). Escrevendo-se como na Equação 7.30 tem-se,

$$-\nabla \cdot \mathbf{q}_{rad\eta} = \kappa (G_\eta - 4\pi I_{b\eta}). \quad (7.38)$$

Integrando-se a equação espectral acima, para todo o espectro de radiação, tem-se

$$-\nabla \cdot \mathbf{q}_{rad} = \int_0^\infty \kappa (G_\eta - 4\pi I_{b\eta}) d\eta. \quad (7.39)$$

Para o caso particular de meio cinza ($\kappa = cte$), a expressão é simplificada para

$$-\nabla \cdot \mathbf{q}_{rad} = \kappa (G - 4\sigma T^4). \quad (7.40)$$

Com a determinação das intensidades de radiação em todos os centros dos volumes de controle (I_p), pode-se avaliar a radiação incidente no centro do volume de controle G_p por

$$G_p = \sum_i I_{pi} \Omega_i. \quad (7.41)$$

A temperatura T é a temperatura no centro do volume de controle.

Com a Equação 7.40 pode-se avaliar o termo de fonte \dot{Q} da equação da energia do meio (Equação ?? e Equação 7.31).

7.1.7 Modelo de Soma Ponderada de Gases Cinzas [WSGG]

Após a formulação do modelo e método de solução das trocas radiativas com meio participante, deve-se formular as propriedades radiativas do meio.

Modest (2003) mostra que o modelo WSGG (em inglês *Weighted Sum of Gray Gases*) pode ser utilizado para resolução da equação da intensidade de radiação (RTE), desde que as superfícies de contorno de radiação sejam corpos negros e o meio participante não produza espalhamento da radiação.

No modelo WSGG evita-se o cálculo da transferência radiativa com o tratamento de meio não-cinza em bandas do espectro, o que exige abordagem espectral das linhas de radiação. Ao invés disto, calcula-se a transferência de calor radiativa separadamente para um determinado número de gases considerados como emissores cinzas. O fluxo de calor total é calculado com uma média ponderada dos fluxos em cada gás.

A solução da Equação 7.32 é mostrada a seguir.

Define-se da coordenada ótica,

$$\tau_\eta = \int_0^s (\kappa + \sigma_{s\eta}) ds = \int_0^s \beta_\eta ds = \beta_\eta s, \quad (7.42)$$

em que s é o comprimento do caminho ótico. Tomando-se o diferencial de τ_η e s ,

$$d\tau_\eta = \beta_\eta ds \quad (7.43)$$

e, então,

$$\frac{d\tau_\eta}{\beta_\eta} = ds. \quad (7.44)$$

A Equação 7.32 é re-escrita na forma

$$\frac{dI_\eta}{d\tau_\eta} = \frac{\kappa}{\beta_\eta} I_{b\eta} - I_\eta + \frac{\sigma_{s\eta}}{\beta_\eta 4\pi} \int_{4\pi} I_\eta(\hat{\mathbf{s}}_i) \Phi_\eta(\hat{\mathbf{s}}_i, \hat{\mathbf{s}}) d\Omega_i. \quad (7.45)$$

Com a definição de ω_η ,

$$\omega_\eta \equiv \frac{\sigma_{s\eta}}{\kappa + \sigma_{s\eta}} = \frac{\sigma_{s\eta}}{\beta_\eta}, \quad (7.46)$$

pode-se escrever o primeiro termo do lado direito da Equação 7.45 como

$$\frac{\kappa}{\beta_\eta} I_{b\eta} = \frac{\kappa}{\kappa + \sigma_{s\eta}} I_{b\eta} = \left(\frac{\kappa + \sigma_{s\eta} - \sigma_{s\eta}}{\kappa + \sigma_{s\eta}} \right) I_{b\eta} = (1 - \omega_\eta) I_{b\eta}. \quad (7.47)$$

Assim, a Equação 7.45 é re-escrita na forma

$$\frac{dI_\eta}{d\tau_\eta} = -I_\eta + (1 - \omega_\eta) I_{b\eta} + \frac{\omega_\eta}{4\pi} \int_{4\pi} I_\eta(\hat{\mathbf{s}}_i) \Phi_\eta(\hat{\mathbf{s}}_i, \hat{\mathbf{s}}) d\Omega_i. \quad (7.48)$$

Definindo-se

$$S_\eta(\tau_\eta, \hat{\mathbf{s}}) \equiv (1 - \omega_\eta) I_{b\eta} + \frac{\omega_\eta}{4\pi} \int_{4\pi} I_\eta(\hat{\mathbf{s}}_i) \Phi_\eta(\hat{\mathbf{s}}_i, \hat{\mathbf{s}}) d\Omega_i, \quad (7.49)$$

a Equação 7.48 é re-escrita como

$$\frac{dI_\eta}{d\tau_\eta} + I_\eta = S_\eta(\tau_\eta, \hat{\mathbf{s}}). \quad (7.50)$$

Multiplicando-se a Equação 7.50 por e^{τ_η} ,

$$e^{\tau_\eta} \frac{dI_\eta}{d\tau_\eta} + I_\eta e^{\tau_\eta} = S_\eta(\tau_\eta, \hat{\mathbf{s}}) e^{\tau_\eta}, \quad (7.51)$$

e agrupando o lado esquerdo tem-se

$$\frac{dI_\eta e^{\tau_\eta}}{d\tau_\eta} = S_\eta(\tau_\eta, \hat{\mathbf{s}}) e^{\tau_\eta}. \quad (7.52)$$

Separando-se as variáveis

$$dI_\eta e^{\tau_\eta} = S_\eta(\tau_\eta, \hat{\mathbf{s}}) e^{\tau_\eta} d\tau_\eta, \quad (7.53)$$

e integrando-se de zero até a coordenada ótica τ_η ,

$$\int_0^{\tau_\eta} dI_\eta e^{\tau_\eta} = \int_0^{\tau_\eta} S_\eta(\tau'_\eta, \hat{\mathbf{s}}) e^{\tau'_\eta} d\tau'_\eta, \quad (7.54)$$

obtém-se a solução formal da Equação 7.32:

$$I_\eta(\tau_\eta) (e^{\tau_\eta}) = I_\eta(0) (e^0) + \int_0^{\tau_\eta} S_\eta(\tau'_\eta, \hat{\mathbf{s}}) e^{\tau'_\eta} d\tau'_\eta \quad (7.55)$$

ou

$$I_\eta(\tau_\eta) = I_\eta(0) e^{-\tau_\eta} + \int_0^{\tau_\eta} S_\eta(\tau'_\eta, \hat{\mathbf{s}}) e^{-(\tau_\eta - \tau'_\eta)} d\tau'_\eta. \quad (7.56)$$

Para um meio sem espalhamento ($\sigma_{s\eta} = 0$), a Equação 7.49 torna-se

$$S_\eta(\tau_\eta, \hat{\mathbf{s}}) = I_{b\eta} \quad (7.57)$$

e então a solução (Equação 7.56) se reduz para

$$I_{\eta}(\tau_{\eta}) = I_{\eta}(0) e^{-\tau_{\eta}} + \int_0^{\tau_{\eta}} I_{b\eta}(\tau'_{\eta}) e^{-(\tau_{\eta}-\tau'_{\eta})} d\tau'_{\eta}. \quad (7.58)$$

Esta equação pode ser re-escrita em função da coordenada s como:

$$I_{\eta}(s) = I_{b\omega\eta} \exp\left(-\int_0^s \kappa ds'\right) + \int_0^s I_{b\eta}(s') \exp\left(-\int_{s'}^s \kappa ds''\right) \kappa(s') ds', \quad (7.59)$$

onde $I_{b\omega\eta} = I_{b\eta}(T_{\omega})$ é a intensidade de radiação de corpo negro emitida na parede ($s = 0$), na temperatura T_{ω} e $s'' = s' - s$.

Integrando-se a Equação 7.59 sobre todo o espectro, tem-se

$$I(s) = \int_0^{\infty} I_{\eta} d\eta = \quad (7.60)$$

$$\int_0^{\infty} I_{b\omega\eta} \exp\left(-\int_0^s \kappa ds'\right) d\eta + \int_0^s \int_0^{\infty} I_{b\eta}(s') \exp\left(-\int_{s'}^s \kappa ds''\right) \kappa(s') ds' d\eta.$$

A absorptividade espectral de um meio participante é definida por:

$$\alpha_{\eta} \equiv \frac{I_{\eta}(0) - I_{\eta}(s)}{I_{\eta}(0)}, \quad (7.61)$$

ou seja, α_{η} é a razão entre a intensidade absorvida pelo meio no caminho $0 \rightarrow s$ e a intensidade emitida na origem ($s = 0$).

Utilizando-se a Lei de Beer-Lambert-Bourguer (Equação 7.6), pode-se escrever

$$\alpha_{\eta} \equiv \frac{I_{\eta}(0) - I_{\eta}(0) \exp\left(-\int_0^s \kappa ds'\right)}{I_{\eta}(0)} = 1 - e^{-\tau_{\eta}}. \quad (7.62)$$

A emissividade espectral do meio participante é definida a partir da aplicação da Equação 7.58 para uma camada isotérmica e homogênea de um gás de espessura s , por:

$$I_{\eta}(s) = I_{\eta}(0) e^{-\tau_{\eta}} + I_{b\eta}(1 - e^{-\tau_{\eta}}). \quad (7.63)$$

Se somente a emissão for considerada, com intensidade nula em $s = 0$, $I_\eta(0) = 0$, tem-se a definição da emissividade (ε_η):

$$\varepsilon_\eta \equiv \frac{I_\eta(s)}{I_{b\eta}} = 1 - e^{-\tau_\eta}. \quad (7.64)$$

que é a mesma expressão da absorptividade. Assim,

$$\alpha_\eta = \varepsilon_\eta. \quad (7.65)$$

Substituindo-se a Equação 7.62 na Equação 7.60, tem-se

$$I(s) = \int_0^\infty I_{b\omega\eta} [1 - \alpha_\eta(0 \rightarrow s)] d\eta + \int_0^s \int_0^\infty I_{b\eta}(s') \exp\left(-\int_{s'}^s \kappa ds''\right) \kappa(s') ds' d\eta, \quad (7.66)$$

mas

$$\frac{\partial \alpha_\eta(s' \rightarrow s)}{\partial s'} = \frac{\partial}{\partial s'} \left[1 - \exp\left(-\int_{s'}^s \kappa ds''\right) \right] = -\kappa(s') \exp\left(-\int_{s'}^s \kappa ds''\right), \quad (7.67)$$

então,

$$I(s) = \underbrace{\int_0^\infty I_{b\omega\eta} [1 - \alpha_\eta(0 \rightarrow s)] d\eta}_{\text{Radiação oriunda da parede e transmitida no meio}} - \underbrace{\int_0^s \int_0^\infty I_{b\eta}(s') \frac{\partial \alpha_\eta}{\partial s'}(s' \rightarrow s) d\eta ds'}_{\text{Aumento da intensidade devido à emissão do meio}}. \quad (7.68)$$

Define-se a absorptividade total do meio de espessura $s' \rightarrow s$ e à temperatura T por

$$\alpha(T, s' \rightarrow s) \equiv \frac{1}{I_b(T)} \int_0^\infty \alpha_\eta(s' \rightarrow s) I_{b\eta}(T) d\eta \quad (7.69)$$

$$= \frac{1}{I_b(T)} \int_0^\infty \left[1 - \exp \left(- \int_{s'}^s \kappa ds'' \right) \right] I_{b\eta}(T) d\eta. \quad (7.70)$$

Substitui-se a Equação 7.69 no primeiro termo da Equação 7.68. O segundo termo desta equação é substituído pela aplicação da Equação 7.69 na Equação 7.67 e então tem-se

$$I(s) = [1 - \alpha(T_\omega, 0 \rightarrow s)] I_{b\omega} - \int_0^s \frac{d\alpha}{ds'} [T(s'), s' \rightarrow s] I_b(s') ds'. \quad (7.71)$$

Por simplicidade matemática, considere-se o coeficiente de absorção $\alpha(T_\omega, 0 \rightarrow s)$ da Equação 7.71 como um valor médio no espaço, assim $\alpha(T_\omega, s) = \alpha(T_\omega, 0 \rightarrow s)$. A Equação 7.71 pode ser re-escrita como

$$I(s) = [1 - \alpha(T_\omega, s)] I_{b\omega} - \int_0^s \frac{d\alpha}{ds'} [T(s'), s' \rightarrow s] I_b(s') ds'. \quad (7.72)$$

Para um meio isotérmico T_m com coeficiente de absorção $\kappa(T_m)$ constante, a absorptividade total, a partir da Equação 7.70 é

$$\alpha(T, s) = \frac{1}{I_b(T)} \int_0^\infty \{1 - \exp[-\kappa(T_m) s]\} I_{b\eta}(T) d\eta, \quad (7.73)$$

ou seja, a absorptividade total não é função do caminho, mas sim da espessura do meio (s).

Se $T = T_\omega$, então

$$\alpha(T_\omega, s) = \frac{1}{I_b(T_\omega)} \int_0^\infty \{1 - \exp[-\kappa(T_m) s]\} I_{b\eta}(T_\omega) d\eta, \quad (7.74)$$

que é a absorptividade do caminho (s) para a emissão de corpo negro da parede à temperatura $T_\omega, (I_b(T_\omega))$.

Se $T = T_m$, a Equação 7.73 torna-se:

$$\alpha(T_m, s) = \frac{1}{I_b(T_m)} \int_0^\infty \{1 - \exp[-\kappa(T_m) s]\} I_{b\eta}(T_m) d\eta. \quad (7.75)$$

Analogamente à definição de ε_η , Equação 7.64, a emissividade total do meio de espessura s e à temperatura T_m é dada por

$$\varepsilon(T_m, s) = \frac{\int I_\eta(s) d\eta}{\int I_{b\eta} d\eta} = \frac{1}{I_b(T_m)} \int_0^\infty \varepsilon_\eta(T_m) I_{b\eta}(T_m) d\eta, \quad (7.76)$$

e então,

$$\varepsilon(T_m, s) = \frac{1}{I_b(T_m)} \int_0^\infty \{1 - \exp[-\kappa(T_m) s]\} I_{b\eta}(T_m) d\eta. \quad (7.77)$$

Assim, comparando-se as Equações 7.75 e 7.77 tem-se que

$$\alpha(T_m, s) = \varepsilon(T_m, s), \quad (7.78)$$

ou seja, para um meio isotérmico e com $\kappa(T_m)$ homogêneo no espaço, avaliado à temperatura do meio T_m , a absorptividade total à T_m é igual à emissividade total à T_m .

Para um meio com coeficiente de absorção constante ($\kappa = k = cte$), a absorptividade total (Equação 7.73) não depende da temperatura do meio (T_m) e assim,

$$\alpha(T, s) = \frac{1}{I_b(T)} [1 - \exp(-ks)] \int_0^\infty I_{b\eta}(T) d\eta = 1 - \exp(-ks) \quad (7.79)$$

e a emissividade, por (Equação 7.77), torna-se

$$\varepsilon(T, s) = \frac{1}{I_b(T)} [1 - \exp(-ks)] \int_0^\infty I_{b\eta}(T) d\eta = 1 - \exp(-ks) \quad (7.80)$$

então

$$\alpha(T, s) = \varepsilon(T, s), \quad (7.81)$$

ou seja, para um meio com k constante, a absorptividade e a emissividade são iguais para qualquer temperatura.

Assim, com estas simplificações para meio isotérmico e homogêneo ($\kappa = k$ constante), de espessura s , a RTE (Equação 7.72) pode ser avaliada por

$$I(s) = [1 - \alpha(T_\omega, s)] I_{b\omega} - \int_0^s \frac{\partial \varepsilon}{\partial s'} [T(s'), s' \rightarrow s] I_b(s') ds. \quad (7.82)$$

No modelo de soma ponderada de gases cinzas (WSGG), faz-se a hipótese de que a aproximação

$$\alpha(T, s) \approx \sum_{k=0}^K a_k(T) (1 - e^{-\kappa_k s}) \quad (7.83)$$

seja válida. Nesta equação, K é o número de gases do modelo WSGG.

Vale também, pela Equação 7.81,

$$\varepsilon(T, s) = \alpha(T, s) \approx \sum_{k=0}^K a_k(T) (1 - e^{-\kappa_k s}). \quad (7.84)$$

Na Equação 7.83, consistente com as equações 7.72 e 7.73, o coeficiente de absorção de gás cinza (κ_k) é constante. Os pesos de ponderação (a_k) podem ser função da temperatura da fonte de emissão (T_ω para absorptividade (Equação 7.74) ou T_m para emissividade, (Equação 7.77)).

Na aproximação 7.84, nem o peso a_k nem o coeficiente de absorção κ_k são função do caminho do feixe de radiação s .

Para o caso limite de um meio com grande espessura

$$\lim_{s \rightarrow \infty} \exp(-\kappa_k s) \rightarrow 0 \quad (7.85)$$

e pelas Equações 7.79 e 7.83, tem-se

$$\sum_{k=0}^K a_k(T) = 1. \quad (7.86)$$

Esta restrição é utilizada na formulação dos pesos a_K . Com utilização das Equações 7.86 e 7.83, tem-se

$$\begin{aligned} 1 - \alpha(T_\omega, s) &= 1 - \sum_{k=0}^K a_k(T) (1 - e^{-\kappa_k s}) \\ &= 1 - \underbrace{\sum_{k=0}^K a_k(T)}_{=1} + \sum_{k=0}^K a_k(T) e^{-\kappa_k s} = \sum_{k=0}^K a_k(T) e^{-\kappa_k s}. \end{aligned} \quad (7.87)$$

Para a derivada da emissividade na Equação 7.82, tem-se

$$\frac{d\varepsilon}{ds'}(T, s - s') = \frac{\partial}{\partial s'} \sum_{k=0}^K a_k(T) [1 - e^{-\kappa_k(s-s')}] = - \sum_{k=0}^K a_k(T) \kappa_k e^{-\kappa_k(s-s')}. \quad (7.88)$$

Substituindo-se as Equações 7.87 e 7.88 na Equação 7.82, tem-se

$$\begin{aligned} I(s) &= \sum_{k=0}^K a_k \kappa_k (T_\omega) e^{-\kappa_k s} I_{b\omega} + \int_0^s \sum_{k=0}^K a_k [T(s')] \kappa_k e^{-\kappa_k(s-s')} I_b(s') ds' \\ &= \sum_{k=0}^K [[a_k I_b](T_\omega) e^{-\kappa_k s} + \int_0^s [a_k I_b](s') e^{-\kappa_k(s-s')} \kappa_k ds']. \end{aligned} \quad (7.89)$$

No modelo WSGG, a intensidade de radiação do meio participante é aproximada pela soma das intensidades dos gases cinzas, então

$$I(s) = \sum_{k=0}^K I_K(s). \quad (7.90)$$

Substituindo-se a Equação 7.90 na Equação 7.89 tem-se

$$\sum_{k=0}^K I_k(s) = \sum_{k=0}^K \left[[a_k I_b](T_\omega) e^{-\kappa_k s} + \int_0^s [a_k I_b](s') e^{-\kappa_k(s-s')} \kappa_k ds' \right]. \quad (7.91)$$

Comparando-se a Equação 7.91 com a Equação 7.60 (integrada para todo espectro), verifica-se que I_k satisfaz a equação de transferência

$$\frac{dI_k}{ds} = \kappa_k [(a_k I_b) - I_k], \quad (7.92)$$

com a condição de contorno,

$$s = 0 \quad : \quad I_K = [a_K I_b(T_\omega)]. \quad (7.93)$$

Assim, a RTE no modelo WSGG pondera a Intensidade de Corpo Negro I_b pelo fator de ponderação de cada gás cinza a_k tanto para o meio quanto para as superfícies.

A determinação dos coeficientes de absorção κ e dos pesos a para cada gás implica na precisão dos resultados do problema radiativo. De forma geral, κ e a dependem da composição, temperatura, pressão, número de gases cinzentos, fuligem etc. São encontrados na literatura os parâmetros para soma de gases contendo vapor d'água e dióxido de carbono e fuligem (MODEST, 2003).

Verifica-se que para solução da RTE para cada gás (Equação 7.92) é necessário o conhecimento do campo de temperaturas para avaliação tanto dos pesos a_k quanto das Intensidades de Radiação de Corpo Negro I_b . Aqui se dá a interação do modelo de radiação com a equação da energia da fase gasosa no processo de combustão. No presente trabalho, a Equação 7.92 é resolvida pelo Método das Ordenadas Discretas já apresentado.

7.2 Radiação e Combustão

Radiação térmica é importante, ou mesmo dominante, em processos de combustão, particularmente em sistemas grandes (ou de grande espessura ótica) (Equação 7.42).

A descrição de todos os fenômenos físicos (reações químicas de transferência de calor e massa) envolvidos em processos de combustão é tarefa ainda extremamente difícil. Adicionalmente, em escoamentos turbulentos, tem-se a interferência das flutuações turbulentas nos cálculos das taxas de transferência de quantidade de movimento, massa e energia. A seguir discute-se este modelo.

7.2.1 Interação Radiação e Turbulência

Num escoamento reativo turbulento, as grandezas físicas, como temperatura, concentração das espécies e densidade, apresentam flutuações temporais e espaciais. O termo de fonte de radiação na equação da energia ($-\nabla \cdot \mathbf{q}_{\text{rad}}$) é não-linear e, portanto, a influência das flutuações temporais no cálculo deve ser considerada.

Aplicando-se o operador de média temporal sobre a Equação 7.37, integrada para todo o espectro,

$$-\overline{\nabla \cdot \mathbf{q}} = -\overline{\int_0^\infty \kappa \left[4\pi I_{b\eta} - \int_{4\pi} I_\eta(\hat{s}) d\Omega \right] d\eta} = -\int_0^\infty \left(4\pi \overline{\kappa I_{b\eta}} - \int_{4\pi} \overline{\kappa I_\eta} d\Omega \right) d\eta. \quad (7.94)$$

Na Equação 7.94, fica evidente a interação entre turbulência e radiação: a correlação $\overline{\kappa I_{b\eta}}$ entre coeficiente de absorção (κ) e a intensidade de radiação de corpo negro ($I_{b\eta}$) e a correlação $\overline{\kappa I_\eta}$ entre o coeficiente de absorção e a intensidade de radiação incidente. Estas correlações devem ser modelados adequadamente em problemas de combustão turbulenta. A seguir discute-se este problema.

7.2.2 Aproximação de Estrutura Turbulenta de Fina Espessura Ótica

Um parâmetro importante para a avaliação da interação entre turbulência e radiação é a espessura ótica da estrutura turbulenta ($\tau_{t\eta}$), que pode ser definida como:

$$\tau_{t\eta} = \kappa l_t, \quad (7.95)$$

onde l_t é a escala de comprimento característico das estruturas turbulentas. Se $\tau_{t\eta} < 1$, significa que a intensidade de radiação, no número de onda η , não é significativamente alterada ao cruzar uma estrutura turbulenta (em inglês *Eddy*). Nesta situação, as flutuações turbulentas de temperatura, concentração e densidade, que ocorrem na escala l_t , não influenciam o cálculo do coeficiente de absorção κ . Isto permite calcular a correlação $\overline{\kappa I_\eta}$ como o produto dos valores médios, na forma:

$$\overline{\kappa I_\eta} \approx \bar{\kappa} \bar{I}_\eta. \quad (7.96)$$

Esta aproximação, utilizada em todos os modelos atuais de interação entre turbulência e radiação, é chamada em inglês de *Optically-thin eddy approximation*, o que poderia ser traduzido como *estruturas turbulentas de fina espessura ótica*.

A intensidade média \bar{I}_η será obtida da solução da RTE (Equação 7.92), formulada para seus valores médios, ou seja,

$$\frac{d\bar{I}_k}{ds} = \left[\overline{\kappa_k (a_k I_b)} - \bar{\kappa}_k \bar{I}_k \right]. \quad (7.97)$$

A correlação $\overline{\kappa_k (a_k I_b)}$ é obtida pelas informações da estatística de ponto único, que também é utilizado no modelo de combustão turbulenta (Capítulo 3). Na abordagem deste trabalho, fica, entretanto, implícita a independência estatística entre composição (espécies) e temperatura (ou entalpia) no volume de controle em análise. As informações de valor médio de concentração, temperatura e massa específica são obtidos com função densidade de probabilidade pré-assumida: β -PDF ou Delta de Dirac. Com estas informações médias, são avaliadas as grandezas do problema de radiação como coeficiente de absorção (κ) e Intensidade de Radiação de Corpo Negro ($I_{b\eta}$). Este procedimento, embora largamente utilizado na área de combustão turbulenta (MODEST, 2003), pode levar a erros de 50% a 30% na potência radiativa (a menor) do que se o cálculo fosse feito com os valores instantâneos. De forma análoga ao que acontece com a estimativa do termo de fonte médio nas reações químicas, pode-se avaliar a influência da flutuação da temperatura no poder emissivo de corpo negro (E_b). Fazendo uma expansão em Taylor para E_b e a decomposição de Reynolds para a temperatura, tem-se

$$T = \bar{T} + T', \quad \text{com} \quad \overline{T'} = 0 \quad (7.98)$$

e

$$E_b(T) \approx E_b(\bar{T}) + T' \frac{d}{d\bar{T}} E_b(\bar{T}) + \frac{1}{2} \overline{(T')^2} \frac{d^2}{d\bar{T}^2} E_b(\bar{T}) + \dots \quad (7.99)$$

Aplicando-se o operador de média de Reynolds (POPE, 2000a) tem-se

$$\overline{E_b(T)} \cong E_b(\bar{T}) + \underbrace{\overline{T' \frac{dE_b(\bar{T})}{d\bar{T}}}}_{=0} + \frac{1}{2} \overline{(T')^2} \frac{d^2 E_b(\bar{T})}{d\bar{T}^2} + \dots \quad (7.100)$$

Substituindo-se a Distribuição de Planck para o poder emissivo ($E_b(\bar{T}) = (\sigma \bar{T}^4)$),

$$\overline{E_b(T)} \cong \sigma \bar{T}^4 + \frac{12}{2} \sigma \bar{T}^2 \overline{(T')^2} = \sigma \bar{T}^4 \left[1 + 6 \frac{\overline{(T')^2}}{\bar{T}^2} \right] \quad (7.101)$$

Fazendo-se uma estimativa com um valor de intensidade de turbulência para temperatura de 30%, tem-se que $\frac{\sqrt{\overline{(T')^2}}}{\bar{T}} = 0.3$ e $\frac{\overline{(T')^2}}{\bar{T}^2} = 0.09$. Assim, a parcela relativa à flutuação turbulenta da temperatura na Equação 7.101 é

$$\overline{E_b(T)} \approx \sigma \bar{T}^4 (1 + 6 \times 0.09) = \sigma \bar{T}^4 (1 + 0.54), \quad (7.102)$$

ou seja, aproximadamente 50% a mais que se somente o valor médio da temperatura (\bar{T}) for considerado.

7.3 Estado da Arte em Cálculo de Radiação em Chamas Turbulentas

Na tabela seguinte será apresentado um resumo de trabalhos recentes encontrados em literatura aonde se estudou a influência da radiação térmica em chamas turbulentas

Referência	Turbulência	ETR	Modelo Gás	Fuligem
(SANTOS et al., 2008)	2D LES	Ray-Tracing	Ck	não
(POITOU et al., 2012)	3D LES	DOM	SNB-FSCK	não
(SANTOS et al., 2015)	3D LES	DOM	CK	não
(PAUL; PAUL, 2010)	LES	DOM	Gray gas	Sim
(ALMEIDA; LAGE; SILVA, 2015)	LES	FVDOM	Gray gas	não
(CENTENO; SILVA; FRANÇA, 2014)	RANS	DOM	WSGG	não
(DESJARDIN; FRANKEL, 1999)	LES	DOM	Gray gas	sim
(JONES; PAUL, 2005)	LES	DOM	Gray gas	não

Tabela 7.1 – Estudos envolvendo combustão turbulenta e radiação térmica

Conforme a Tabela 7.1 existem poucos estudos ainda envolvendo modelos complexos de combustão e radiação térmica, sem falar do modelagem da cinética química e das propriedades radiativas dos gases de maneira mais sofisticado. O alto custo computacional ainda não permite simulações de tais magnitudes, porém todos os autores s/ ao unanimes em mostrar que a radiação pode afetar de maneira significativa os resultados, conforme veremos no estudo de caso a seguir retirado de (SANTOS et al., 2015).

7.3.1 Estudo de Caso - Calculo chama turbulenta em um diedro

Nesta seção serão apresentando os resultados de uma simulação acoplada de combustão LES tridimensional e radiação térmica. Resultados com e sem radiação térmica são comparados.

Figura 7.3 mostra iso-surfaces instantâneas de temperatura resolvidas sem e com radiação térmica no mesmo tempo físico. $t = 0.28s$. Com radiação a estrutura do escoamento é modificada e as estruturas turbulentas parecem crescer alguns centímetros após o ancorado de chama (um prisma neste caso). A distribuição de temperatura muda e os valores máximos da mesma é menor com radiação térmica. O pico com maior valor de temperatura é encontrado no plano central do queimador.

Figura 7.4 mostra um campo instantâneo de potência radioativa. Uma grande

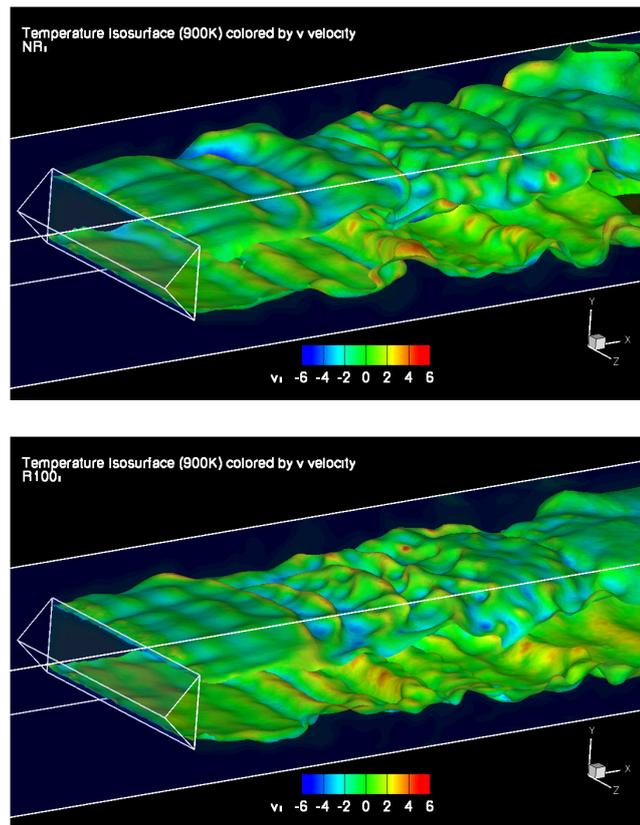


Figura 7.3 – Iso-surfaces instantâneas de temperatura resolvidas (900 K) sem (em cima) / com (a baixo) radiação térmica colorido de acordo com a velocidade transversal v em $t = 0.28s$.

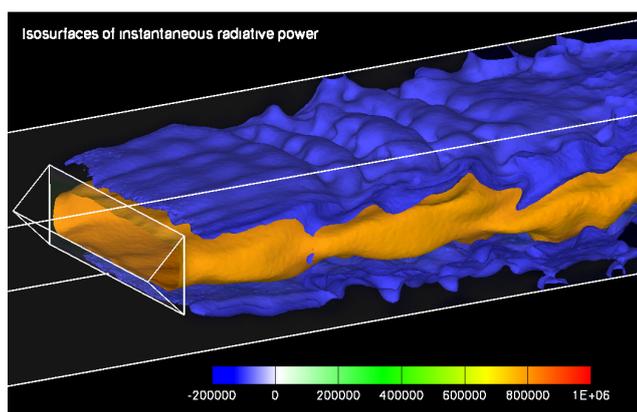


Figura 7.4 – Campo instantâneo de potência radioativa (em $W.m^{-3}$) em $t=0.28s$. Valores positivos indicam potência radioativa perdida pelos gases, e valores negativos absorvidos.

região central positiva corresponde ao potência radiativa emitida pelos gases quentes. Uma pequena região absorvedora é visível atrás do ancorado de chama. O máximo valor médio de potência radiativa encontra-se em $x=0.12m$. A potência radiativa total calculada com o DOMASIUM para esta configuração é aproximadamente de 1 kW que representa menos de 2% da potência total da chama. Apesar disto a radiação térmica tem um grande efeito na dinâmica da chama.

As diferenças na temperatura começam a aparecer apenas alguns centímetros após o ancorador de chama, como ilustrado na figura 7.5, aonde o perfil de temperatura média ao longo do eixo x no plano central é mostrado a partir do ancorado de chama até o final da câmara de combustão. Como esperado, a temperatura média diminui cerca de 80K quando a radiação térmica é levada em conta, em função do aumento da energia transferida das zonas quentes para as zonas frias devido a radiação.

Estas diferenças na temperatura impactam diretamente nos produtos da reação. Por exemplo a fração média de CO_2 (figura 7.6) diminui ligeiramente quando a radiação é levada em conta, apesar do mecanismo químico simples de uma etapa utilizado. Um impacto mais significativo da transferência de calor por radiação térmica pode ser antecipado quando do uso de um mecanismo químico que inclua poluentes como monóxido de carbono (CO) or óxidos nítricos (NO_x), cuja formação é conhecida por ser muito sensível a temperatura local.

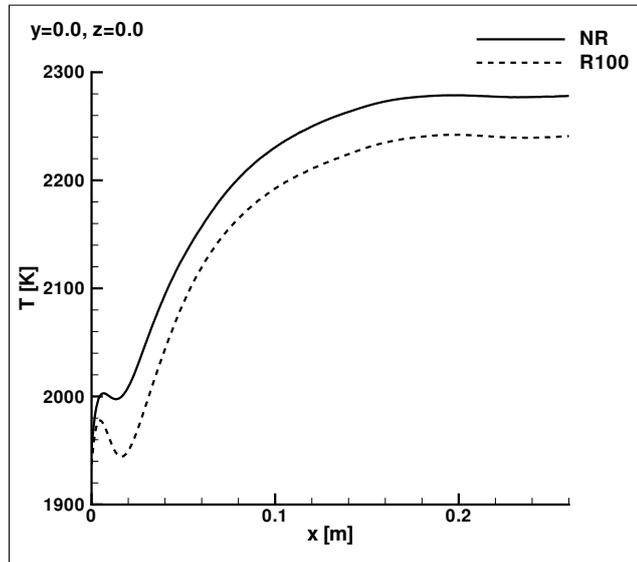


Figura 7.5 – Perfil da temperatura média resolvida sem (NR) e com (R100) radiação térmica ao longo do eixo do queimador em $y=0$ e $z=0$.

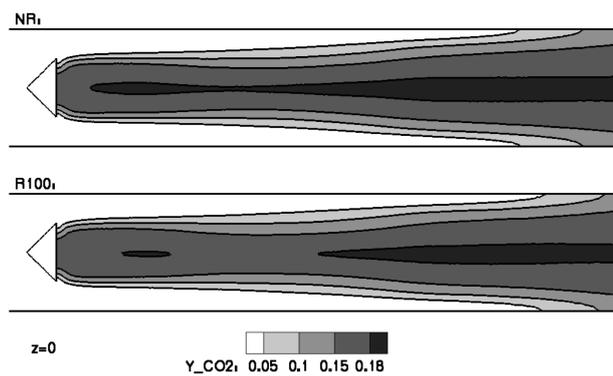


Figura 7.6 – Cortes em $z=0$ da fração média de CO_2 resolvida sem (NR, em cima) e com (R100, em baixo) radiação térmica.

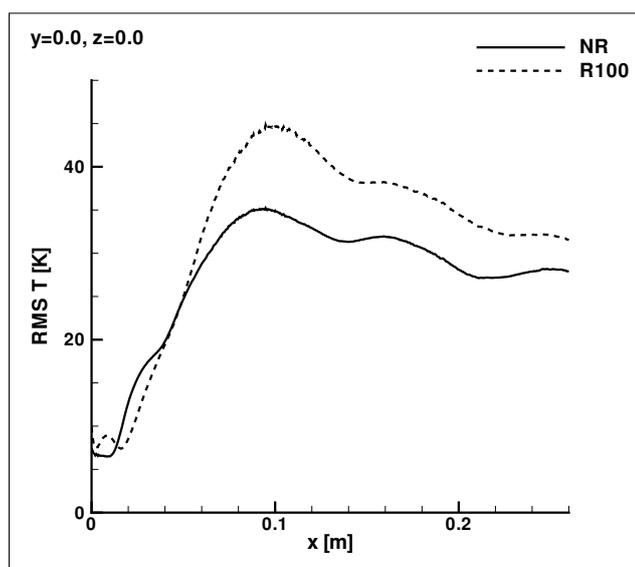


Figura 7.7 – Perfil do RMS filtrado da temperatura sem (NR) e com (R100) radiação térmica ao longo do eixo do queimador ($y=0$ e $z=0$).

O RMS filtrado da temperatura evidência de forma mais quantitativa a modificação na dinâmica da chama quando a radiação térmica é levada em conta, conforme figura 7.7. Esta figura compara o perfil do RMS filtrado de temperatura no plano central do queimador sem e com radiação térmica. Apesar da similaridade entre os perfis apresentados, os valores de RMS são maiores a jusante da zona de recirculação atrás do obstáculo quando a radiação térmica é levada em conta. Diferenças maiores que 80K podem ser observadas em algumas regiões denotando movimentos da chama mais intensos.

Capítulo 8

Modelagem de combustão de sprays

Guenther Carlos Krieger Filho

Flavio Cesar Cunha Galeazzo

Fernando Luis Sacomano Filho

Em sistemas reais de combustão de combustíveis líquidos na forma de spray, vários processos ocorrem simultaneamente, entre eles a modificação da turbulência da fase contínua, colisão e quebra das gotículas da fase dispersa, evaporação, mistura e combustão. A modelagem de tantos processos e de suas interações não é uma tarefa trivial. Para facilitar o seu estudo, modelos para cada subárea serão tratados em separado, como quebra de gotículas, mistura e combustão, porém tomando o cuidado de não estudar nenhuma das subáreas em total isolamento das outras.

Existem duas abordagens principais quando se modela sistemas bifásicos, chamadas de abordagem Euler-Lagrange e Euler-Euler. Na abordagem Euler-Lagrange, uma formulação Eurliana é usada para a fase gasosa que é tratada com um meio contínuo por meio das equações de Navier-Stokes, enquanto uma formulação Lagrangeana é usada para a fase dispersa que é tratada fazendo-se o rastreamento de um grande número de gotículas que se movem através da fase contínua, técnica conhecida como Rastreamento de Partículas Lagrangeanas (em inglês Lagrangian Particle Tracking, LPT). A fase dispersa pode trocar quantidade de movimento, massa e energia com a fase gasosa.

Na abordagem Euler-Euler, tanto a fase gasosa quanto a fase líquida que forma o

spray são modelados como fases contínuas, usando uma formulação Eurliana. A descrição das gotículas do spray é na maioria das vezes insuficiente quando se usa a abordagem Euler-Euler, o que limita o seu uso em sistemas de combustão; por isso ela não será discutida longamente nesse texto.

Este capítulo é dividido da seguinte forma: primeiro são apresentados os diversos fenômenos que compõe a combustão de sprays. Em seguida são derivados os modelos matemáticos usados na descrição das fases contínua e dispersa, inclusive o acoplamento entre as fases na forma de termos fonte nas equações de conservação. Os diferentes tipos de simulação são descritos no final do capítulo.

8.1 Regimes de combustão de sprays e fenômenos associados

Esta seção procura estruturar os possíveis cenários encontrados em sistemas com combustão de sprays, com vários regimes de atomização, evaporação, micromistura e combustão sendo discutidos.

8.1.1 Atomização

A correta modelagem da distribuição do tamanho das gotículas é fundamental para a simulação da combustão de sprays. Assim, os mecanismos de instabilidades de jato, que promovem a atomização de jatos líquidos, tem grande importância na evolução de sprays. Considerando-se porém que o foco deste texto é em sprays desenvolvidos, somente uma breve introdução aos fenômenos ligados à atomização serão apresentados. O artigo de revisão de Lin e Reitz (1998) apresenta a teoria de quebra de jatos líquidos desde os primeiros estudos quantitativos. Vários mecanismos físicos são importantes para a atomização, como a instabilidade absoluta de um jato, a formação de ligamentos e a tensão interfacial que promovem a quebra em gotículas. Apesar dos mecanismos de quebra de gotículas ainda serem objeto de pesquisa (LIN; REITZ, 1998), o processo de atomização pode ser classificado em atomização primária e secundária, como ilustrado na Figura 8.1.

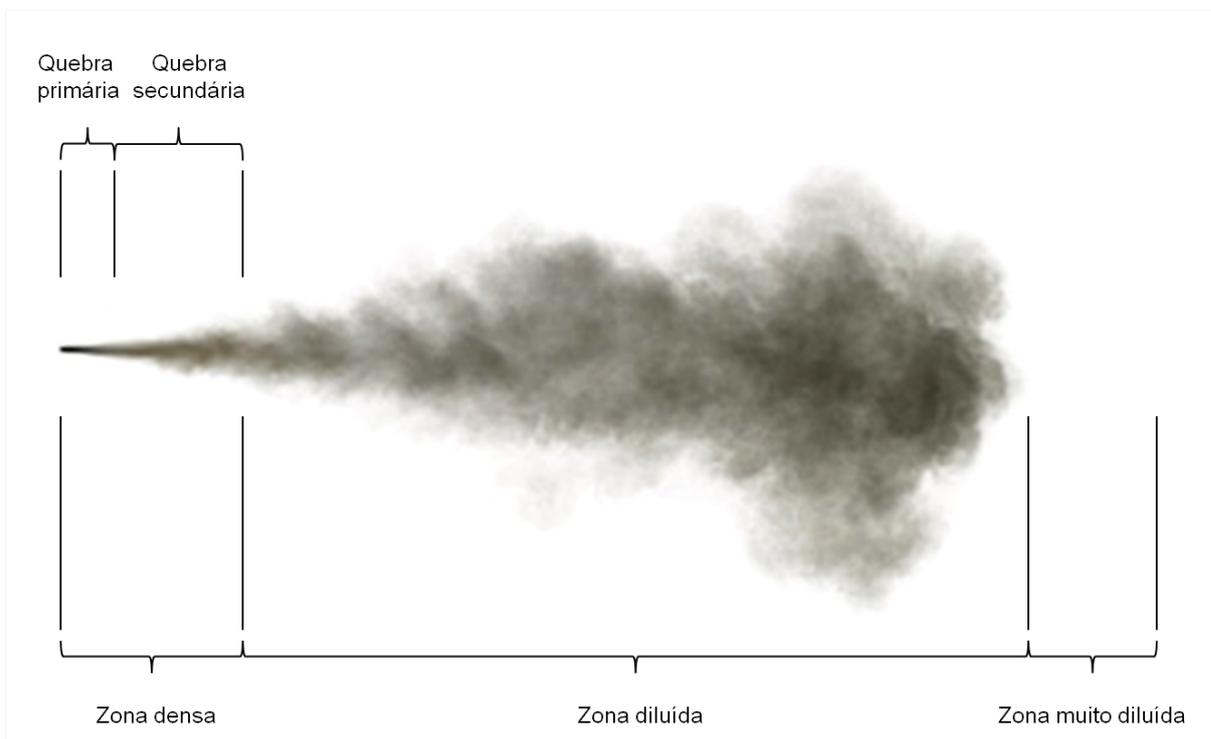


Figura 8.1 – Esquema representando vários regimes de escoamento e processos de atomização em sprays.

Os três regimes de escoamento baseados na fração volumétrica da fase dispersa também podem ser vistos na Figura 1. O regime de spray denso, onde os efeitos da atomização dominam, se refere à região onde a fração volumétrica da fase dispersa é maior que 10^{-3} . Nesse regime a dinâmica da fase dispersa é dominada pela colisão e coalescência das gotículas. Coalescência é o mecanismo responsável pela união de duas ou mais gotas que colidem. No regime diluído, a fração volumétrica da fase dispersa assume valores entre 10^{-6} e 10^{-3} . Neste regime, a influência da fase dispersa sobre a fase contínua é significativa, mas a colisão das gotículas pode ser negligenciada. Finalmente, no regime muito diluído, a influência da fase dispersa sobre a fase contínua é insignificante se a fração volumétrica da fase dispersa for menor que 10^{-6} .

No regime denso, um jato líquido é injetado em um meio gasoso, desenvolvendo instabilidades de Kelvin-Helmholtz na interface gás-líquido, dando origem a instabilidades de Rayleigh-Taylor. Estas por sua vez se manifestam como rápidas modulações transversais seguidas pela formação de grandes gotículas e de ligamentos. Este processo de desintegração do jato líquido em grandes gotículas e ligamentos é chamado de atomização

primária.

As forças aerodinâmicas que surgem devido à diferença de velocidade entre as fases contínua e dispersa causa instabilidades que resultam em nova desintegração de gotículas e ligamentos em ligamentos ainda menores. Este processo é chamado atomização secundária.

Weber (1931) propôs um critério de quebra de gotículas que é amplamente usado, baseado no número de Weber $We = \rho_d(\Delta U_d)^2 D / \sigma$, onde ρ_d , ΔU_d , D e σ são a densidade das gotículas, a velocidade relativa das gotículas, o diâmetro das gotículas e a tensão superficial, respectivamente. Baseado no mecanismo de quebra de gotículas, que depende do número de Weber e no tempo de deformação (quebra), a quebra secundária pode ser classificada em quebra do tipo saco (bag breakup) para números de Weber entre 11 e 80, quebra por camadas (stripping breakup) para números de Weber entre 80 e 350, e quebra catastrófica (catastrophic breakup) quando o número de Weber exceder 850. Os diferentes mecanismos estão ilustrados na Figura 8.2.

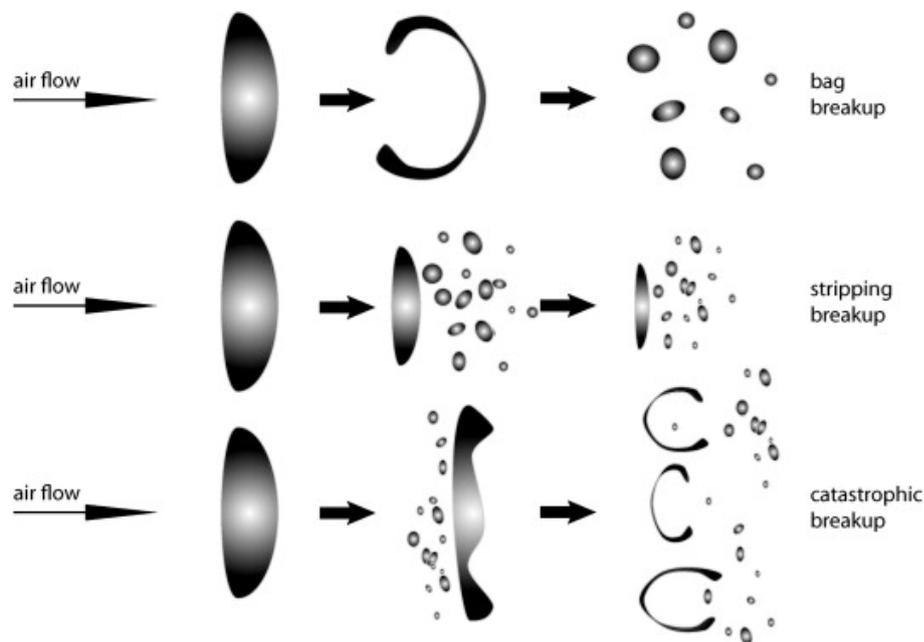


Figura 8.2 – Esquema dos vários tipos de atomização secundária (adaptado de Jenny, Roekaerts e Beishuizen (2012)).

8.1.2 Dispersão turbulenta

Por causa da transferência de quantidade de movimento na interface entre as fases (forças de arrasto), a estatística da velocidade das gotículas é influenciada pela turbulência da fase contínua e vice-versa. A dinâmica da fase dispersa pode ter uma influência significativa não apenas na velocidade média da fase contínua, mas também nos tensores de Reynolds e em momentos de mais alta ordem. A influência será tanto maior quanto maior for a fração de gotículas presentes. Portanto, a não ser que o sistema esteja situado no regime de spray muito diluído, o acoplamento de duas vias (em inglês *two way coupling*) deve ser utilizado, no qual a influência das gotículas sobre a fase contínua é considerada.

8.1.3 Modulação da turbulência

A presença de partículas líquidas ou sólidas que sejam maiores que a escala de Kolmogorov com frações volumétricas tão pequenas quanto 2.5×10^{-6} podem modificar o espectro da turbulência da fase contínua, alterando por sua vez as taxas de transporte de quantidade de movimento e massa (HEYER; KOO; RAMAN, 2011). Essa alteração acaba por modificar também a distribuição da fase dispersa. Vários estudos detalhados sobre a interação entre as fases dispersa e contínua podem ser encontrados na literatura (ELGHOBASHI; TRUESDELL, 1993). Algumas das conclusões a que chegaram esses estudos é que mesmo para baixas frações volumétricas da fase dispersa ocorre modulação da turbulência e que anisotropia da turbulência é promovida pela presença de gotículas ou partículas.

8.2 Evaporação e micromistura

A evaporação das gotículas e a micromistura possuem um papel crucial na distribuição de combustível na fase gasosa e conseqüentemente influência na taxa de reação. A mistura entre o vapor de combustível liberado pela evaporação das gotículas e o oxidante presente na fase gasosa pode ser descrito usando uma fração de mistura. A utilização de uma fração de mistura que seja adequada para sistemas de combustão de sprays deve ser

feita com cuidado, como discutido por Bilger (2011).

Três diferentes cenários podem ocorrer em sistemas com sprays evaporando, que estão representados na Figura 8.3. O primeiro cenário representa o caso em que as gotículas evaporam rapidamente em regiões com concentração de vapor baixa ou nula. Considerando-se espaços menores entre as gotículas, a evaporação de uma gotícula pode afetar as gotículas do seu entorno, levando ao segundo cenário. As regiões de alta concentração de vapor que são formadas ao redor dos aglomerados de gotículas reduzem drasticamente a taxa de evaporação das gotículas que se encontram nos aglomerados. No terceiro cenário, o transporte turbulento das gotículas entre as regiões de alta e baixa concentração de vapor acrescenta um efeito que tende a ser dominante. Naturalmente os diferentes cenários estão relacionados à taxa de evaporação das gotículas.

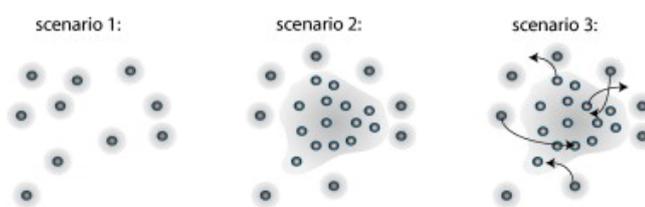


Figura 8.3 – Esquema dos vários cenários da evaporação de sprays. Cenário 1: gotículas isoladas. Cenário 2: aglomerados de gotículas em regiões de alta concentração de vapor. Cenário 3: transporte de gotículas de regiões de alta concentração de vapor para regiões de baixa concentração e vice-versa (adaptado de Jenny, Roekaerts e Beishuizen (2012)).

Em sistemas de combustão de spray onde o spray pode ser considerado diluído, a hipótese de que as gotículas estão isoladas é razoável, e o primeiro cenário pode ser considerado. Os outros cenários se aplicam a sprays densos, e não serão abordados neste texto.

A taxa de evaporação aumenta quando a velocidade relativa entre gotícula e a fase gasosa ao seu redor também aumenta. Isso torna a estatística da flutuação da velocidade de escorregamento turbulenta importante para a taxa de evaporação média, assim como o tamanho relativo da gotícula e a escala da turbulência. Na maioria das aplicações as gotículas são menores que a escala de Kolmogorov, fazendo com que a ideia de uma gotícula esférica imersa em um escoamento com número de Reynolds baixo seja

útil. Como consequência, muitos estudos se concentram em determinar os números de Nusselt e Sherwood entre uma esfera sólida ou uma gotícula em um ambiente com um escoamento convectivo.

Se o combustível é uma mistura de vários componentes, considerações adicionais devem ser levadas em conta. Os componentes com menor peso molecular tendem a evaporar mais rapidamente, encontrando condições de escoamento e mistura diferentes do que os componentes mais pesados. Assim, a ignição e a estrutura da chama podem ser sensíveis aos componentes de uma mistura combustível.

8.3 Combustão

A combustão de sprays em regime turbulento se divide em dois grandes grupos: chamas estatisticamente estacionárias, como as presentes em turbinas a gás, e chamas intermitentes, como as encontradas em motores de combustão interna. Algumas variáveis de interesse estão presentes apenas em chamas intermitentes, como por exemplo o comprimento de penetração do spray e o tempo de atraso de ignição.

8.3.1 Processos de combustão

Uma característica essencial da combustão de sprays é que ou o combustível ou o comburente é injetado na câmara de combustão na forma líquida e a evaporação e a difusão do vapor com a fase gasosa ambiente acontecem antes das reações químicas entre combustível e oxidante. Assim, a combustão de sprays apresenta características tanto de chamas difusivas quanto de chamas pré-misturadas. A mistura ar-combustível varia no tempo e no espaço, e a ancoragem da chama na região de mistura estequiométrica depende ou dessas regiões se manterem íntegras tempo suficiente em relação ao tempo de atraso de ignição, ou na difusão de chamas já estabelecidas que estiverem próximas.

Combustíveis compostos de hidrocarbonetos queimam seguindo um mecanismo de reação complexo que envolve muitas espécies químicas, o que levanta a questão do quanto a cinética química detalhada influencia a fenomenologia da chama. Os processos

químicos e sua interação com o escoamento são a base de uma abordagem detalhada da combustão, mas também são responsáveis por parâmetros globais da chama como a velocidade de queima em regiões de pré-mistura, extinção da chama sob turbulência severa em regiões de difusão, e também a ocorrência de chamas triplas (em inglês *triple flames*) em regiões de pré-mistura parcial.

8.3.2 Regimes de combustão de sprays

A descrição de chamas de spray usando o conceito de regimes de combustão tem se tornado mais complexo e também completo com o passar dos anos. A primeira observação a ser feita é que quando a distância entre as gotículas se torna pequena o suficiente, as gotículas começam a interagir umas com as outras. Enquanto que nos fenômenos de coalescência e quebra as gotículas precisam entrar em contato para interagir, uma gotícula em combustão pode afetar outras que estão distantes através do aquecimento do gás do seu entorno, pela presença de produtos de combustão e pela presença de uma zona de reação localizada a vários diâmetros de distância do centro da gotícula. Mesmo sem a presença da combustão, as gotículas podem se influenciar através da liberação de vapor.

8.4 Modelagem matemática

Para a modelagem matemática da combustão de sprays, será considerado o regime de spray diluído, ou seja, cuja fração volumétrica da fase dispersa fique entre 10^{-6} e 10^{-3} . Em sprays neste regime é possível estimar a influência da presença das gotículas na turbulência da fase gasosa usando-se a definição do número de Stokes (St), juntamente com a fração volumétrica de líquido no spray. O número de Stokes corresponde à razão entre a escala de tempo de relaxação das partículas (τ_p) e a escala de tempo integral da turbulência da fase gasosa (T_t), na forma

$$St = \frac{\tau_p}{T_t}. \quad (8.1)$$

O tempo de relaxação das partículas pode ser avaliado por

$$\tau_p = \left(\frac{18\mu C_D Re_e}{\rho_l d_p^2 24} \right)^{-1} \quad (8.2)$$

em que d_p é o diâmetro de uma gotícula, ρ_l é a massa específica da fase líquida, C_D é o coeficiente de arrasto (Equação 8.7) e Re_e corresponde ao número de Reynolds de escorregamento:

$$Re_e = \frac{\rho d_p |\vec{u} - \vec{u}_p|}{\mu}, \quad (8.3)$$

onde \vec{u} é o vetor da velocidade instantânea da fase gasosa e \vec{u}_p é o vetor de velocidade instantânea da gotícula.

A escala de tempo de relaxação da partícula corresponde ao intervalo de tempo em que uma gotícula com dimensões representativas do spray leva para que o seu escorregamento se anule e assim ela passe a ter as mesmas velocidades do escoamento que a circunda. A classificação feita por Chrigui (2005) baseia-se no tipo de acoplamento que ocorre entre as duas fases: em um único sentido (a fase dispersa não interfere na fase contínua), em dois sentidos (a fase dispersa interfere na fase contínua) e em quatro sentidos (além do acoplamento em dois sentidos há, também, a interação entre gotículas). A Figura 8.4 apresenta esta classificação.

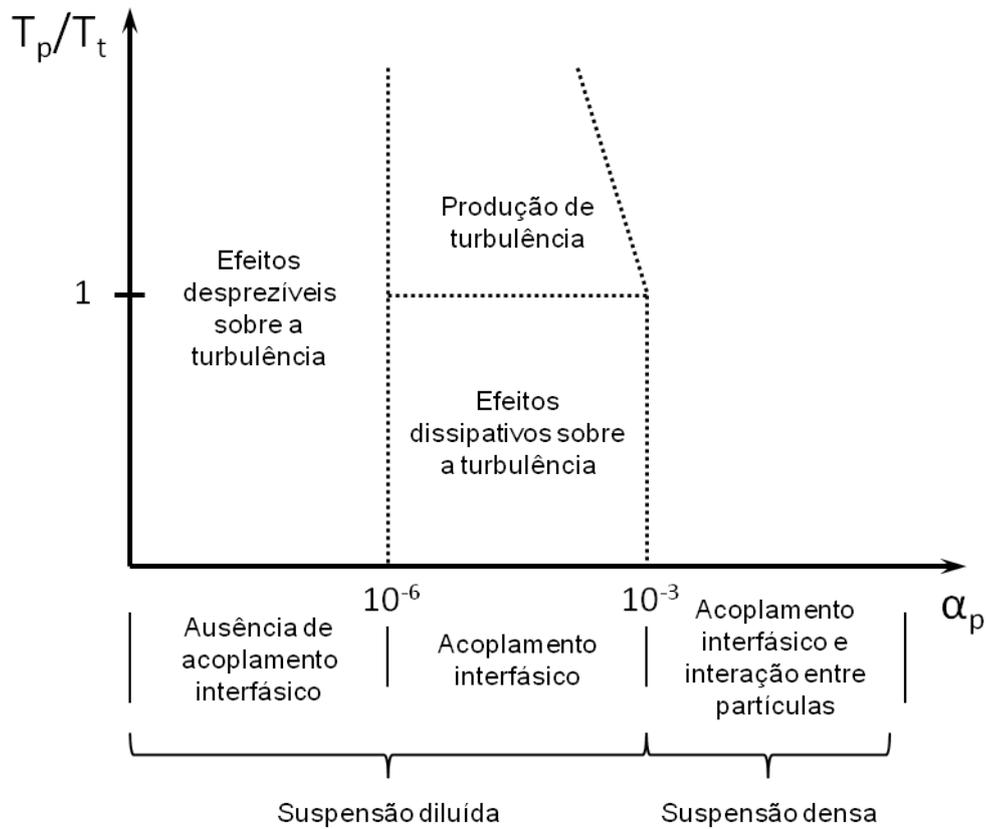


Figura 8.4 – Classificação dos tipos de suspensão. Adaptado de Chrighi (2005).

8.4.1 Modelagem do Deslocamento das Gotículas

No Rastreamento de Partículas Lagrangeanas (em inglês *Lagrangian Particle Tracking*, LPT) as gotículas são aproximadas por entidades discretas que trafegam através do escoamento da fase dispersa através de equações Lagrangeanas. A posição de uma gotícula baseada nesta formulação pode ser calculada com a integração da seguinte equação:

$$\frac{d\vec{x}_p}{dt} = \vec{u}_p, \tag{8.4}$$

onde \vec{x}_p corresponde ao vetor deslocamento da gotícula e t é o tempo. A velocidade é obtida através da integração da equação da aceleração da gotícula, que provém da consideração de equilíbrio dinâmico de uma partícula. Uma forma convencional de se obter esta equação é considerar que a força resultante é a soma da força de arrasto aerodinâmico e a força causada pelo empuxo. Assim, a equação da aceleração é

$$\frac{d\vec{u}_p}{dt} = \frac{3 C_D}{4} \frac{C_D}{d_p} \left(\frac{\rho}{\rho_l} \right) (\vec{u} - \vec{u}_p) |\vec{u} - \vec{u}_p| + \frac{\vec{g}(\rho_l - \rho)}{\rho_l}, \quad (8.5)$$

onde \vec{g} é a aceleração da gravidade. Usando o número de Reynolds de escorregamento (Equação 8.3), a Equação 8.5 pode ser reescrita como:

$$\frac{d\vec{u}_p}{dt} = \frac{18\mu C_D Re_e}{d_p^2 \rho_l} \frac{C_D Re_e}{24} (\vec{u} - \vec{u}_p) + \frac{\vec{g}(\rho_l - \rho)}{\rho_l}. \quad (8.6)$$

A formulação utilizada para a equação da aceleração e do coeficiente de arrasto despreza os efeitos de massa virtual, forças de sustentação provenientes de efeito Magnus e de efeito Saffman (SIRIGNANO, 2010). Segundo Faeth (1983), esta aproximação é satisfatória para casos em que a densidade do líquido é superior à do gás e os gradientes de velocidade são baixos.

Uma das formas de cálculo do coeficiente de arrasto foi proposta por Yuen e Chen (1976), que ajusta a correlação de esferas de Abramzon e Sirignano (1989) considerando o fenômeno de evaporação de gotículas esféricas:

$$C_D = \begin{cases} \frac{24}{Re_e} \left(1 + \frac{Re_e^{2/3}}{6} \right) & \text{if } 0 < Re_e < 1000 \\ 0.44 & \text{if } Re_e \geq 1000 \end{cases} \quad (8.7)$$

8.4.2 Modelagem da Evaporação das Gotículas

A evaporação de gotículas representa um fator decisivo na preparação da mistura para combustão de sprays. Entretanto, o problema de evaporação de gotas é um tema multidisciplinar complexo, que envolve transferência de calor e de massa, dinâmica de fluidos e reações químicas (SIRIGNANO, 2010).

As seguintes simplificações foram adotadas no processo de descrição matemática do processo de evaporação, listadas a seguir:

- A fase dispersa é composta de apenas um componente;

- As quantidades da fase gasosa foram assumidas como sendo uniformes na superfície da gotícula;
- Foi assumida a condição de equilíbrio de fases na interface gás/líquido;
- O gás da fase gasosa não é solúvel na fase dispersa;
- As reações químicas e a transferência de calor por radiação foram negligenciadas.

De forma geral, pode-se considerar que a modelagem da evaporação de gotículas baseia-se no seguintes aspectos principais: a evolução da evaporação durante o deslocamento da gotícula no escoamento, o comportamento da fase gasosa que a circunda, a interface gás/líquido e a dinâmica do líquido na gota. O comportamento da fase gasosa que circunda a gotícula já foi apresentado nos itens anteriores. Os demais aspectos, porém, são apresentados detalhadamente neste tópico.

As aproximações para o processo de evaporação das gotículas em um spray são classificadas em dois grandes grupos, segundo Faeth (1983). A primeira delas corresponde à aproximação por aquecimento transiente (em inglês *transient heat-up model*), a qual considera que a temperatura da gotícula se altera conforme ela trafega no escoamento. Neste caso, a taxa de transferência de massa é determinada pela diferença de concentração de vapor de combustível entre a superfície da gotícula e os seus arredores. Faeth (1983) considera que esta aproximação representa corretamente o comportamento de uma gotícula imersa em um spray, a qual não tem temperatura de bulbo úmido fixa. Segundo este autor, isso se deve às constantes alterações das propriedades da fase gasosa em seus arredores. A outra aproximação corresponde à de estágios, em que a gotícula se aquece gradualmente até atingir uma temperatura de bulbo úmido equivalente à temperatura de ebulição do líquido à pressão ambiente do spray. Enquanto esta temperatura não é atingida, a gotícula não evapora. A evaporação na aproximação por estágios ocorre pela diferença de temperatura entre as fases a partir do momento em que a gotícula atinge a temperatura de ebulição, pois a taxa de evaporação, no período em que a gotícula se aquece, é considerada desprezível. Em ambas as aproximações os efeitos da convecção forçada são contabilizados com relações empíricas obtidas de estudos de gotas isoladas.

Faeth (1983) menciona que apesar de a aproximação por estágios facilitar os cálculos, a qualidade de seus resultados é questionável. Este autor descreve a situação em que as gotículas gastam a maior parte do seu tempo no núcleo frio do spray, onde as temperaturas do gás são relativamente baixas e a concentração de combustível é alta. Nessa região a estimativa da taxa de transferência de massa pela diferença de temperaturas, em comparação com o modelo de aquecimento transiente, é de qualidade inferior.

Uma variação interessante da aproximação por estágios considera adicionalmente a transferência de massa no período em que a gotícula se aquece. Assim sendo, enquanto a gotícula se encontra com temperaturas mais baixas que a sua temperatura de ebulição à pressão ambiente, o potencial de evaporação é dado pela diferença de concentração de vapor de combustível. Porém, quando a gotícula atinge a temperatura de bulbo úmido ela passa a transferir massa pela diferença de temperatura entre as fases.

A modelagem do comportamento da interface gás/líquido determina as taxas de transferência de calor e massa na gotícula. Três modelos principais podem ser classificados. O primeiro considera as soluções analíticas de simplificações das equações de transporte de energia e massa para uma gotícula estacionária. São utilizadas correções baseadas em dados empíricos para contabilizar os efeitos do movimento relativo entre as fases. O segundo considera o emprego da teoria de filme, utilizada por Abramzon e Sirignano (1989) e Apte, Mahesh e Moin (2009). O terceiro modelo utiliza as equações de balanço na partícula.

Geralmente, a difusividade térmica da fase gasosa é maior que a da fase líquida, o que se reflete num aquecimento mais demorado para a fase líquida do que para a fase gasosa. Assim, a condição de regime quase estacionário para a fase gasosa pode ser assumida, negligenciando-se as derivadas de tempo para esta fase. Esta hipótese é assumida neste trabalho.

Sirignano (2010) define seis tipos de formulações para se modelar a dinâmica da fase líquida. Organizando-as de forma crescente com sua respectiva complexidade, são elas:

- Temperatura constante de gotículas;

- Condutividade líquida infinita;
- Aquecimento transitório esfericamente simétrico de gotícula;
- Condutividade efetiva;
- Modelo de vórtice de aquecimento de gotícula;
- Solução das equações de Navier-Stokes para o escoamento interno a gotícula.

A principal diferença entre essas formulações é o tratamento do aquecimento da fase líquida. É este fenômeno que em muitos casos controla a taxa de evaporação das gotículas, especialmente quando imersas em gases com elevadas temperaturas, como em combustão de sprays. Algumas dessas formulações correlacionam-se entre si, sendo que uma corresponde à outra em sua respectiva condição limitante.

Na formulação de temperatura constante, também conhecida como “lei de d^2 ” (em que o quadrado do diâmetro da gotícula decresce linearmente com o tempo), a temperatura do líquido permanece constante e igual à temperatura de ebulição à pressão ambiente. O modelo de condutividade infinita é mais sofisticado, ao considerar a variação da temperatura com o tempo. Entretanto, a distribuição de temperaturas no interior da gota continua sendo uniforme. A terceira formulação, também chamada de condutividade limite, considera a variação espacial da temperatura, porém com simetria esférica.

Os três primeiros modelos podem ser diretamente aplicados à situação em que não há movimento relativo entre as fases ou em que uma correção baseada no Re_e é aplicada para contabilizar as transferências de calor e de massa entre as fases por convecção/advecção. No entanto, o escoamento do líquido no interior da gotícula não é considerado nesses três primeiros modelos. A formulação da condutividade efetiva considera a circulação interna e o aquecimento convectivo interno de maneira *ad hoc*, ao propor a multiplicação da condutividade do líquido por um fator de ajuste, definido experimentalmente. Esse modelo, assim como o de condutividade limite, necessita da solução da equação de condução no interior da gota, o que é obtido através de métodos numéricos. O método das diferenças finitas pode ser utilizado para a solução da condução de calor no interior da gota, como feito por Abramzon e Sirignano (1989).

O modelo de vórtice descreve com maior fidelidade a situação física do escoamento interno à gotícula ao simular a circulação interna pela aproximação de dois vórtices, um em cada hemisfério da gotícula. As soluções das equações de Navier-Stokes são, em princípio, exatas no meio contínuo. Ambos os métodos, de vórtices e com a solução das equações de Navier-Stokes, necessitam da utilização de métodos numéricos para a sua solução.

Os quatro últimos modelos, que necessitam de métodos numéricos para a sua solução demandam maior consumo de processamento computacional para serem utilizados. Por serem computacionalmente intensivos, seu uso para a solução de sprays completos é muito restrito. Já os dois primeiros modelos facilitam o cálculo de sprays completos, sendo comuns neste tipo de simulação (FAETH, 1983).

Considerando a aproximação baseada em dois estágios para o processo de evaporação das gotículas e pelos modelos da interace gás/líquido e da dinâmica do líquido, a transferência de massa de uma gotícula pode ser escrita para o primeiro estágio como

$$\frac{dm_p}{dt} = -N_l A_p W_l, \quad (8.8)$$

$$N_l = k_c (C_{l,s} - C_{l,\infty}), \quad (8.9)$$

$$C_{l,s} = \frac{p_{sat}(T_p)}{T_p R_u}, \quad (8.10)$$

$$C_{l,\infty} = X_i \frac{p}{T \cdot R_u}, \quad (8.11)$$

$$Sh = \frac{k_c d_p}{D_{l,m}} = 2,0 + 0,6 Re_e^{1/2} Sc^{1/3}, \quad (8.12)$$

onde N_l é o fluxo molar de vapor de combustível, m_p é a massa da gotícula, T_p é a temperatura da gotícula, A_p é sua área superficial, W_l é a massa molecular do líquido, k_C

é o coeficiente de transferência de massa, $C_{l,s}$ é a concentração do vapor do líquido na superfície da gotícula, $C_{l,\infty}$ é a concentração de vapor do líquido na fase gasosa, $p_{sat}(T_p)$ é a pressão de saturação do líquido em função da temperatura da gota, X_l é a fração molar de vapor na fase gasosa, p é a pressão ambiente no gás, $D_{l,m}$ é o coeficiente de difusão binária do vapor de combustível no ar, Sc é o número de Schmidt e Sh é o número de Sherwood, avaliado pela correlação de Ranz-Marshall (INCROPERA; WITT, 2003).

Uma das funções usadas para expressar a pressão de saturação em função da temperatura é dada pela lei de Antoine (REID; PRAUSNITZ; SHERWOOD, 1977). Esta formulação para a taxa de transferência de massa é válida enquanto a temperatura da fase líquida é menor que a temperatura de ebulição baseada na pressão ambiente da fase gasosa (T_{bp}). Assim, a equação do aquecimento da gotícula nesse estágio é escrita como

$$m_p c_p \frac{dT_p}{dt} = h A_p (T - T_p), \quad (8.13)$$

onde c_p é o calor específico sensível do líquido e h é o coeficiente de transferência de calor por convecção. Este coeficiente é obtido através da taxa de transferência de calor adimensional para a fase líquida, o número de Nusselt (Nu), que semelhantemente ao Sh , pode ser calculado pela expressão de Ranz-Marshall (INCROPERA; WITT, 2003):

$$Nu = \frac{h d_p}{k} = 2,0 + 0,6 Re_e^{1/2} Pr^{1/3}, \quad (8.14)$$

onde k é a condutividade térmica da fase gasosa e Pr é o número de Prandtl. A expressão que representa a transferência de massa no segundo estágio de evaporação é obtida diretamente da expressão de transferência de calor para a fase líquida quando sua temperatura é constante e igual à T_{bp} . Nesse caso, a energia transferida para a fase líquida é transformada em entalpia de vaporização da quantidade de massa evaporizada (m_P). Assim,

$$\frac{dm_P}{dt} h_{fg} = -h A_P (T - T_P). \quad (8.15)$$

Esta expressão pode ser representada diretamente como a taxa de redução do diâmetro da gotícula, considerando-se que a massa específica da fase líquida se mantém constante. Assim, a Equação 8.15 pode ser reescrita como

$$\frac{dd_P}{dt} = -\frac{2}{h_{fg}\rho_P} \left[\frac{Nu \cdot k}{d_P} (T - T_P) \right]. \quad (8.16)$$

Neste estágio, a correlação do Número de Nusselt (Nu) é alterada para uma expressão fornecida por Kuo (1986). A correlação Nu aplica-se para situações com taxa de evaporação elevada e altas temperaturas da fase gasosa,

$$Nu = \frac{\ln(1+B)}{B} (1 + 0.39Pr^{1/3}Re^{1/2}), B = \frac{c_p}{h_{fg}} (T - T_P), \quad (8.17)$$

onde B é o número de Spalding (ABRAMZON; SIRIGNANO, 1989).

8.4.3 Acoplamento Interfásico

A interação da fase contínua com a fase dispersa é feita em ambos os sentidos neste trabalho. Os valores das quantidades da fase gasosa são calculados na posição de cada gotícula provendo, assim, as quantidades necessárias para a solução das equações de cada uma delas. Os valores dessas quantidades são atualizados a cada iteração das equações da fase dispersa. Dessa forma, a fase dispersa se acopla à fase gasosa.

A influência da fase dispersa na fase gasosa é contabilizada com a somatória das taxas de transferência de quantidade de movimento linear, massa, energia e fração de mistura de cada partícula enquanto elas atravessam um volume de controle. As somatórias das taxas dessas quantidades físicas são incluídas nas equações de transporte da fase contínua através de termos fontes. Nesse sentido as equações e transporte da fase contínua (Equação 4.4, 4.5, 3.9 e 4.7) são reescritas como:

$$\frac{\partial \bar{p}}{\partial t} + \frac{\partial \tilde{p} \tilde{u}_i}{\partial x_i} = \bar{S}_1, \quad (8.18)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j}{\partial x_j} = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial (\tilde{\tau}_{ij} - \bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j)}{\partial x_j} + \bar{\rho} g_i + \overline{S_{ui}}, \quad (8.19)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{f}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{f} \tilde{u}_j}{\partial x_j} = +\frac{\partial}{\partial x_j} \left(\Gamma_f \frac{\partial \tilde{f}}{\partial x_j} \right) + \overline{S_f}, \quad (8.20)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{h}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{h} \tilde{u}_j}{\partial x_j} = +\frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu_t}{\sigma_t} \frac{\partial \tilde{h}}{\partial x_j} \right) + \overline{S_h}, \quad (8.21)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} k}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} k \tilde{u}_j}{\partial x_j} = +\frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu_t}{\sigma_k} \frac{\partial k}{\partial x_j} \right) + 2\mu_t \overline{S_{ij}} \cdot \overline{S_{ij}} - \bar{\rho} \varepsilon + \overline{S_k}, \quad (8.22)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \varepsilon}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \varepsilon \tilde{u}_j}{\partial x_j} = +\frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right) + C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k} 2\mu_t \overline{S_{ij}} \cdot \overline{S_{ij}} - C_{2\varepsilon} \bar{\rho} \frac{\varepsilon^2}{k} + \overline{S_\varepsilon}, \quad (8.23)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \widetilde{f''^2}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \widetilde{f''^2} \tilde{u}_j}{\partial x_j} = +\frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu_t}{\sigma_t} \frac{\partial \widetilde{f''^2}}{\partial x_j} \right) + C_g \mu_t \left(\frac{\partial \tilde{f}}{\partial x_j} \right)^2 - C_d \frac{\bar{\rho} \varepsilon}{k} \widetilde{f''^2} + \overline{S_{f''^2}}, \quad (8.24)$$

onde $\overline{S_1}$, $\overline{S_{ui}}$, $\overline{S_f}$, $\overline{S_h}$, $\overline{S_k}$, $\overline{S_\varepsilon}$ e $\overline{S_{f''^2}}$ correspondem respectivamente aos termos fonte de massa, quantidade de movimento linear, fração de mistura, entalpia específica, energia cinética turbulenta, dissipação de energia cinética turbulenta e variância da fração de mistura.

Uma característica importante do acoplamento interfásico é a relação entre as formas distintas de tratamento do regime de cálculo das duas fases. Como apresentado nas equações de transporte Lagrangeanas, termos referentes à taxa de variação temporal são mantidos nas equações; isso ocorre independentemente de a abordagem da fase contínua ser em regime permanente ou transitório. Devido à abordagem Lagrangeana ser utilizada para o cálculo de sistemas, que é uma abordagem não conservativa (diferentemente da abordagem por volume de controle), as formulações utilizadas para a

modelagem da dinâmica das gotículas são intrinsecamente transitórias. Governadas por essas formulações, um número finito de partículas é utilizado na abordagem Lagrangeana para representar o spray. Assim, através desse número representativo de partículas as propriedades do spray são extraídas através de um processo de integração do tipo Monte Carlo, o que permite o acoplamento da fase dispersa sobre a fase contínua.

Para a inclusão dos termos fonte associados ao transporte e evaporação das gotículas é realizada uma média de conjunto (CHRIGUI, 2005), a qual é obtida sobre um número de partículas que representa o spray. Jones, Lyra e Marquis (2010) mostraram que o processo de média sobre os termos fonte das partículas pode ser dado por

$$\bar{S} = \frac{1}{\Delta V} \sum_{\psi=1}^a S^\psi, \quad (8.25)$$

onde ΔV corresponde ao volume do volume de controle e a ao número de partículas que se encontram dentro dele. Quando a fase dispersa é calculada em regime permanente é necessária a criação de um intervalo de tempo virtual para que os cálculos da fase discreta possam ser realizados. Esse cálculo pode ser feito definindo-se um número mínimo de iterações das equações da fase dispersa para cada gotícula enquanto esta passa por um volume de controle. Desse modo, a abordagem transitória das equações governantes da fase dispersa não influencia o regime de cálculo da fase contínua, pois o acoplamento interfásico é baseado em considerações estatísticas. Chrigui et al. (2009) descreveram detalhadamente os termos fontes apresentados anteriormente, exceto o de fração de mistura e entalpia. Os termos fonte são apresentados a seguir:

$$\bar{S}_1 = \sum_{\psi=1}^a (\Delta V \cdot \Delta t), \quad (8.26)$$

$$\bar{S}_{ui} = \sum_{\psi=1}^a \frac{\left[\left(\frac{1}{\tau} (u_{p_i} - u_i) - \frac{g_i(\rho - \rho_l)}{\rho_l} \right) m_P \Delta t_p \right]_\psi}{(\Delta V \cdot \Delta t)} + \sum_{\psi=1}^a \overline{S_1(u_{p_i})}_\psi, \quad i = 1, 2, 3, \quad (8.27)$$

$$\bar{S}_f = \frac{s}{s + Y_{ox,0}} \bar{S}_1, \quad (8.28)$$

$$\overline{S_h} = \sum_{\psi=1}^a \frac{\left(-\Delta m_p h_{fl} - \frac{m_p}{W_i} \int_{T_{ref}}^{T_{ps}} c_p dT + \frac{(m_p + \Delta m_p)}{W_i} \int_{T_{ref}}^{T_{pe}} c_p dT\right)_{\psi}}{(\Delta V \cdot \Delta t)}, \quad (8.29)$$

onde Δm_p é a variação mássica de uma gotícula devido à evaporação, Δt_p é o intervalo de tempo de iteração das equações das gotículas, u_i é a velocidade da fase gasosa na direção i calculada na posição da gotícula, u_{pi} é a velocidade de uma gotícula na direção i e h_{fl} corresponde à entalpia de vaporização do líquido.

Os termos fontes associados à energia cinética turbulenta e a sua dissipação são apresentados no Capítulo 4.3, pois estão relacionados à modelagem da modulação da turbulência que é descrita neste item. O termo fonte da equação da variância da fração de mistura proposto por Hollmann e Gutheil (1998) é o seguinte

$$\overline{S_{f''2}} = \frac{\widetilde{f''2} (1 - 2\widetilde{f})}{\widetilde{f}} \widetilde{S}_f. \quad (8.30)$$

8.4.4 Dispersão Turbulenta e Modulação da Turbulência

Quando um escoamento turbulento utiliza um modelo de turbulência baseado em RANS, e até mesmo em LES, como mostrado em Jones, Lyra e Marquis (2010), é necessário se tomar um cuidado especial para a reprodução da dispersão turbulenta das gotículas. Se este mecanismo de dispersão for desconsiderado, a formulação aproxima-se da solução para escoamentos modelados com modelos de turbulência baseados em RANS. Pois, nesse caso, as partículas seguirão trajetórias determinísticas prescritas por suas condições iniciais e pelas propriedades médias da fase gasosa (FAETH, 1983).

À medida que as partículas discretas trafegam no escoamento, admite-se que elas interagem com uma sucessão de estruturas turbulentas (em inglês, *eddies*). Esse é o principal embasamento teórico que sustenta a formulação comumente adotada para o cálculo das flutuações turbulentas das propriedades da fase gasosa. Nas estruturas turbulentas, as propriedades são constantes, mas mudam de forma aleatória de uma estrutura turbulenta para outra. Essas flutuações, quando somadas às propriedades médias do escoamento,

transportadas pelas equações de conservação representam os valores instantâneos dessas propriedades e que são utilizadas nas equações da fase discreta.

Faeth (1987) apresenta uma revisão histórica abrangente dos modelos de dispersão turbulenta da fase discreta. Seguindo os resultados de suas análises, já apresentados em Faeth (1983), as partículas interagem com os turbilhões no menor intervalo de tempo definido entre o intervalo de travessia (t_{cross}) e o tempo de vida (t_e) de uma estrutura turbulenta. Esses intervalos de tempo são escritos como

$$t_e = -\frac{L_e}{\sqrt{2k/3}} \log(r), \quad (8.31)$$

$$L_e = C_\mu^{3/4} \frac{k^{3/2}}{\varepsilon}, \quad (8.32)$$

$$t_{cross} = -\tau_p \ln \left(\frac{1 - L_e}{\tau |u - u_P|} \right), \quad (8.33)$$

onde L_e é o tamanho característico de uma estrutura turbulenta e r é uma variável aleatória de distribuição uniforme entre 0,0 e 1,0. Uma vez determinado o tempo de interação da partícula com uma estrutura turbulenta, são feitos os cálculos das flutuações das propriedades do escoamento. O procedimento de cálculo das flutuações turbulentas utilizado neste estudo adiciona anisotropia nestas variáveis, em que os seus componentes obedeceram a uma distribuição Gaussiana. A flutuação turbulenta da velocidade teve como desvio padrão a quantidade $\sqrt{2k/3}$ calculada na posição da gotícula. A flutuação de cada componente do vetor velocidade \vec{u} é calculada como

$$u'_i = \zeta_i \sqrt{\frac{2k}{3}}, \quad (8.34)$$

onde ζ_i são variáveis aleatórias que seguem uma distribuição Gaussiana para cada direção cartesiana i . Quando o tempo de interação entre a partícula e a estrutura turbulenta se

esgota, outro intervalo de tempo é recalculado, como também as flutuações de velocidade que acompanham a partícula são recalculadas.

A representação da produção e dissipação da energia cinética turbulenta da fase contínua pela presença das gotículas deve considerar a modulação de turbulência. Para isso pode-se utilizar o modelo proposto em Chrigui et al. (2009). A contabilização da modelagem da modulação de turbulência na fase contínua é feita através da adição de termos fonte nas equações de transporte de energia cinética turbulenta e de sua dissipação, o que foi apresentado pelas Equações 8.22 e 8.23. Os seus termos fontes são dados pelas Equações 8.35 e 8.36, conforme a formulação proposta pelo modelo:

$$\overline{S_k} = \overline{u_i S_{ui}} - \overline{u_i} \overline{S_{ui}} + \frac{1}{2} \left(\overline{u_i^2 S_1} - \overline{u_i^2} \overline{S_1} \right) \quad i = 1, 2, 3 \text{ e}, \quad (8.35)$$

$$\overline{S_\varepsilon} = C_{3\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k} \overline{S_k}, \quad (8.36)$$

onde $C_{3\varepsilon}$ corresponde a uma constante de ajuste que é derivada de dados experimentais. Este parâmetro depende da distribuição de diâmetros e da concentração de gotículas na fase contínua (CHRIGUI, 2005). Hollmann e Gutheil (1998) utilizaram o valor de 1,00 para seus estudos com chamas de spray em ambiente aberto e Chrigui (2005) encontrou o valor de 1,87, que se ajustou muito bem com os resultados de suas medições.

Capítulo 9

Aplicações do Modelo de Combustão Turbulenta com PDF pré-assumida

Guenther Carlos Krieger Filho

Flavio Cesar Cunha Galeazzo

Fernando Luis Sacomano Filho

Neste capítulo são apresentadas as simulações realizadas com os modelos de combustão turbulenta descritos nos capítulos anteriores.

Inicialmente os modelos são aplicados em chamas com combustíveis gasosos. É simulada uma chama de difusão turbulenta de metano em um jato livre. Os resultados desta simulação são comparados com dados da literatura.

Como aplicação do modelo de combustão para combustíveis líquidos é apresentada a simulação de uma chama turbulenta de spray de etanol. Esta aplicação é relevante para o avanço do conhecimento do processo de combustão de etanol, que é uma fonte renovável de energia. Os resultados da simulação são comparados a dados experimentais obtidos da literatura.

9.1 Chama Turbulenta de Metano - Chama D

Nesta aplicação é feita a comparação de resultados de simulações com os dados experimentais da chama Sandia/TUD D (Chama D), que foi estudada por Barlow e Frank (1998), Barlow et al. (2005) e Schneider, Dreizler e Janicka (2003). Esta é uma chama gasosa, turbulenta e de difusão, proveniente de um jato circular.

Esta chama, apesar de usar uma mistura combustível composta de 25% de metano e 75% de ar, tem o comportamento de uma chama de difusão. Ela foi proposta e caracterizada de forma conjunta pelo laboratório norte-americano *Sandia National Laboratories* e pela Universidade Tecnológica de Darmstadt. Simulações desta chama podem ser encontradas em Barlow e Hinz (1999), que apresentaram resultados de simulações enviadas ao TNF4, *workshop* destinado ao estudo de chamas turbulentas de difusão. Tendo em vista a disponibilidade dos dados experimentais dessa chama, como também, a qualidade de sua caracterização, ela foi escolhida neste trabalho para servir de base de comparação de resultados de simulações numéricas.

9.1.1 Configuração numérica

Dois tipos de simulação foram realizadas, diferindo na sua complexidade. As primeiras simulações foram feitas com o código computacional desenvolvido no Laboratório de Engenharia Térmica e Ambiental do Departamento de Engenharia Mecânica da Escola Politécnica da USP (LETE), utilizando modelos de turbulência do tipo RANS (Reynolds-averaged Navier Stokes) e em estado estacionário. Os resultados obtidos foram positivos, porém algumas características da chama só foram simuladas de forma satisfatória com alterações nos parâmetros do modelo de turbulência.

Na busca de uma simulação que reproduza a chama em questão de forma satisfatória, simulações com modelo de turbulência do tipo LES (Large Eddy Simulation) e em estado transiente foram feitas, para com isso descrever em maior detalhe e com maior exatidão o escoamento da chama. Essas novas simulações utilizaram o software OpenFOAM.

Os modelos de combustão usados também são diferentes. Enquanto as simulações

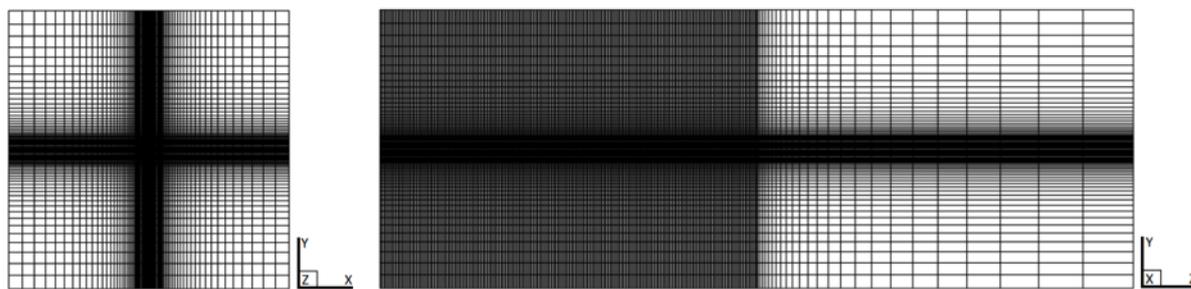


Figura 9.1 – Detalhes da malha utilizada para as simulações do tipo RANS da chama Sandia/TUD D.

do tipo RANS utilizaram o modelo de folha de chama (ver seção 3.1), as simulações LES utilizaram o modelo JPDF (ver seção 5.1).

Para as simulações do tipo RANS foi utilizada uma malha tridimensional, cartesiana, com elementos de tamanho uniforme na região de refino e com elementos com uma taxa de crescimento linear e uniforme nas demais regiões. O número de elementos utilizados foi de 1.952.000, sendo 252.000 na região de refino com dimensões de $1/8D \times 1/8D$ (D é o valor do diâmetro do bocal de injeção da mistura, para a Chama D este diâmetro tem o valor de 7,2 mm) nas direções transversais e com dimensões variando de $1/8D$ na direção longitudinal até valores maiores devido à zona de crescimento uniforme. A distribuição dos elementos na seção transversal é semelhante para as quatro laterais, sendo: 50 elementos na região de refino com lado de $1/8D$ e 25 elementos em cada região de crescimento linear uniforme com uma razão de 1,11 e lado inicial de $1/8D$. Na direção longitudinal, os primeiros 280 elementos possuem altura uniforme de $0,19D$ e a região de crescimento linear uniforme tem uma razão de 1,15 com altura inicial de $0,19D$. As dimensões do domínio computacional são $39D \times 39D \times 105D$. A Figura 9.1 apresenta a vista de topo e lateral da malha utilizada.

Para as simulações do tipo LES foi também utilizada uma malha tridimensional, mas com elementos hexahédricos que seguem os contornos da geometria. A malha possui um total de 675.000 elementos, valor menor que o da malha usada nas simulações RANS. Isso se explica pelo fato dos requisitos de qualidade da malha serem diferentes para simulações do tipo RANS e do tipo LES, notadamente a razão de aspecto dos elementos na região de interesse. Detalhes da malha podem ser vistos na Figura 9.2.

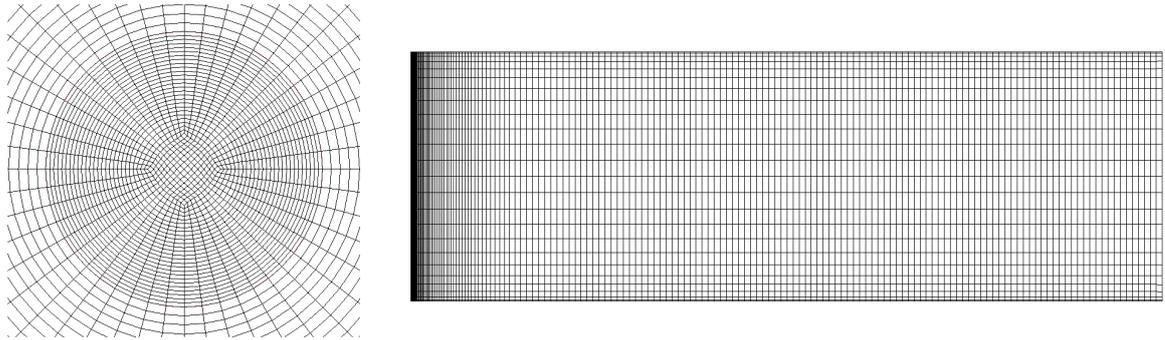


Figura 9.2 – Detalhes da malha utilizada para as simulações do tipo LES da chama Sandia/TUD D.

As simulações do tipo RANS da chama Sandia/TUD D foram realizadas com um código computacional desenvolvido no Laboratório de Engenharia Térmica e Ambiental do Departamento de Engenharia Mecânica da Escola Politécnica da USP (LETE). As condições de contorno para a velocidade média usaram o perfil de velocidades medido experimentalmente, em que apenas o componente axial teve valor não nulo, e pode ser visto Figura 9.3. Assim, para a velocidade, como também para as demais grandezas físicas transportadas a condição de entrada foi do tipo Dirichlet em todas as simulações realizadas neste trabalho, exceto para a pressão. O perfil de velocidades da Chama D foi interpolado linearmente nas faces dos elementos que compõe o plano de entrada do domínio.

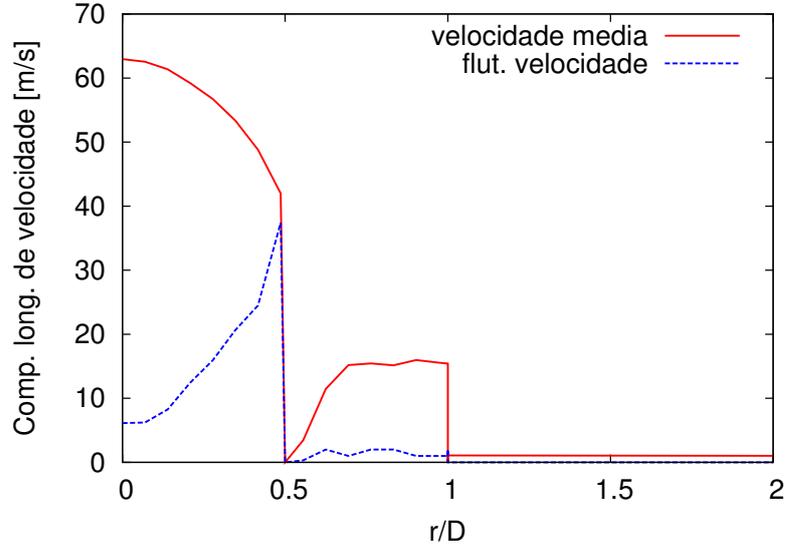


Figura 9.3 – Perfil de velocidade média axial e de flutuação turbulenta axial de velocidade da chama Sandia/TUD D. Adaptado de Schneider, Dreizler e Janicka (2003).

As perturbações da velocidade, também apresentadas na Figura 9.3, serviram para a formulação das condições de contorno para a energia cinética turbulenta, que foi obtida ao se desprezar as flutuações de velocidade nas direções transversais do jato. Dessa forma, k e ε foram determinados através das seguintes relações:

$$k = \frac{\sqrt{u_3'^2}}{2}, \quad (9.1)$$

$$\varepsilon = C_\mu^{3/4} \frac{k^{3/2}}{0,07 \left(\frac{D}{2}\right)}, \quad (9.2)$$

onde u_3' refere-se à flutuação da velocidade longitudinal.

A condição de entrada para a pressão não é definida, pois no acoplamento pressão-velocidade PRIME (MALISKA, 2004) as velocidades nas faces não precisam ser corrigidas

e, assim, o gradiente de pressões na face de entrada é nulo (condição de contorno do tipo Neumann de valor nulo). Essa condição de entrada para a pressão é adotada em todas as simulações desenvolvidas com o código computacional desenvolvido no LETE.

As demais faces do domínio são tratadas como saídas de pressão, onde as condições de contorno para a pressão são do tipo Dirichlet (nesse caso com valor nulo). As condições de contorno para as demais quantidades físicas transportadas são do tipo Neumann com valor nulo.

Apesar da Chama D ser estabilizada por uma chama piloto, seus efeitos foram desprezados na simulação do tipo RANS. Desse modo, o perfil da fração de mistura na superfície de entrada do domínio é do tipo *top hat*, sendo que as faces das células que se localizam na saída do jato têm valor unitário e nas demais regiões desta superfície tem valor nulo. Os valores para a variância da fração de mistura foram definidos com interpolações lineares dos dados extraídos de medições experimentais, os quais são fornecidos em Barlow et al. (2005) e Schneider, Dreizler e Janicka (2003).

O modelo de turbulência $k - \varepsilon$ foi usado nas simulações tipo RANS. A primeira simulação (Simulação I) usou as constantes padrão como propostas por Launder e Spalding (1974). Na Simulação II, o valor da constante $C_{2\varepsilon}$ foi alterado de 1,92 para 1,80 segundo o modelo proposto em Hinz, Hassel e Janicka (1999a).

As condições de contorno para a simulação LES são diferentes das usadas para as simulações RANS. As velocidades tanto do jato quando do piloto foram modeladas com um valor médio, sem considerar os perfis mostrados na Figura 9.3. A descrição da turbulência nas condições de contorno para simulações LES é um desafio reconhecido. Neste trabalho, uma condição de contorno baseada em filtros espectrais foi utilizada (mais informações em (GALEAZZO et al., 2013)). Os perfis de velocidade média são então aplicados com flutuações de turbulência sobrepostas.

O modelo de turbulência sub-malha (*subgrid scale model*, SSG) empregado é o modelo de Smagorinsky (1963).

9.1.2 Resultados e Conclusões

Os resultados da simulação da Chama D com o código computacional desenvolvido no LETE são apresentados primeiro.

Os resultados das simulações da Chama D com o código desenvolvido neste trabalho foram coletados quando se admitiu a convergência dos resultados, o que ocorreu próximo a 60.000 iterações. A convergência foi admitida quando os valores das quantidades transportadas variaram menos de 0,05% e os resíduos de cálculo dos sistemas lineares foram inferiores a 10^{-5} . A forma de cálculo desses resíduos foi a mesma utilizada em Fukumasu (2010). Essas simulações despenderam aproximadamente 500 horas de simulação em uma máquina SGI® Altix® XE320 com 16 processadores. Em média o passo de tempo de cálculo de ambas as simulações foi da ordem de 10^{-4} .

Os resultados dessa primeira simulação são identificados como “Simulação I”.

Na Figura 9.4, são apresentadas as comparações de resultados de simulações com os dados de medições experimentais do componente axial de velocidade média ao longo da linha de centro da chama. Pode-se notar que os resultados da “Simulação I” se distanciam da curva experimental a partir de uma distância de 20 diâmetros do bocal de injeção da mistura. Esse afastamento também pode ser identificado na Figura 9.5, que apresenta comparações entre resultados simulados e dados de medições experimentais da fração de mistura média ao longo da linha de centro da chama. Entretanto, boa aproximação pode ser notada em distâncias inferiores a 20 D .

As discrepâncias observadas na Figura 9.5 podem ser verificadas também na Figura 9.6, que apresenta os perfis radiais da fração de mistura média em três seções transversais da chama. As seções transversais localizaram-se a distâncias de 15, 30 e 45 diâmetros do bocal de injeção da mistura. É válido ressaltar que comparações entre dados experimentais e resultados de simulações de perfis radiais não foram realizadas para o componente axial da velocidade média por não terem sido encontrados na literatura dados experimentais desses perfis.

Na Figura 9.6 é claramente observável que nas proximidades do bocal de injeção da mistura boa aproximação em relação aos dados experimentais foi alcançada pelo mo-

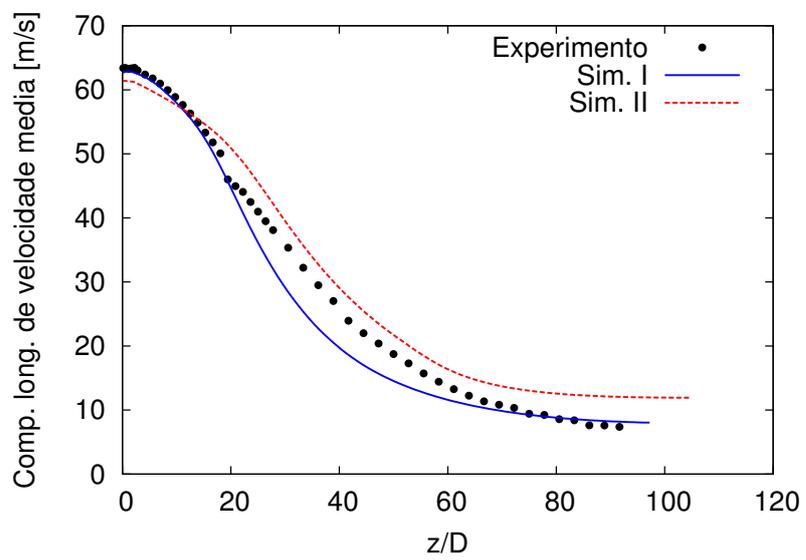


Figura 9.4 – Comparação entre os resultados das simulações corrigidas e os dados experimentais da componente axial da velocidade.

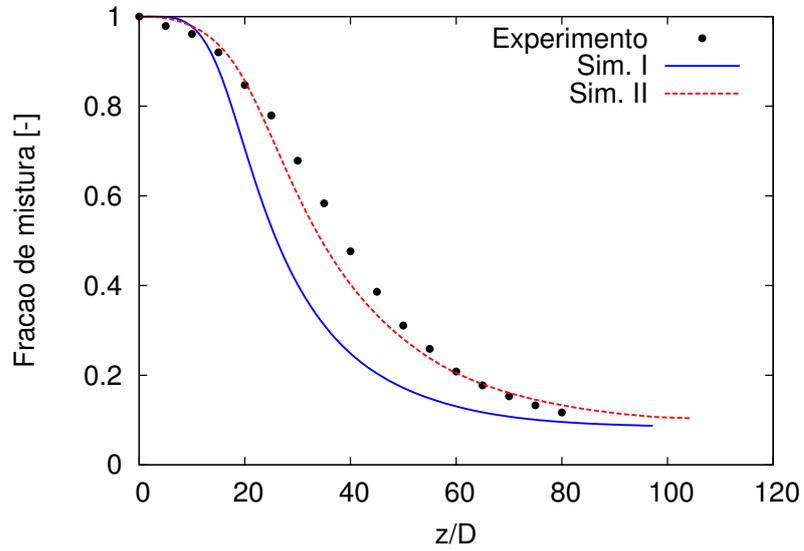


Figura 9.5 – Comparação entre os resultados das simulações corrigidas e os dados experimentais da fração de mistura.

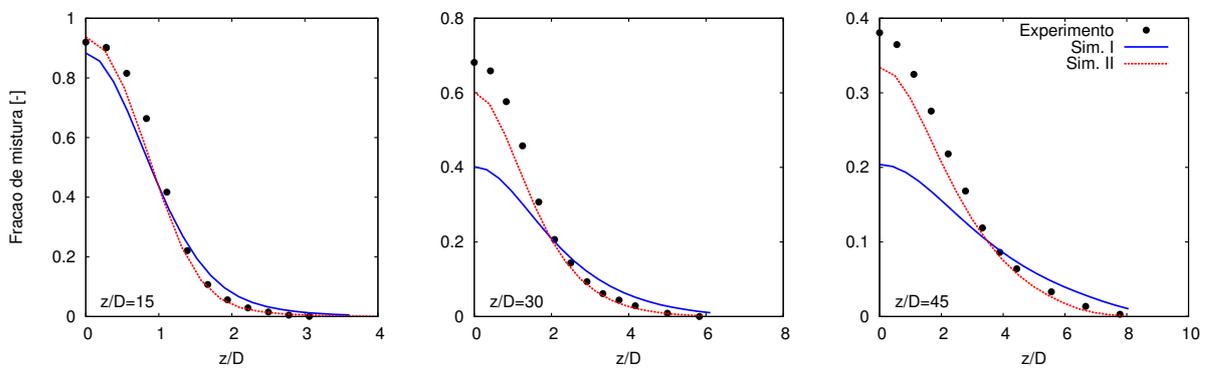


Figura 9.6 – Perfis radiais de fração de mistura média das simulações corrigidas.

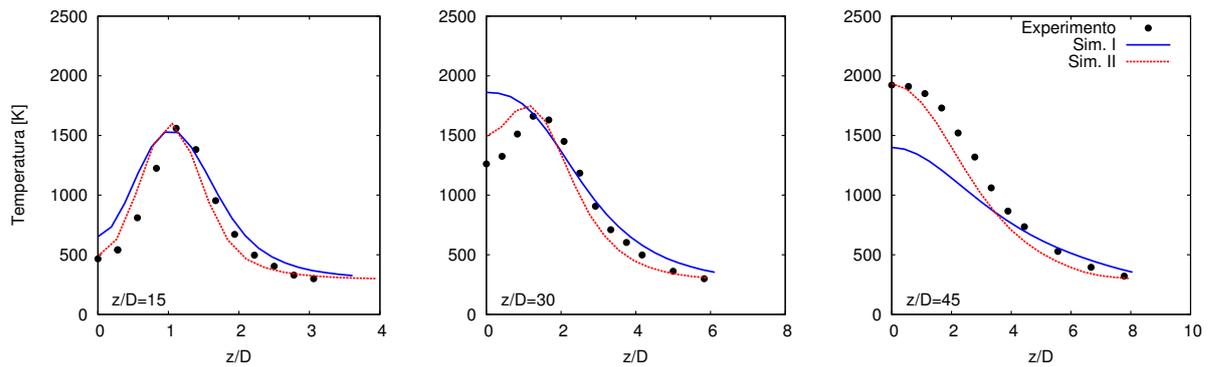


Figura 9.7 – Perfis radiais de temperatura média das simulações corrigidas.

delo. Entretanto, a distâncias maiores a diferença entre os resultados da “Simulação I” e os dados experimentais foi crescente, o que é coerente com os resultados observados ao longo da linha de centro da chama. Ainda desses perfis radiais, pode ser verificado que as maiores discrepâncias são encontradas nas proximidades da linha de centro da chama, sendo que boas aproximações foram encontradas para maiores distâncias da linha de centro.

A Figura 9.7 apresenta os perfis radiais de temperatura média nas mesmas seções transversais em que foram apresentados os perfis radiais de fração de mistura média, na Figura 9.6. Ao relacionar essas duas últimas figuras e, tendo em vista que a fração de mistura estequiométrica da reação da Chama D é de aproximadamente 0,35, pode-se notar a forte correlação entre a fração de mistura média e o campo de temperatura média. Essa constatação pode ser verificada observando a localização dos pontos de maior temperatura na Figura 9.7, que coincidem com os de fração de mistura estequiométrica.

Ao analisar esse conjunto de resultados, verifica-se que as quantidades transportadas no escoamento (componente axial de velocidade e fração de mistura) apresentaram valores inferiores aos observados experimentalmente, a partir de certa distância longitudinal do bocal de injeção de mistura. Esse comportamento mostra que, a partir de certa distância do bocal de injeção, a simulação superestimou os efeitos difusivos do escoamento.

Dentre as eventuais fontes da difusão superestimada, duas foram selecionadas para serem estudadas: difusão numérica e turbulência superestimada. A difusão numérica foi escolhida pelo fato de a “Simulação I” ter sido realizada com o esquema de discretização

dos termos advectivos das equações de transporte do tipo *upwind* de primeira ordem, que como discutido em Versteeg e Malalasekera (2007) e Maliska (2004), introduz difusão numérica na solução do escoamento. A turbulência superestimada foi selecionada pelo fato de o modelo $k - \varepsilon$ superestimar a difusão turbulenta, como mencionado por Hinz, Hassel e Janicka (1999a).

Os resultados comparativos entre esquemas de discretização e malhas podem ser encontrados no trabalho de Sacomano-Filho (2011).

Para investigar a eventualidade da difusão numérica foi feita a substituição da forma de discretização dos termos advectivos da equação de transporte da fração de mistura média para o esquema *upwind* de 2ª ordem. O fato de apenas essa equação ter sido alterada, enquanto as outras continuaram com o esquema de discretização do tipo *upwind* de 1ª ordem, foi pelo fato de não ter sido possível a obtenção de uma solução estável ao aplicar o esquema de 2ª ordem nas demais equações de transporte. Além disso, a fração de mistura média apresenta gradientes elevados nas proximidades do bocal de injeção de mistura, o que segundo Versteeg e Malalasekera (2007) intensifica a difusão numérica. Nesse sentido, as influências da difusão numérica foram avaliadas apenas pela equação de transporte da fração de mistura média. Os resultados de Sacomano-Filho (2011) mostram que o esquema *upwind* de 2ª ordem apresentou um deslocamento sutil em direção aos dados experimentais.

Na investigação da turbulência superestimada os resultados obtidos alteraram-se notadamente em relação aos anteriores. Nesta etapa de investigação das eventuais fontes da difusão superestimada foi feita a alteração do valor do parâmetro $C_{2\varepsilon}$ de 1,92 para 1,80 segundo o modelo proposto em Hinz, Hassel e Janicka (1999a), que procurou reduzir a difusão superestimada na simulação de jatos circulares com o modelo $k - \varepsilon$. Como pode ser notado nas figuras que comparam os valores da fração de mistura média, houve grande aproximação entre os resultados das simulações e os dados experimentais. Na Figura 9.4 pode ser observado que o componente axial de velocidade foi superestimado por essa alteração. Essas discrepâncias observadas na comparação entre os perfis de velocidade ao longo da linha de centro foram atribuídas ao acoplamento entre as equações de transporte da quantidade de movimento linear média e a fração de mistura média. Certamente, a

grande aproximação observada pela fração de mistura e as discrepâncias observadas pela velocidade média mostram que ainda há deficiências no modelo do caso “Simulação II”. Entretanto, pode-se concluir que a turbulência superestimada foi a principal fonte da difusão superestimada observada nas simulações realizadas com os valores padrões dos parâmetros das equações de transporte de k e de ε .

A equação de ε , segundo mencionado em Pope (2000a), é melhor interpretada como uma equação empírica associada à taxa de transferência de energia cinética turbulenta na cascata de energia turbulenta. Dessa forma, os valores de seus parâmetros, inclusive o $C_{2\varepsilon}$, devem ser definidos de acordo com observações experimentais. Tendo em vista que a dissipação da turbulência comporta-se de forma distinta em escoamentos diferentes, parâmetros gerais para a equação de ε sempre inserem uma discrepância entre a dissipação de energia cinética turbulenta do escoamento estudado e o escoamento em que os parâmetros da equação generalista foram ajustados. Entretanto, como observado em Pope (1978), a discrepância associada ao decaimento superestimado da turbulência relaciona-se à anomalia de jatos circulares livres. Neste último trabalho foram apresentadas outras formas de se corrigir essa anomalia alterando os valores dos parâmetros da equação de ε , as quais foram criticadas pela falta de generalidade de aplicação. Assim, Pope (1978) apresentou uma forma genérica para a correção deste problema introduzindo um termo associado ao estiramento de vórtices na equação de ε , em que boas aproximações de jatos foram obtidas para o cálculo de jatos circulares em malhas bidimensionais axi-simétricas. Entretanto, tendo em vista a aplicação mais acessível do modelo de turbulência, a alteração do valor parâmetro $C_{2\varepsilon}$ de 1,92 para 1,80 foi adotada para as simulações aqui apresentadas, considerando-se que apenas simulações de jatos circulares livres foram realizadas. A simulação com a alteração do parâmetro $C_{2\varepsilon}$ exigiu a aplicando-se o esquema de discretização dos termos advectivos das equações de transporte do tipo TVD/SUPERBEE. Os resultados dessa simulação são identificados como “Simulação II” nas figuras desta seção. A Figura 9.8 apresenta os resultados obtidos com essa simulação para os campos das quantidades médias: componente axial de velocidade, fração de mistura e temperatura.

Ao observar os resultados dos perfis de temperatura (Figura 9.7) nas seções transversais a 15, 30 e 45 diâmetros de distância do bocal de injeção de mistura, nota-se que

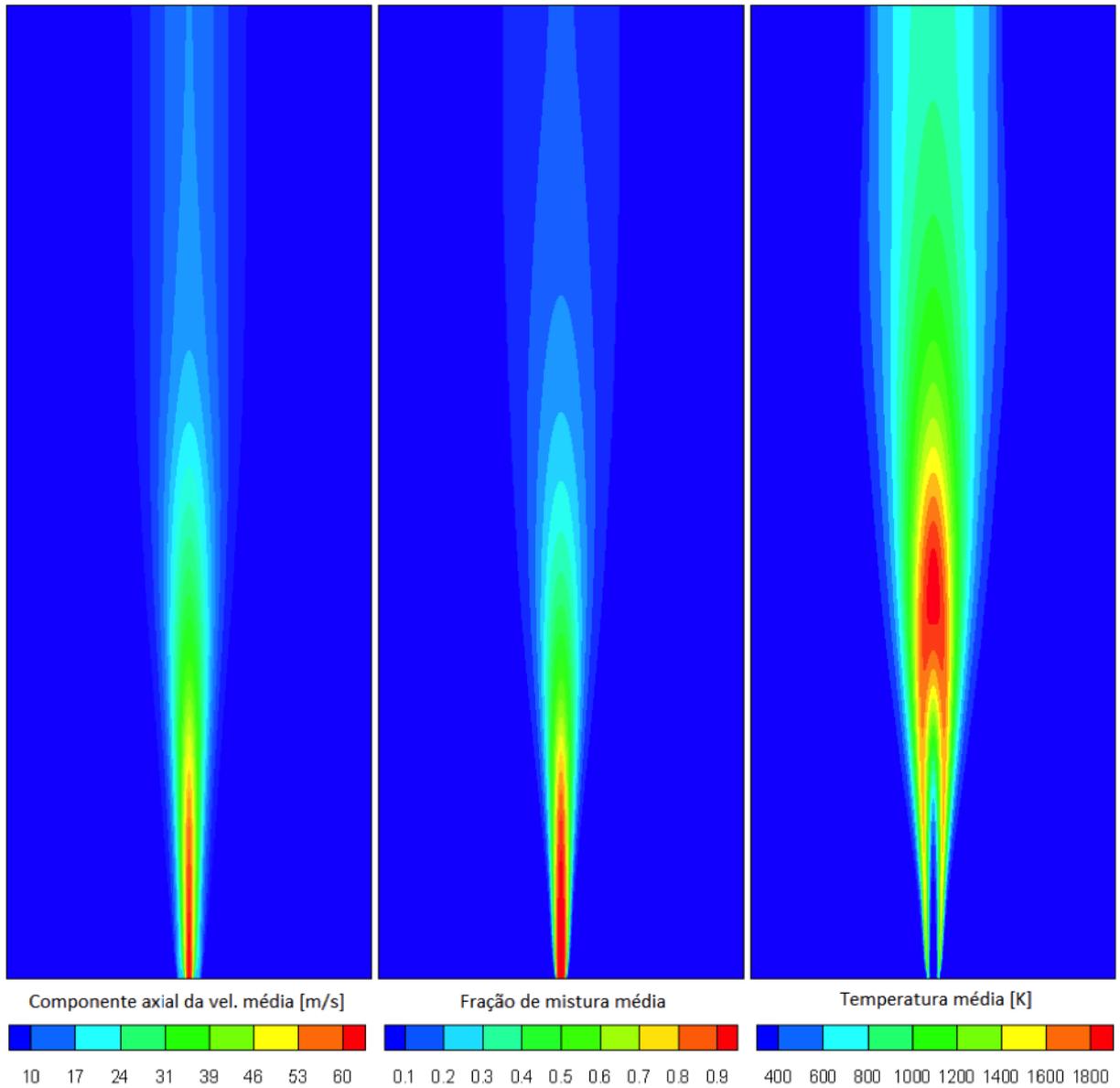


Figura 9.8 – Campos de temperatura, fração de mistura e componente axial de velocidade da "Simulação II".

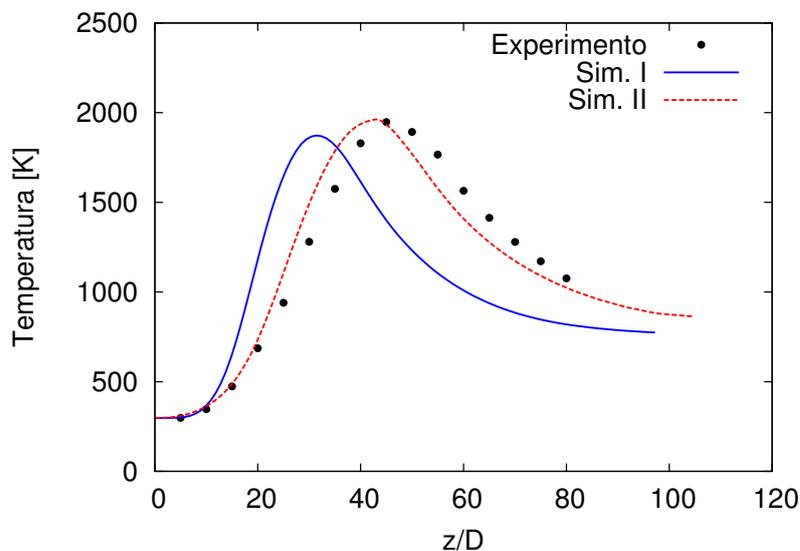


Figura 9.9 – Perfis de temperatura média ao longo da linha de centro da chama.

o modelo de folha de chama superestimou o campo de temperaturas médias. Estas discrepâncias estão associadas com o modelo de combustão, tendo em vista que os perfis de fração de mistura apresentaram boa aproximação entre as simulações correlatas, como mostrado na Figura 9.6. No entanto, ao comparar os resultados da Figura 9.6 com os da Figura 9.7, observa-se forte relação entre os resultados da temperatura com os da fração de mistura. Assim, nota-se que apesar da dependência da variância da fração de mistura na determinação da temperatura, esta está fortemente correlacionada com a fração de mistura. A Figura 9.9 apresenta os perfis da temperatura média ao longo da linha de centro da chama para as simulações da Chama D. Nota-se claramente que a alteração no modelo de turbulência apresentou resultados mais próximos dos dados experimentais.

Os resultados da simulação do tipo LES estão apresentados a seguir. Os valores médios das variáveis foram calculados em 0,3 segundos de simulação, o equivalente a 117.000 passos de tempo de 2.5×10^{-6} segundos. A simulação foi realizada em um total de 32 processadores do cluster SGI® Altix® XE320 em 3 dias.

Na Figura 9.10 são apresentadas os resultados da simulação LES com os dados

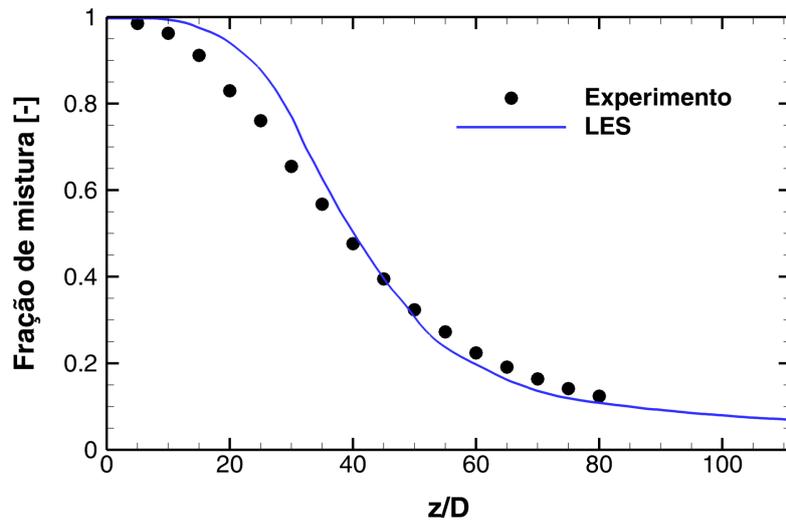


Figura 9.10 – Comparação entre os resultados da simulação LES com os dados experimentais da fração de mistura.

Figura 9.11 – Comparação entre os resultados da simulação LES com os dados experimentais da temperatura.

experimentais da fração de mistura média ao longo da linha de centro da chama. Pode-se notar que $x/D = 40$ a fração de mistura da simulação permanece maior que a experimental. Isso é consequência de ter se usado o valor médio da velocidade como condição de contorno do jato, ao invés do perfil mostrado na Figura 9.3. Em futuras simulações o perfil correto será utilizado, e se espera que o escoamento do jato misture-se mais vigorosamente com o ambiente, o que também irá contribuir para que o valor da fração de mistura seja menor. No final da chama, a partir de $x/D = 40$, os valores simulados ficam muito próximos dos valores experimentais.

O perfil da temperatura média pode ser visto na Figura 9.11 tanto para a simulação LES quanto para o experimento. O acordo das duas curvas é muito bom, principalmente na região de maior temperatura, o que mostra que o modelo JPDF consegue prever as temperaturas de combustão com boa precisão.

Na Figura 9.12 podem ser vistos os campos de velocidade axial, fração de mistura e temperatura de uma realização da simulação LES. O escoamento é claramente turbu-

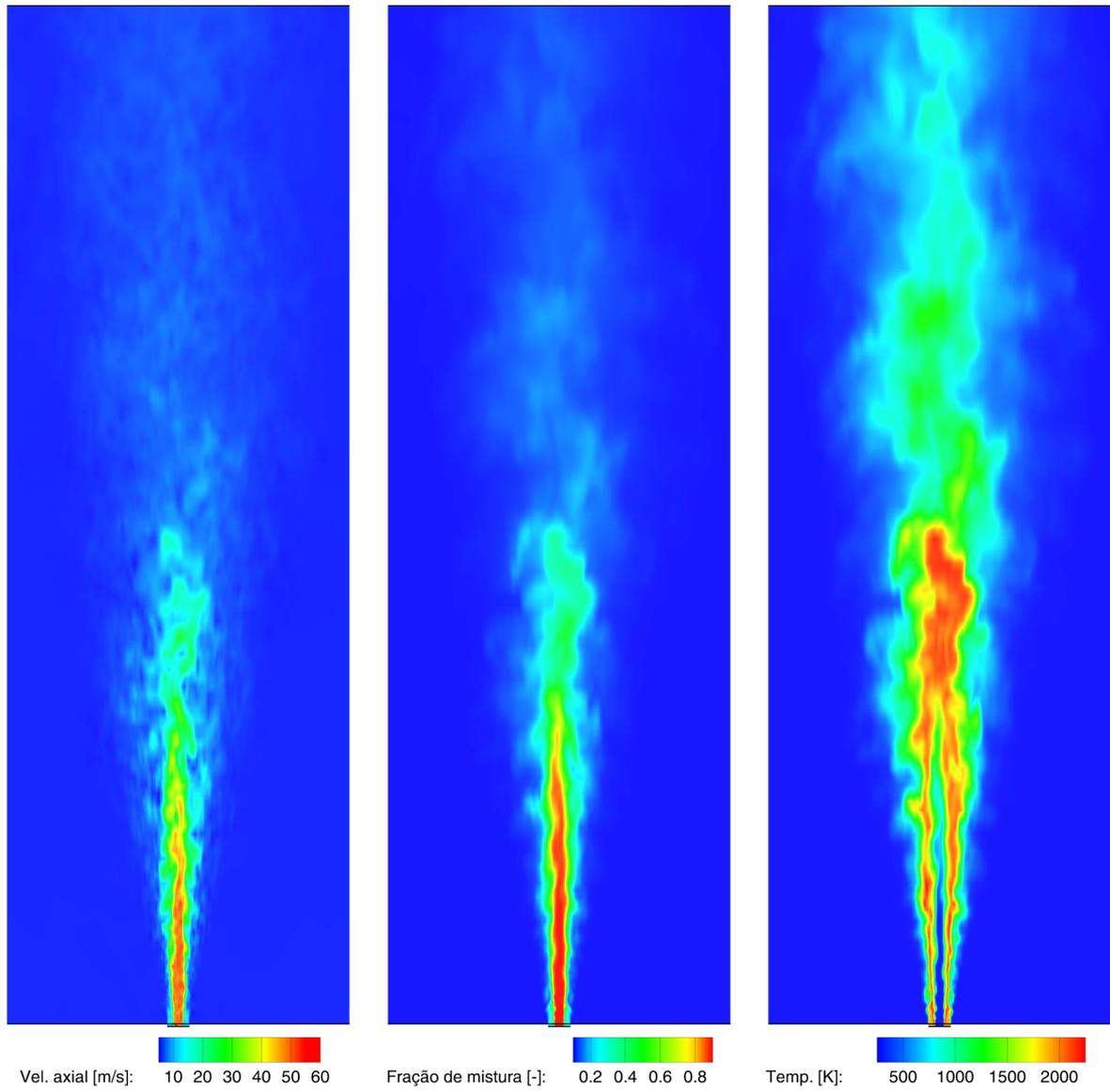


Figura 9.12 – Campos de velocidade axial, fração de mistura e temperatura de uma realização da simulação LES.

lento. Pode-se perceber a frente de chama, e como ela é espessa, observando-se o campo de temperatura.

9.2 Aplicação do Modelo de Combustão Turbulenta em Chama de Spray de Etanol

A modelagem de combustão turbulenta gasosa é vista como uma atividade de complexidade elevada, pelo forte acoplamento da turbulência com os mecanismos de reação química. Este acoplamento existe devido ao fato de que as escalas de tempo e comprimento das reações químicas e de turbulência são próximas. Adicionalmente, a complexidade do problema acoplado aumenta devido à grande variação entre as menores e as maiores escalas representativas dos fenômenos físicos. Tanto o estudo da turbulência como da combustão são um desafio para físicos, engenheiros e matemáticos. Na modelagem de chamas turbulentas de spray a complexidade é intensificada, pois, além dos fenômenos já observados nas chamas gasosas, as chamas com spray apresentam as particularidades de escoamentos bifásicos.

9.2.1 Dados Experimentais

Interessado em estudar os modos de combustão que predominam na iminência da ocorrência de *blow-off* em chamas com spray, Masri e Gounder (2009) apresentaram dados experimentais detalhados de chamas turbulentas de spray de etanol e acetona. Estes autores utilizaram um combustor semelhante, se não igual ao de Gounder, Starner e Masri (2005). O estudo desenvolvido por esses autores também teve o objetivo de fornecer dados detalhados para servir de base de comparação para validações de modelos físicos de processos de combustão de sprays. Nesse sentido, foram apresentadas medições de temperatura média da fase gasosa, distribuição radial da componente axial de velocidade média e de flutuações turbulentas de velocidade, como também, distribuição radial do tamanho das gotículas. O nível de detalhamento dos dados publicados foi o principal motivo para a utilização desta base de comparação para os resultados das simulações

aqui apresentadas. Assim, a seguir é apresentada a descrição do aparato experimental utilizado, como também, os resultados obtidos pelos autores dessas medições.

Um esquema do combustor utilizado por Masri e Gounder (2009) é mostrado na Figura 9.13. O injetor por onde as gotículas são lançadas tem 10,5 mm de diâmetro interno, o qual é envolto por uma chama piloto anular localizada 7 mm a montante do plano de saída. Uma entrada de ar auxiliar, com fluxo paralelo à chama, de 104 mm de diâmetro envolve o bocal e a chama piloto fornecendo uma velocidade constante de 4,5 m/s com baixa intensidade de turbulência. Todo o combustor é confinado em um túnel de vento vertical com seção transversal quadrada com 290 mm de lado que fornece uma velocidade de 4,5 m/s com baixa intensidade de turbulência. Um atomizador ultrasônico é posicionado a 215 mm a montante do plano de saída do bocal providenciando gotículas com momento linear nulo e um diâmetro médio de Sauter (em inglês *Sauter Mean Diameter* – SMD) de 40 μm . Um fluxo de ar arrasta estas gotículas até a saída do injetor onde a temperatura, velocidade e distribuição de gotas são medidas providenciando as condições de contorno para a modelagem da chama. Entre o plano de saída e o atomizador, parte do spray se evapora resfriando a mistura como um todo.

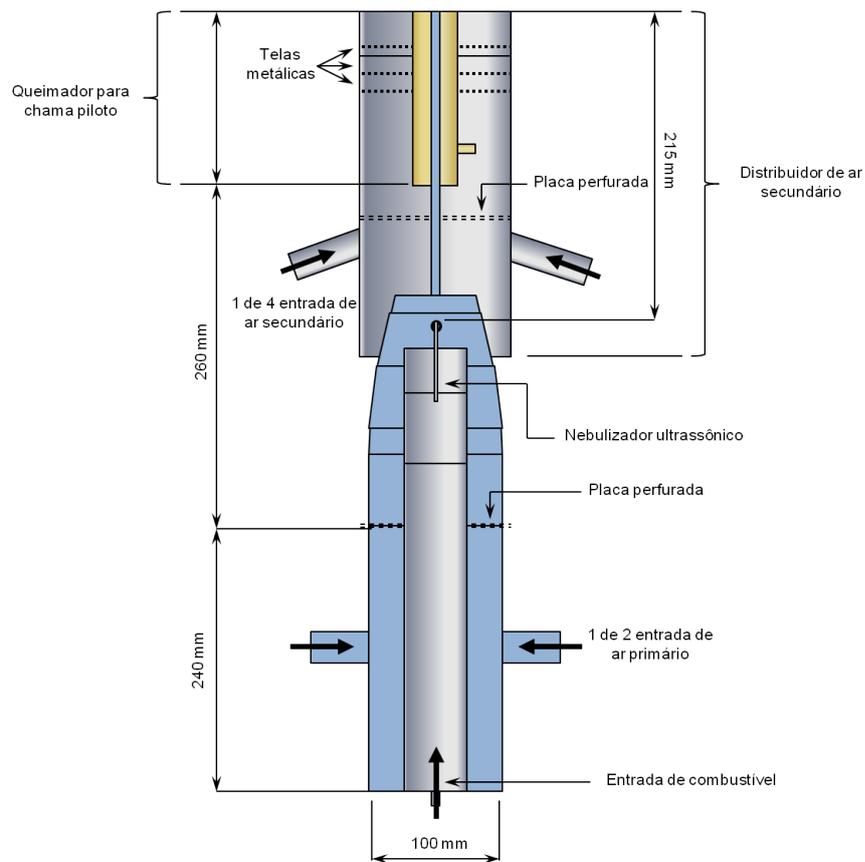


Figura 9.13 – Esquema do combustor usado por Masri e Gounder (2009).

Nos experimentos, a chama piloto foi ajustada com uma mistura estequiométrica de hidrogênio, acetileno e ar com a mesma concentração de átomos de carbono e hidrogênio que a mistura ar-combustível do spray. A mistura da chama piloto foi injetada a uma velocidade de 1,5 m/s no plano de saída das placas perfuradas (a medição dessa velocidade foi feita com a mistura a frio). A massa de combustível líquido injetado no atomizador foi de 45,00 g/min, sendo que apenas 30,71 g/min foram medidos na saída do bocal.

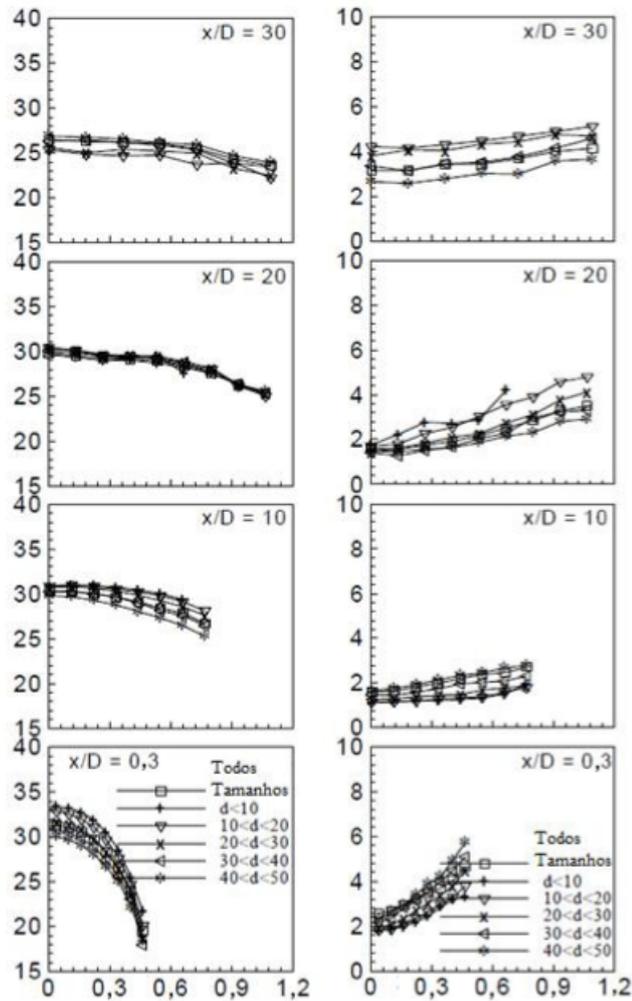


Figura 9.14 – Distribuições de velocidade média axial (esquerda) e flutuações turbulentas de velocidade axial (direita) na direção radial do spray. Extraído de Masri e Gounder (2009).

A partir das medições das componentes axiais de velocidades e de suas flutuações turbulentas podem ser extraídas essas mesmas quantidades para a fase gasosa. Segundo Masri e Gounder (2009), essas grandezas para a fase gasosa equivalem-se as mesmas de gotículas que têm diâmetro menor que $10 \mu\text{m}$, pois gotículas nessas dimensões acompanham o escoamento da fase gasosa. A Figura 9.14 apresenta estes perfis, para quatro posições axiais $x/D = 0,3; 10; 20$ e 30 (D é o diâmetro interno do injetor). Estes dados, como também a distribuição do tamanho de gotas, apresentado a seguir, foram obtidos com um PDA. As distribuições de tamanho de gotas são apresentadas da Figura 9.15 até a Figura 9.18, nos planos axiais de $x/D = 0,3; 10; 20$ e 30 . É importante destacar que as

incertezas de todas as medições realizadas pelos autores do experimento em questão não foram apresentadas em Masri e Gounder (2009).

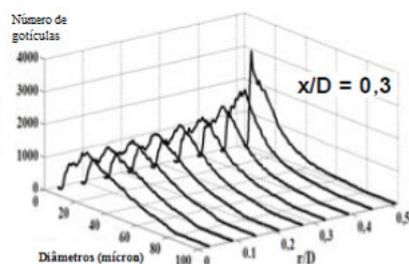


Figura 9.15 – Distribuição de tamanho de gotículas no plano axial x/D 0,3. Extraído de Masri e Gounder (2009).

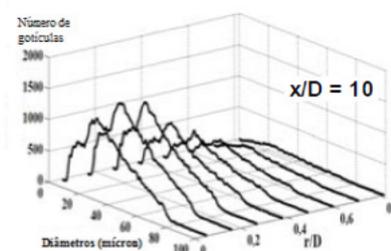


Figura 9.16 – Distribuição de tamanho de gotículas no plano axial x/D 10. Extraído de Masri e Gounder (2009).

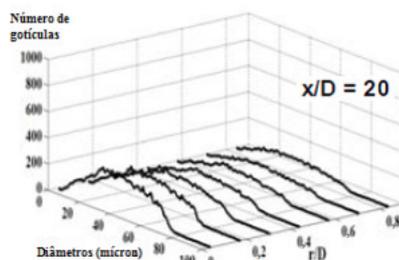


Figura 9.17 – Distribuição de tamanho de gotículas no plano axial x/D 20. Extraído de Masri e Gounder (2009).

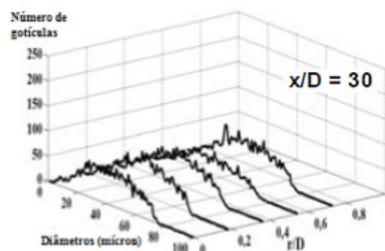


Figura 9.18 – Distribuição de tamanho de gotículas no plano axial x/D 30. Extraído de Masri e Gounder (2009).

Os perfis de temperaturas radiais foram medidos por Masri e Gounder (2009) com a utilização de um termopar do tipo R, sendo estes medidos nos planos de $x/D = 10, 20$ e 30 . Estes perfis são mostrados na Figura 9.26. Os valores obtidos para a temperatura encontram-se em Kelvin, mas devem ser acrescidos do valor de $298,15$ K que é a temperatura de referência.

9.2.2 Malha

Para a realização das simulações da chama de spray foi utilizada uma malha tridimensional, cartesiana, com elementos de tamanho uniforme na região de refino e com

elementos com uma taxa de crescimento linear e uniforme nas demais regiões. O número de elementos utilizados foi de 1.837.000, sendo 626.688 na região de refino com dimensões transversais de $1/16D \times 1/16D$ (nesse caso D tem o valor de 10,5 mm) e alturas variando de $1/16D$ até dimensões maiores devido a região de crescimento linear. A distribuição dos elementos na seção transversal é semelhante para as quatro laterais, sendo: 48 elementos na região de refino com lado de $1/16D$ e 15 elementos em cada região de crescimento linear uniforme com uma razão de 1,3 e lado inicial de $1/16D$. Na direção longitudinal, os primeiros 272 elementos possuem altura uniforme de $0,17D$ e a região de crescimento linear uniforme tem uma razão de 1,12 com lado inicial de $0,17D$. As dimensões do domínio computacional foram $37D \times 37D \times 97D$. A Figura 9.19 apresenta a vista de topo e lateral da malha utilizada.

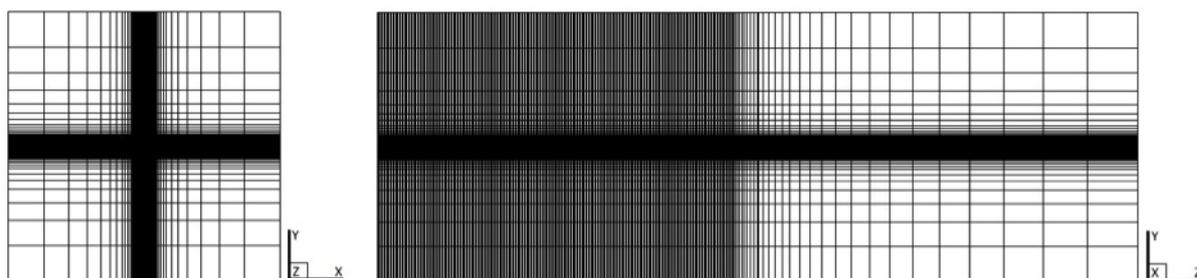


Figura 9.19 – Malha utilizada para a simulação de sprays.

9.2.3 Condições de Contorno

As condições de contorno utilizadas nessa seção são semelhantes às que foram utilizadas nas simulações com a Chama D nas laterais e saída do domínio de cálculo. Na região de entrada, as condições de contorno foram extraídas dos dados experimentais da chama de spray.

As velocidades na região de entrada foram interpoladas linearmente a partir da distribuição dos dados experimentais apresentados na Figura 9.20. É válido ressaltar que as condições de contorno para as velocidades apenas compreenderam o componente axial da velocidade média, tanto para a fase gasosa, quanto para a fase líquida. Para os demais componentes de velocidade, foi definido valor nulo na região de entrada.

Os valores da energia cinética turbulenta foram calculados das flutuações de ve-

locidade medidas experimentalmente (apresentadas na Figura 9.20) com a Equação 9.1. Para ε a mesma formulação utilizada na Chama D foi utilizada, ou seja, a partir dos valores calculados para a energia cinética turbulenta desta chama de spray, a Equação 9.2 foi utilizada para calcular ε .

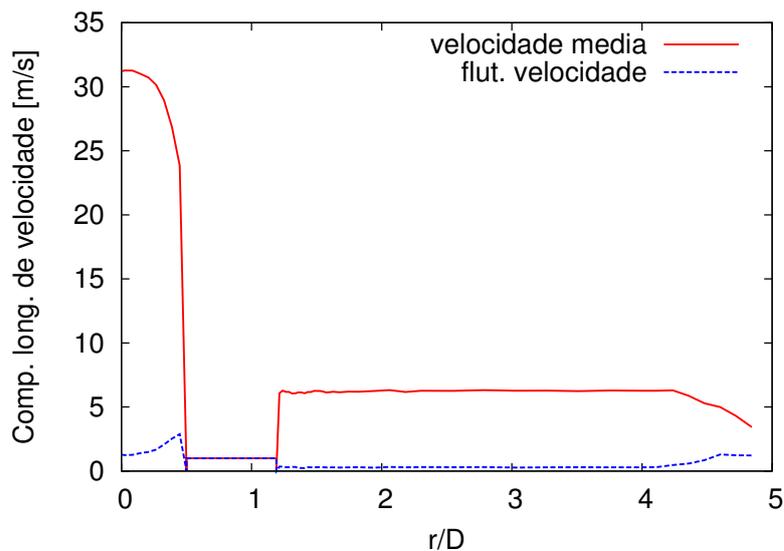


Figura 9.20 – Distribuição de velocidade média axial e de flutuação turbulenta axial de velocidade da chama turbulenta de spray de etanol. Adaptado de Masri e Gounder (2009).

A fração de mistura teve como condição de contorno uma distribuição tipo “*top hat*” com valor de 0,12 na região do bocal de injeção do spray e valor nulo nas regiões da chama piloto e da entrada de ar auxiliar. O cálculo das condições de contorno para a variância da fração de mistura foi definido através da Equação 9.3 devido à ausência de medições experimentais dessa quantidade. A Equação 9.3 corresponde ao valor limitante da variância da fração de mistura. Tendo em vista a que a fração de mistura só não é nula na região do bocal, a sua variância também teve a distribuição “*top hat*” na região de entrada do domínio com o valor de 0,10 na região do bocal. A condição de contorno para a pressão na região de entrada foi a mesma utilizada para a Chama D.

$$\widetilde{f^{n2}} = \widetilde{f} (1 - \widetilde{f}) \quad (9.3)$$

A injeção de gotículas no domínio de cálculo foi feita com o uso de um lançador aleatório. Esse lançador utilizou variáveis aleatórias de distribuição uniforme para definir a posição de lançamento e o diâmetro de cada uma das gotículas injetadas no domínio.

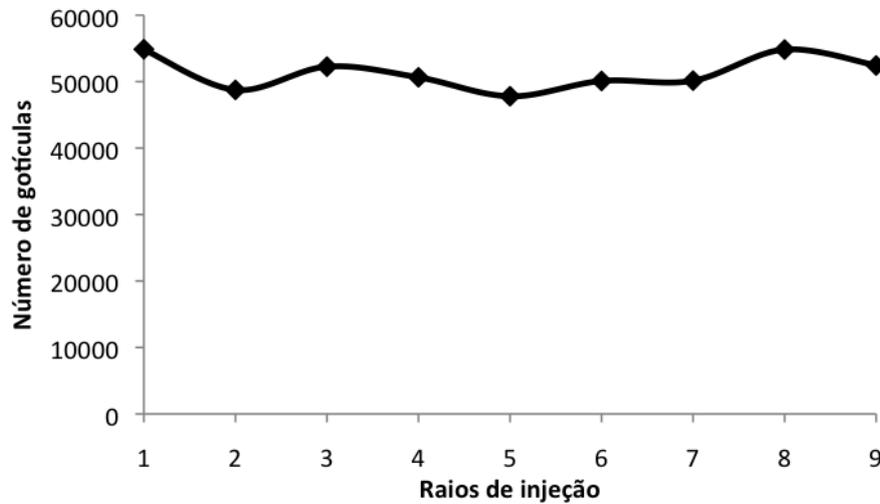


Figura 9.21 – Distribuição de número de gotículas entre as curvas de injeção.

A posição de lançamento das gotículas é definida em coordenadas polares, em que o lançador seleciona um ângulo de lançamento e uma distância radial entre linha de centro do spray e a borda do bocal de injeção. O ângulo de lançamento é selecionado por uma variável aleatória pertencente aos números naturais de 1 a 100 (de distribuição uniforme), que seleciona arcos uniformemente espaçados. Assim, neste trabalho há 100 ângulos de lançamento de gotículas, os quais são uniformemente espaçados em $3,6^\circ$. Os raios de lançamento foram os mesmos definidos nas medições de distribuição de tamanhos de gotículas realizadas em Masri e Gounder (2009), apresentados na Figura 9.15. Dessa forma, nove raios foram definidos para os lançamentos. Porém, para a seleção desses raios foi necessária a determinação do número de gotículas injetadas em cada uma das curvas de distribuição apresentadas na Figura 9.15. Isto é necessário para que o lançador possa reproduzir as mesmas distribuições de número de gotículas medidas experimentalmente. Assim, foi determinada a distribuição de número de gotículas apresentada na Figura 9.21.

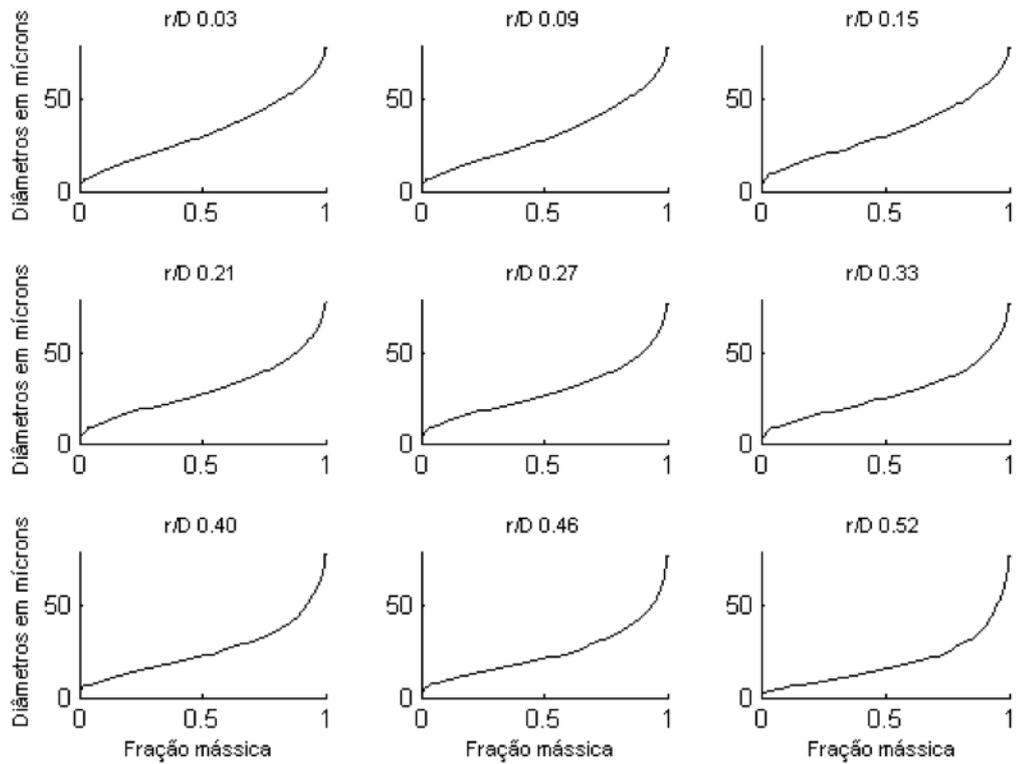


Figura 9.22 – Relação entre os valores de diâmetros de gotículas e as suas frações mássicas para cada um dos nove raios de injeção.

Após a definição da posição de lançamento, o algoritmo determina o diâmetro e a velocidade da gotícula. A determinação do diâmetro foi feita aleatoriamente seguindo as curvas de distribuição de tamanhos, Figura 9.15, associadas aos raios de lançamento. Adicionalmente, foi necessária a definição de curvas que relacionam o diâmetro de gotículas com sua respectiva fração mássica acumulada proveniente das distribuições apresentadas na Figura 9.15. As curvas de frações mássicas acumuladas são semelhantes às necessárias para a obtenção de funções de distribuição de Rosin-Rammler (KUO, 1986). As curvas obtidas para o desenvolvimento do presente estudo são apresentadas na Figura 9.22 para cada uma das curvas de injeção apresentadas na Figura 9.15.

Após a obtenção das curvas de fração mássica acumulada, o algoritmo de lançamento utiliza uma variável aleatória uniformemente distribuída, com valores entre 0 e 1, para representar a fração mássica acumulada. Desse modo, com as curvas apresentadas na Figura 9.22, a fração mássica acumulada aleatória determina os diâmetros da gotícula a ser

lançada obedecendo às curvas de distribuição obtidas experimentalmente. A Figura 9.23 apresenta uma comparação entre as distribuições de tamanhos de gotícula que resultaram deste procedimento de cálculo e as obtidas experimentalmente.

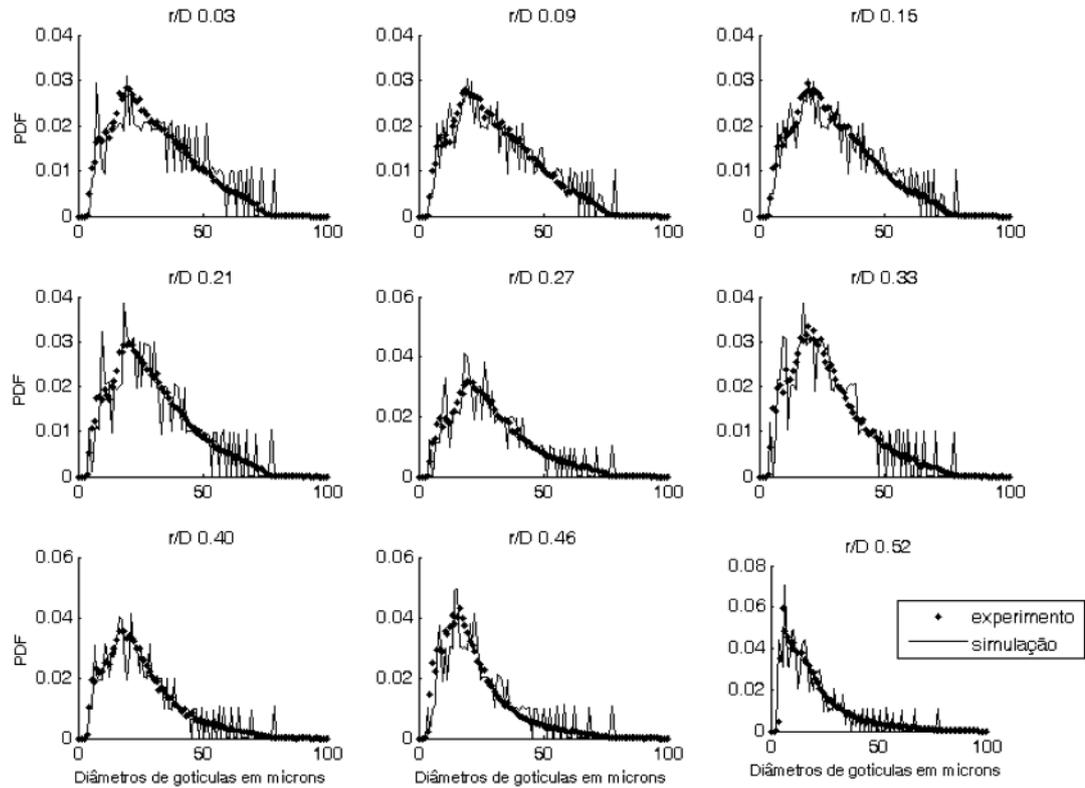


Figura 9.23 – Distribuições de tamanho de gotículas injetadas no domínio de cálculo em cada um dos nove raios de injeção.

De acordo com o diâmetro e a posição de lançamento de cada gotícula, Masri e Gounder (2009) apresentam um valor do componente axial de velocidade média. Como pode ser verificado na Figura 9.14, para a posição axial $x/D = 0,3$, sendo que este valor foi então atribuído como velocidade inicial da gotícula.

No algoritmo de lançamento, o número de gotículas lançadas em cada intervalo de tempo de cálculo da fase gasosa é o suficiente para que a massa de líquida injetada corresponda à massa injetada experimentalmente neste mesmo intervalo de tempo. Assim, de acordo com os intervalos de tempo de cálculo utilizados nas simulações realizadas neste estudo, que serão apresentados na próxima seção, o número de gotículas lançadas em cada

passo de tempo foi de aproximadamente 500.

A condição inicial de temperatura das gotículas foi de 298,15K, sendo que a distribuição dessa temperatura no interior da gotícula é uniforme, tendo em vista o modelo de condutividade infinita utilizado (item ??).

9.2.4 Resultados e Discussões

Os resultados e discussões das simulações da chama turbulenta de spray de etanol são apresentados nesta seção.

Os ajustes e correções estudados na parte de validação com a aplicação da Chama D foram adotados nas simulações da chama de spray. Nesse sentido, a alteração do valor do parâmetro $C_{2\varepsilon}$ de 1,92 para 1,80 foi feita no código utilizado nas simulações da chama de spray.

Os resultados das duas simulações foram coletados quando se admitiu suas respectivas convergências, o que ocorreu próximo a 65.000 iterações. Como mencionado por Chrigui M. et al. (2010), não há uma forma universal para se selecionar um critério de convergência em casos de acoplamento de métodos do tipo Euler-Lagrange. Comumente admite-se a convergência quando as propriedades da mistura não variam consideravelmente de uma iteração a outra. Portanto, neste estudo, a convergência para os casos de simulações de chamas de spray foi admitida quando a solução das quantidades variou menos de 0,05% e os resíduos de cálculo dos sistemas lineares foram inferiores a 10^{-5} . A forma de cálculo desses resíduos é a mesma que foi utilizada em Fukumasu (2010).

A solução da “Simulação I” despendeu aproximadamente 1000 horas de simulação em uma máquina SGI® Altix® XE320 com 16 processadores. Em média o passo de tempo de cálculo de ambas as simulações foi da ordem de 10^{-5} .

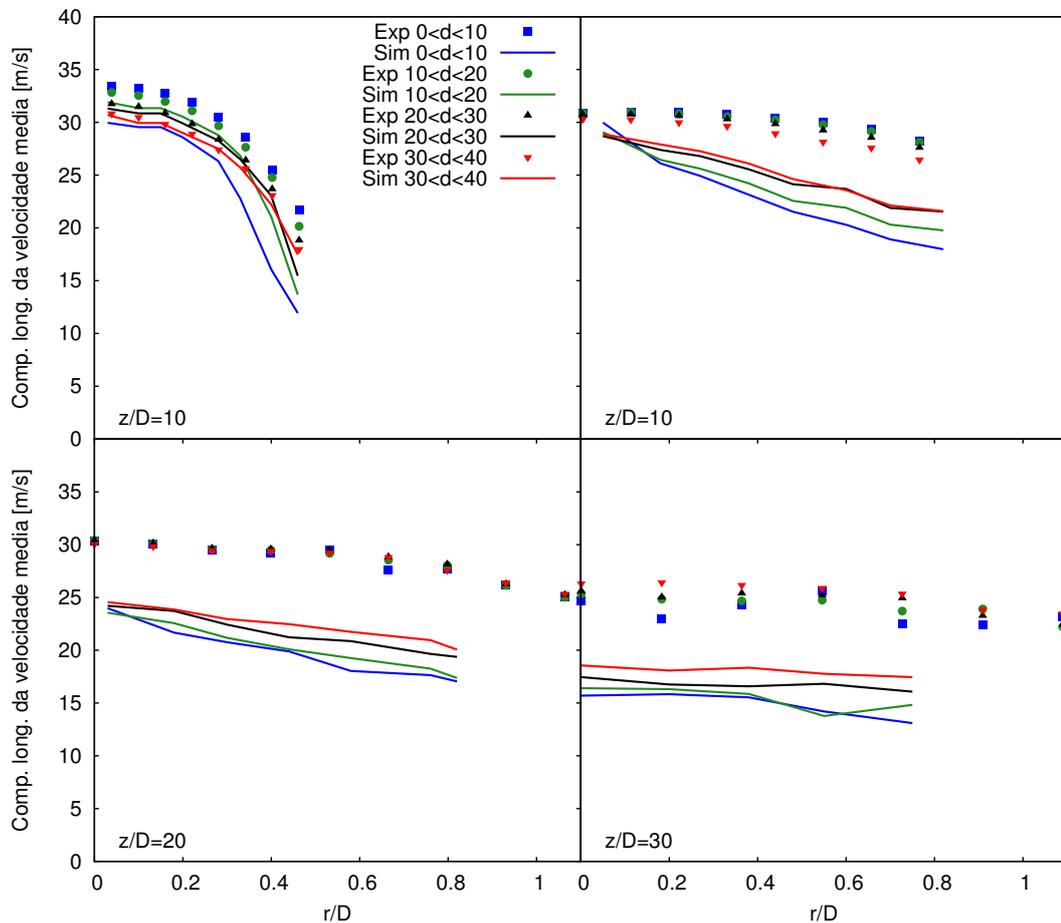


Figura 9.24 – Comparação dos resultados do componente axial da velocidade média das gotículas obtidos na “Simulação I” com dados experimentais.

A Figura 9.24 apresenta a comparação dos resultados do componente axial de velocidade média de cinco faixas de diâmetros de gotículas da “Simulação I” com os dados experimentais em quatro seções transversais, distanciadas do bocal de injeção do spray em $0,3D$, $10D$, $20D$ e $30D$. A partir dessa figura, nota-se que as maiores discrepâncias entre os resultados foram mostradas pelas gotículas de menor diâmetro.

Nas proximidades do bocal de injeção as gotículas de maiores diâmetros apresen-

tam aproximação razoável dos dados experimentais. Entretanto, pode ser observado que as discrepâncias entre os resultados da simulação com os dados experimentais crescem conforme a distância à seção transversal do bocal cresce. Nas seções transversais distantes a $0,3D$ e $10D$ do bocal verifica-se que as diferenças entre velocidade calculadas e as medidas aumentam quando as comparações são feitas a maiores distâncias da linha de centro da chama de spray. Esse comportamento é mais sutil na seção transversal distante em 20 diâmetros do bocal e não percebido na seção mais avançada na chama. Em especial nas comparações realizadas em $z/D = 10$, boa aproximação entre os resultados calculados em comparação com os dados medidos foi obtida nas proximidades da linha de centro da chama para todas faixas de diâmetros de gotículas.

É importante observar que as gotículas de menor tamanho possuem menor tempo de relaxação que gotículas maiores, como apresentado na Equação 8.2. O tempo de relaxação corresponde ao intervalo de tempo que a gotícula leva para que sua velocidade seja a mesma da fase dispersante. Esse parâmetro mostra que as gotículas menores possuem menor inércia quando comparadas as maiores. Assim, gotículas menores tendem a sofrer mais com as ações de forças dinâmicas do escoamento, e, portanto, acabam sendo carregadas pelo escoamento. Isso ocorre com as gotículas de diâmetro menor que $10 \mu\text{m}$, como mencionado por Masri e Gounder (2009). Dessa forma, avaliando apenas os dados experimentais da Figura 9.24, pode-se verificar que, em regiões próximas ao bocal, as velocidades da fase gasosa são maiores que as velocidades das gotículas. Não obstante, o componente axial das velocidades médias de ambas as fases são quase iguais a uma distância de $20D$ do bocal. Ademais, o comportamento observado na região do começo do spray se inverte a uma distância de $30D$ do bocal, onde as gotículas menores têm velocidades menores que as gotículas maiores. Essa estrutura do spray não é observada nas simulações. Na realidade, as gotículas de maior tamanho se mantêm com velocidades mais altas que as de menor tamanho durante todo o escoamento, como mostrado na Figura 9.24, com exceção a região localizada nas proximidades da linha de centro do spray na seção transversal de $z/D = 10$. Esse comportamento observado nos resultados das simulações mostra que as velocidades da fase dispersante foram subestimadas.

A singularidade observada nas proximidades da linha de centro na seção transversal de $z/D = 10$ é explicada por deficiências do modelo de combustão utilizado nessas

simulações. O modelo de folha de chama, conforme apresentado na Seção 3.1, sempre considera a reação completa quando o valor da fração de mistura estequiométrica ocorre. Com o tratamento estatístico das reações turbulentas os valores das quantidades provenientes do modelo de combustão são atenuados com a variância da fração de mistura através da função β -PDF. Entretanto, quando a fração de mistura estequiométrica é atingida no escoamento, valores elevados de temperatura são atingidos, o que pode ser visto na Figura 3.2 e na Figura 3.4, apesar de atenuados pela função β -PDF. Dessa forma, quando as gotículas cruzam a região de temperaturas elevadas nas proximidades do bocal, conforme mostrado na Figura 9.25, elas têm alta taxa de evaporação. Consequentemente, com essa alta taxa de evaporação, muita massa de combustível é injetada na fase gasosa o que acaba por aumentar os valores do termo fonte associado à evaporação da equação de transporte de quantidade de movimento linear (Equação 8.27). Como resultado, o aumento desse termo fonte aumenta as velocidades nessa região, o que gera um núcleo de velocidades elevadas no centro inferior da chama, como pode ser observado na Figura 9.25. Dessa forma, as velocidades elevadas da fase gasosa no núcleo observado na Figura 9.25 aumentam as velocidades das gotículas nessa mesma região, o que pode ser visto na seção transversal $z/D = 10$ da Figura 9.24.

Apesar das baixas velocidades verificadas na simulação, os perfis radiais de temperatura média da fase gasosa mostraram boa aproximação com os dados experimentais a pequenas distâncias do bocal de injeção. Ao observar os resultados apresentados na Figura 9.26, os dois primeiros perfis mostraram que os resultados da simulação tiveram boa aproximação das medições experimentais. No entanto, os resultados apresentaram difusão radial mais pronunciada que os dados das medições, o que é claramente observável com o decaimento suave dos perfis a partir do ponto de maior temperatura. O perfil radial da seção transversal de $z/D = 30$ mostrou maiores discrepâncias que os outros dois perfis. Nesta região, temperaturas mais elevadas foram atingidas nas simulações que nas medições experimentais.

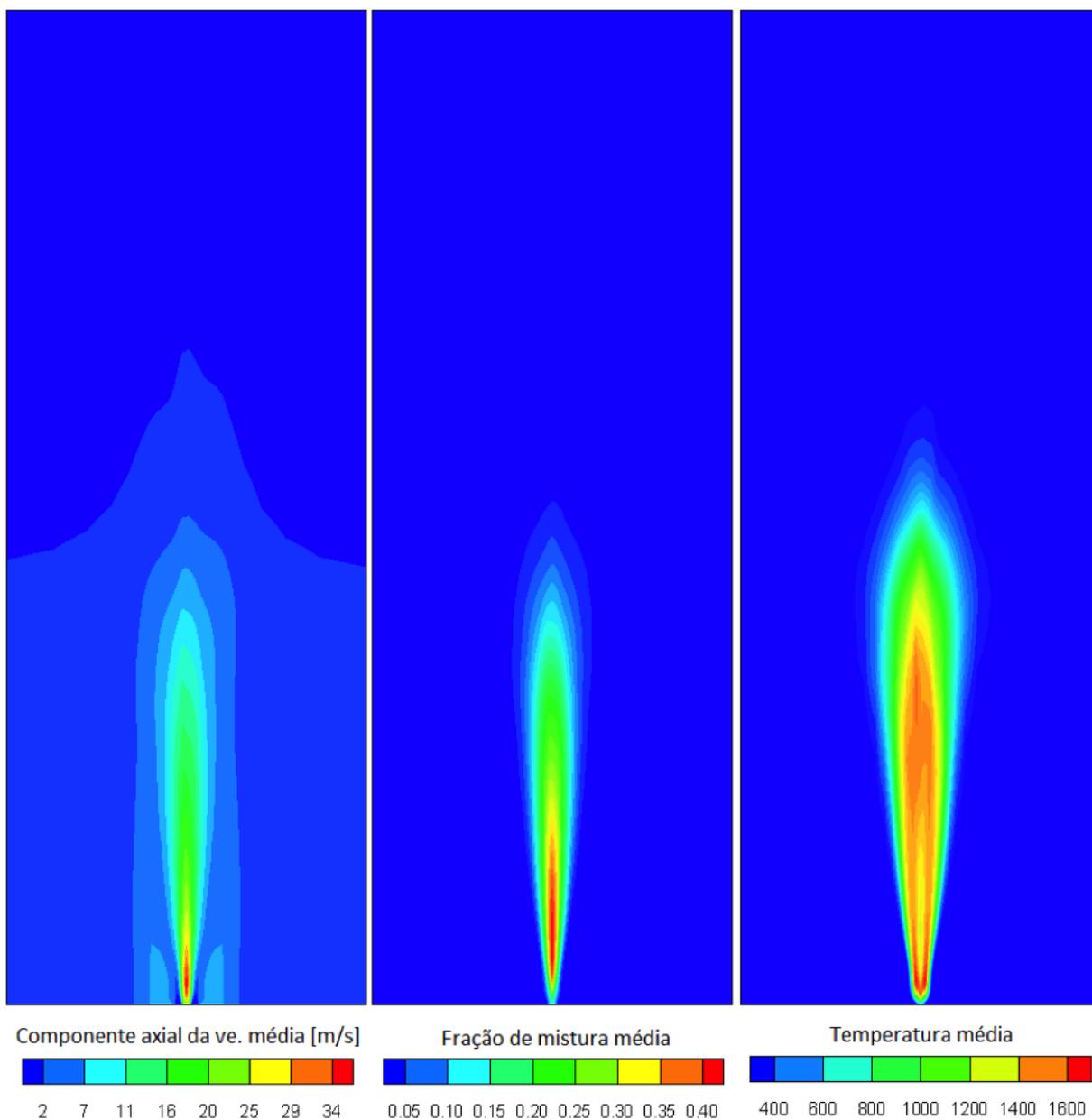


Figura 9.25 – Distribuição das quantidades médias: componente axial de velocidade, fração de mistura e temperatura, no plano central longitudinal do domínio de cálculo.

Os valores superestimados dos perfis radiais do excesso de temperatura média são atribuídos ao modelo de combustão utilizado. Como observado nos perfis radiais de temperatura da Chama D, o modelo de folha de chama superestimou os valores da temperatura média. As boas aproximações para as duas primeiras seções transversais da Figura 9.26 podem ser atribuídas à modelagem do fenômeno de resfriamento evaporativo, considerando que o número de gotículas, e conseqüentemente a taxa de evaporação, é

elevado em regiões mais próximas do bocal. No caso da seção transversal $z/D = 30$ há menos gotículas que nas regiões mais próximas do bocal, tendo em vista que um bom número delas já evaporou, ou mesmo se dispersou pelo escoamento. Dessa forma, os efeitos do resfriamento evaporativo são menos pronunciados nessa região, o que a leva a ter maiores temperaturas. A Figura 9.27 mostra a distribuição do termo fonte de massa no domínio de cálculo o que corrobora o argumento dado às maiores temperaturas observada no perfil de $z/D = 30$. Como pode ser visto nessa figura, a distância de $30D$ do bocal pouca evaporação ocorre em relação aos outros dois planos, tendo em vista que os termos fonte de massa indicam a entrada de combustível proveniente da evaporação das gotículas.

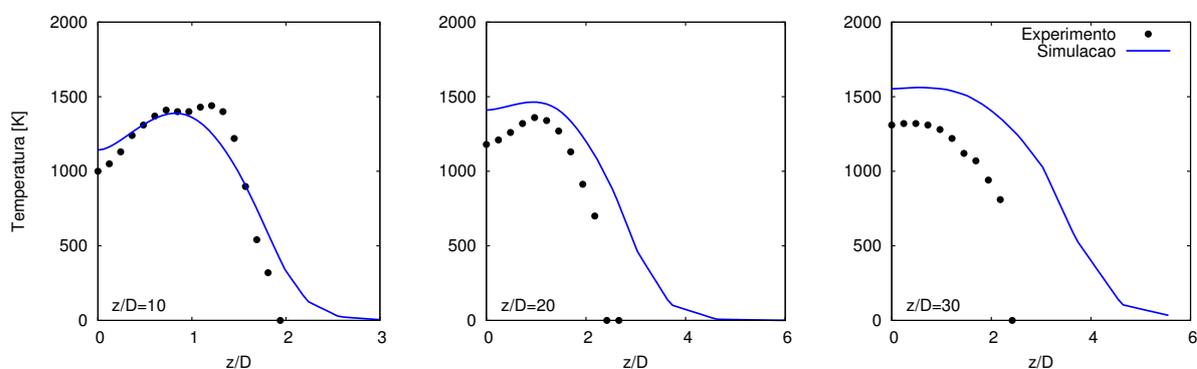


Figura 9.26 – Distribuição radial do excesso de temperatura média da fase gasosa.

Para avaliar a modelagem da evaporação de gotículas foi feita a comparação da distribuição de seus tamanhos calculados nas simulações com os dados medidos experimentalmente. Essas comparações foram realizadas nas mesmas posições das distribuições de tamanhos de gotículas apresentadas ns Figuras 9.15 a 9.18.

Outro fenômeno que pode ter contribuído para as discrepâncias observadas no campo de temperaturas foi a negligência da modelagem da transferência de calor por radiação, o que poderia reduzir as temperaturas superestimadas observadas na Figura 9.26.

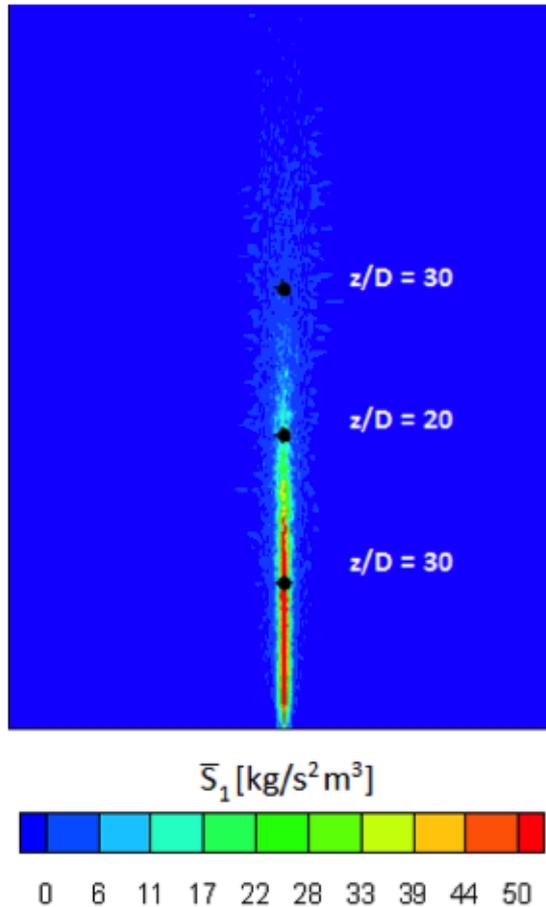


Figura 9.27 – Pontos que indicam distâncias de coleta de resultados sobre o campo do termo fonte de massa.

Ao observar as comparações apresentadas na Figura 9.28, nota-se que boa aproximação foi alcançada pelos resultados das simulações. Algumas discrepâncias são mostradas no ponto $10 z/D$, r/D 0,05, em que a simulação apresentou maior concentração de gotículas de maior tamanho que o experimento. Isso foi atribuído ao fato de essas gotículas terem acabado de sair da região de elevadas temperaturas da região próxima ao bocal, onde a fração de mistura atingiu o seu valor estequiométrico. Os pontos $10 z/D$, r/D 0,71 e $10 z/D$, r/D 0,82 apresentaram um deslocamento em direção às gotículas de menor tamanho. Esse comportamento é justificado por deficiências na dispersão das gotículas. Tendo em vista que um modelo do tipo *random walk* foi utilizado para modelar a dispersão de gotículas, e esse depende da energia cinética turbulenta, pode-se admitir que, na região em questão, a dispersão foi levemente superestimada, resultado que tende a dissipar mais as gotículas que possuem maior inércia (maior tamanho), dos que as que

são carregadas pelo escoamento (menor tamanho). Dessa forma, uma maior concentração de gotículas maiores é encontrada numa distribuição.

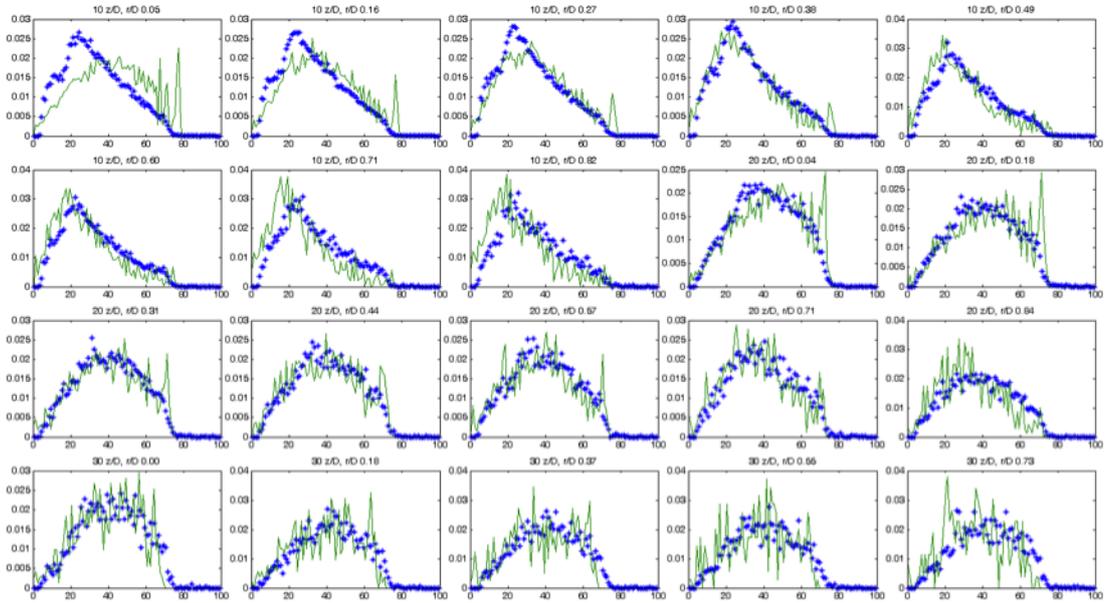


Figura 9.28 – Comparação entre as distribuições de tamanho de gotículas dos resultados calculados na "Simulação I" com os dados experimentais.

Ao observar os resultados da Figura 9.28, nota-se que as discrepâncias observadas nas comparações entre o componente axial de velocidade média não interferiram significativamente no processo de evaporação. Sob este aspecto, ao analisar as equações utilizadas na modelagem da evaporação das gotículas, apresentadas no item ??, pode ser verificado que as influencias da velocidade no modelo de evaporação se dão através da diferença de velocidades entre as fases para o cálculo do Re_e usado no cálculo do Sh na Equação 8.12 e no cálculo do Nu nas Equação 8.14 e 8.17. Ao observar novamente a Figura 9.24 nota-se que, apesar das diferenças entre as magnitudes das velocidades calculadas e medidas, as diferenças relacionados ao escorregamento são baixas. Dessa forma, pode-se concluir que as influências do campo de velocidades no processo de evaporação não foram muito impactantes, o que sugere que o processo de evaporação foi bem modelado.

A magnitude das velocidades da fase gasosa influencia o processo de dispersão das gotículas. Porém como observado na Figura 9.28 a dispersão foi razoavelmente bem

prevista, tendo em vista que boa distribuição de tamanho de gotículas foi alcançada no domínio de cálculo.

As principais justificativas para as discrepâncias observadas nas comparações entre os perfis de velocidade média são atribuídas à modelagem da turbulência e ao baixo refinamento da malha utilizada nos cálculos. Claramente, os resultados apresentados na Figura 9.24 pelas gotículas de menores tamanhos mostram que a difusão da quantidade de movimento linear transportada foi superestimada. Tendo em vista os resultados obtidos na parte de validação, deficiências na modelagem de turbulência quanto na composição da malha de células de cálculo levam a essa difusão superestimada.

A modelagem de escoamentos bifásicos intensifica as dificuldades no cálculo da turbulência da fase dispersante devido ao o acoplamento interfásico desta quantidade. Em Chrigui (2005)) foi apresentada uma revisão bibliográfica sobre os principais modelos de modulação de turbulência e foi concluído que o modelo $k - \varepsilon$ (que é utilizado neste trabalho) superestimou a turbulência. Assim, uma alternativa encontrada foi utilizar o modelo Termodinamicamente Consistente, apresentado nessa mesma referência para melhorar a modelagem da modulação. Contudo, apesar dessa observação sobre o modelo de turbulência, uma das dificuldades encontradas ao longo do desenvolvimento desse trabalho foi definir o parâmetro $C_{3\varepsilon}$. Squires e Eaton (1994) apresentaram uma relação entre esse parâmetro com o tempo de relaxação e a massa de partículas em um volume. No entanto, esses últimos autores mencionaram que, considerando a existência de uma vasta faixa de valores para $C_{3\varepsilon}$, seu valor é normalmente obtido através de ajustes com dados experimentais de ensaios realizados em laboratório. Esses autores também observaram que o parâmetro $C_{2\varepsilon}$, também se altera de acordo com tempo de relaxação e a massa de partículas em um volume. Assim, tendo em vista essas constatações, nota-se que os parâmetros da equação de transporte da dissipação de energia cinética turbulenta tornam-se particulares para cada caso a ser simulado. Isso pode ser verificado com as observações apresentadas em Squires e Eaton (1994), que mostraram que a definição dos parâmetros da equação de transporte de ε dependem de características do escoamento, como a massa de partículas em um volume e a sua distribuição de tamanhos (o que altera a escala de tempo de relaxação das gotículas num dado volume).

Em Sacomano-Filho (2011) é feita também a simulação desta chama de spray de etanol desconsiderando-se o efeito do resfriamento evaporativo sobre a temperatura da fase dispersante. Dois resultados importantes foram observados. Em primeiro lugar, como esperado, observa-se que os perfis de temperatura obtidos sem fenômeno de resfriamento evaporativo superestimam ainda mais os perfis de temperatura obtidos experimentalmente. Em segundo lugar, ocorreu, de forma a princípio não esperada, a redução do comprimento de chama.

Ao observar o comportamento da distribuição do componente axial de velocidade média das gotículas, verificaram-se resultados semelhantes com os dois modelos. Porém, nas maiores distâncias do bocal, as magnitudes das velocidades de gotículas no modelo sem resfriamento evaporativo são inferiores às do modelo com resfriamento evaporativo, o que indica menores velocidade da fase gasosa no escoamento sem resfriamento evaporativo. Essa redução de velocidades permite considerar uma difusão superestimada pela simulação sem resfriamento evaporativo. Esse comportamento está associado ao modelo de modulação de turbulência que foi utilizado nas simulações, o que será discutido logo adiante.

Ao comparar isoladamente as magnitudes de velocidade dos resultados como os dois modelos de resfriamento, nota-se que as gotículas de maior tamanho apresentam pouca diferença de magnitude de velocidade nas duas simulações. Isso mostra que as gotículas de maior tamanho foram pouco influenciadas pelas variações de velocidade da fase gasosa nas distâncias longitudinais do bocal analisadas.

A redução do comprimento da chama é atribuída à negligência da modelagem do fenômeno de resfriamento evaporativo pelo fato de ele intensificar a transferência de massa interfásica, logo na região inicial da chama. Ao desconsiderar o fenômeno de resfriamento evaporativo, temperaturas maiores são encontradas na região inicial da chama, o que conseqüentemente intensifica as taxas de evaporação das gotículas introduzindo mais massa na fase gasosa. Esse aumento na transferência de massa aumenta os efeitos dos termos associados à evaporação das gotículas nas equações de transporte de quantidade de movimento linear e de energia cinética turbulenta da fase gasosa [último termo da Equação 8.27, e últimos dois termos na Equação 8.35, respectivamente]. O aumento nos

valores desses termos fontes aumenta a taxa de produção de energia cinética turbulenta, efeito que ocorre de forma direta pelo aumento de S_k e indiretamente pelo aumento de S_{ui} . De acordo com o termo de produção de energia cinética turbulenta, apresentado em sua equação de transporte (penúltimo termo do lado direito da Equação 4.12), a produção desta quantidade é feita pelos gradientes de velocidade média do escoamento. Dessa forma, os termos fontes mais elevados de massa, que conseqüentemente elevou o termo fonte de quantidade de movimento produziu gradientes de velocidade mais acentuados na simulação sem resfriamento evaporativo, que contribuíram para o aumento de k . O aumento de k , tanto pelo aumento no seu termo fonte, quanto pelo aumento proveniente dos gradientes de velocidade, resultou na viscosidade efetiva ser mais elevada, menores velocidades na fase dispersante e chama mais curta.

Capítulo 10

Referências Bibliográficas

ABRAMZON, B.; SIRIGNANO, W. A. Droplet vaporization model for spray combustion calculations. *Int J. Heat Mass Transfer*, v. 32, n. 9, p. 1605–1618, 1989.

ALMEIDA, Y. P.; LAGE, P. L. C.; SILVA, L. F. L. R. Large eddy simulation of a turbulent diffusion flame including thermal radiation heat transfer. *Applied Thermal Engineering*, n. 0, p. –, 2015. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1359431115001350>>.

ANDRADE, F. O. *Contribuição à Simulação das Grandes Escalas de uma Chama Turbulenta Pré-Misturada Estabilizada em um Escoamento a Alta Velocidade*. Tese (Doutorado) — Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, Brasil, 2009.

ANDRADE, F. O.; SILVA, L. F. Figueira da; MURA, A. Large eddy simulation of turbulent premixed combustion at moderate Damköhler numbers stabilized in a high-speed flow. *Combustion Science and Technology*, v. 183, n. 7, p. 645–664, 2011. Disponível em: <<http://www.tandfonline.com/doi/abs/10.1080/00102202.2010.536600>>.

APTE, S. V.; MAHESH, K.; MOIN, P. Large-eddy simulation of a evaporating spray in a coaxial combustor. In: *Proceedings of the Combustion Institute*. [S.l.: s.n.], 2009. v. 32, p. 2247–2256.

- BARLOW, R.; HINZ, A. Piloted methane / air jet flames (flame d,e,f) comparisons. In: *Proceedings of the Fourth International Workshop on Measurement and Computation of Turbulent Nonpremixed Flames*. Darmstadt, Alemanha: [s.n.], 1999. p. 221.
- BARLOW, R. S.; FRANK, J. H. Effects of turbulence on species mass fractions in methane/air jet flames. In: *Proc. Combust. Inst.* [S.l.: s.n.], 1998. v. 27, p. 1087–1095.
- BARLOW, R. S. et al. Piloted methane/air jet flames: Scalar structure and transport effects. *Combust. Flame*, v. 143, p. 433–449, 2005.
- BILGER, R. A mixture fraction framework for the theory and modeling of droplets and sprays. *Combustion and Flame*, n. 158, p. 191–202, 2011.
- BORGHI, R. Turbulent combustion modelling. *Progress in Energy and Combustion Science*, v. 14, p. 245–292, 1988.
- BRANLEY, N.; JONES, W. P. Large eddy simulation of a turbulent non-premixed flame. *Combustion and Flame*, v. 127, p. 1914–1934, 2001.
- BRUNN, O. et al. Investigation of a combustor using a presumed JPDP reaction model applying radiative heat loss by the Monte Carlo method. In: *Proceedings of the 25th Congress of the International Council of the Aeronautical Sciences (ICAS)*. [S.l.: s.n.], 2006.
- CAETANO, N. R.; SILVA, L. F. Figueira da. A comparative experimental study of turbulent non premixed flames stabilized by a bluff-body burner. *Experimental Thermal and Fluid Science*, v. 63, n. 0, p. 20 – 33, 2015. ISSN 0894-1777. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0894177715000072>>.
- CAI, J. et al. Experimental study of three-scalar mixing in a turbulent coaxial jet. *Journal of Fluid Mechanics*, v. 685, p. 495–531, 10 2011. ISSN 1469-7645.
- CELIS, C.; SILVA, L. F. Figueira da. Lagrangian mixing models for turbulent combustion: Review and prospects. *Flow Turbulence and Combustion*, 2015. ISSN 1573-1987.

- CELIS, C.; SILVA, L. F. Figueira da. Study of mass consistency les/dfd techniques for chemically reacting flows. *Combustion Theory and Modelling*, 2015. ISSN 1364-7830.
- CENTENO, F. R.; SILVA, C. V. da; FRANÇA, F. H. The influence of gas radiation on the thermal behavior of a 2d axisymmetric turbulent non-premixed methane–air flame. *Energy Conversion and Management*, v. 79, n. 0, p. 405 – 414, 2014. ISSN 0196-8904. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0196890413008133>>.
- CHEN, C. S.; CHANG, K. C.; CHEN, J. Y. Application of a robust β -pdf treatment to analysis of thermal no formation in nonpremixed hydrogen-air flame. *Combustion and Flame*, v. 98, p. 375–390, 1994.
- CHEN, J. Y. Flames d, e, f. In: *Proceedings of the Fourth International Workshop on Measurement and Computation of Turbulent Nonpremixed Flames*. Darmstadt, Alemanha: [s.n.], 1999. p. 221.
- CHEN, J. Y.; YAM, C.; ARMSTRONG, R. Joint scalar pdf simulation of turbulent reacting flows with detailed chemistry on a parallel cluster. In: *Proceedings of the Fourth International Workshop on Measurement and Computation of Turbulent Nonpremixed Flames*. Darmstadt, Alemanha: [s.n.], 1999. p. 221.
- CHEN, X. Q.; PEREIRA, J. C. F. Computation of turbulent evaporating sprays with well-specified measurements: a sensitivity study on droplet properties. *International Journal of Heat Mass Transfer*, v. 39, p. 441–454, 1996.
- CHRIGUI, M. *Eulerian-Lagrangian Approach for Modeling and Simulations of Turbulent Reactive Multi-Phase Flows under Gas Turbine Combustor Conditions*. Tese (Doutorado) — Technical University Darmstadt, Department of Mechanical Engineering, Darmstadt, Alemanha, 2005.
- CHRIGUI, M.; AHMADI, G.; SADIKI, A. Study on interaction in spray between evaporating droplets and turbulence using second order turbulence RANS models and a Lagrangian approach. *Progress in Computational Fluid Dynamics*, 2004.

CHRIGUI, M. et al. Experimental and numerical analysis of spray dispersion and evaporation in a combustion chamber. *Atomization and Sprays*, v. 19, n. 10, p. 929–955, 2009. ISSN 1044-5110.

CHRIGUI M., J. et al. Investigation of a partially premixed acetone spray flame with decreasing mass loading. In: *Asia Pacific Conference on Combustion*. Hyderabad, Índia: [s.n.], 2010.

CLEARY, M. J.; KLIMENKO, A. Y. A generalised multiple mapping conditioning approach for turbulent combustion. *Flow, Turbulence and Combustion*, Springer Netherlands, v. 82, n. 4, p. 477–491, 2009. ISSN 1386-6184. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1007/s10494-008-9161-3>>.

COELHO, P. J.; PETERS, N. Numerical simulation of a piloted methane / air jet flame using a laminar flamelet model. In: *Proceedings of the Fourth International Workshop on Measurement and Computation of Turbulent Nonpremixed Flames*. Darmstadt, Alemanha: [s.n.], 1999. p. 221.

CURL, R. L. Dispersed phase mixing: I. theory and effects in simple reactors. *AIChE Journal*, American Institute of Chemical Engineers, v. 9, n. 2, p. 175–181, 1963. ISSN 1547-5905. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1002/aic.690090207>>.

DESJARDIN, P.; FRANKEL, S. Two-dimensional large eddy simulation of soot formation in the near-field of a strongly radiating nonpremixed acetylene-air turbulent jet flame. *Combustion and Flame*, v. 119, n. 1-2, p. 121–132, 1999.

DOMINGO, P.; VERVISCHA, L.; VEYNANTE, D. Large-eddy simulation of a lifted methane jet flame in a vitiated coflow. *Combustion and Flame*, v. 152, p. 415–432, 2008.

DOPAZO, C. Recent developments in pdf methods. In: LIBBY P. A. ; WILLIAMS, F. A. (Ed.). *Turbulent Reacting Flows*. [S.l.]: Academic Press, 1994. p. 375–474.

DOPAZO, C.; O'BRIEN, E. E. An approach to the autoignition of a turbulent mixture. *Acta Astronautica*, v. 1, n. 9–10, p. 1239 – 1266, 1974. ISSN 0094-5765. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0094576574900502>>.

DÜWEL, I. et al. Experimental and numerical characterization of a turbulent spray flame. In: *Proceedings of the Combustion Institute*. [S.l.: s.n.], 2007. v. 31, p. 2247–2255.

ELGHOBASHI, S.; TRUESDELL, G. C. On the two-way interaction between homogeneous turbulence and dispersed solid particles. I - Turbulence modification. *Phys. Fluids A*, n. 5, p. 1790–1801, 1993.

Empresa de Pesquisa Energética. *Balanco Energético Nacional 2014 – Ano base 2013*. [S.l.], 2014.

FAETH, G. M. Current status of droplet and liquid combustion. *Prog. Energy Combust. Sci.*, v. 3, p. 191–224, 1977.

FAETH, G. M. Evaporation and combustion of sprays. *Prog. Energy Combust. Sci.*, v. 9, p. 1–76, 1983.

FAETH, G. M. Mixing transport and combustion in sprays. *Progress in Energy and Combustion Science*, v. 13, p. 293–345, 1987.

FIORINA, B.; GICQUEL, O.; VEYNANTE, D. Turbulent flame simulation taking advantage of tabulated chemistry self-similar properties. In: *Proceedings of the Combustion Institute*. [S.l.: s.n.], 2009. v. 32, p. 1687–1694.

FOX, R. *Computational Models for Turbulent Reacting Flows*. [S.l.]: Cambridge University Press, 2003.

FUKUMASU, N. K. *Modelagem de uma chama de difusão turbulenta pela simulação das grandes escalas*. Tese (Doutorado) — Escola Politécnica da Universidade de São Paulo, São Paulo, Brasil, 2010.

GALEAZZO, F. C. C. et al. Computational modeling of turbulent mixing in a jet in crossflow. *Int. J. Heat Fluid Flow*, v. 41, p. 55–65, 2013.

GALEAZZO, F. C. C. et al. Simulation of a lifted flame in a vitiated air environment. In: *Proceedings of the European Combustion Meeting 2011, British Section of the Combustion Institute, Cardiff, UK*. [S.l.: s.n.], 2011.

- GALEAZZO, F. C. C. et al. Investigations of an axially staged combustion system at elevated pressure conditions. In: *25. Deutscher Flammentag, Karlsruhe, Germany*. [S.l.: s.n.], 2011. p. 265–270.
- GARDINER, C. *Stochastic Methods: A Handbook for the Natural and Social Sciences*. 4. ed. [S.l.]: Springer Verlag, 2010.
- GARDINER JR, W. C. *Gas-Phase Combustion Chemistry*. [S.l.]: Springer Verlag, 2000.
- GE, H. W.; GUTHEIL, E. Joint pdf modeling of non-reacting and reacting turbulent spray flows. In: *Proceeding of the 19th National Heat and Mass Transfer Conference*. [S.l.: s.n.], 2008. p. 1–10.
- GOODWIN, D. G. An open-source, extensible software suite for CVD process simulation. In: *Chemical Vapor Deposition XVI and EUROCVI 14, ECS Proceedings, M. Allendorf, F. Maury, and F. Teyssandier, editors*. [S.l.]: The Electrochemical Society, 2003. v. 8, p. 155–162.
- GOUNDER, J. D.; STARNER, S. H.; MASRI, A. R. Effects of droplet loading in turbulent spray ethanol flames. In: *Fourth Australian Conference on Laser Diagnostics in Fluid Mechanics and Combustion*. [S.l.: s.n.], 2005. p. 49–52.
- GROßSCHMIDT, D. et al. Modeling turbulence/chemistry interactions for industrial application using assumed PDF methods. In: *Proceedings of the European Combustion Meeting (ECM 2003)*. [S.l.: s.n.], 2003.
- HAWORTH, D. C. Progress in probability density function methods for turbulent reacting flows. *Progress in Energy and Combustion Science*, v. 36, n. 2, p. 168 – 259, 2010. ISSN 0360-1285. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S036012850900046X>>.
- HEINZ, S. *Statistical Mechanics of Turbulent Flows*. [S.l.]: Springer Verlag, 2003.
- HEYE, C.; KOO, H.; RAMAN, V. Analysis of multiple scalar large-eddy simulation / probability density function formulation for turbulent spray combustion. In: *49th AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit*. [S.l.: s.n.], 2011. p. Paper Number AIAA–2011–782.

HINZ, A.; HASSEL, E. P.; JANICKA, J. Numerical simulation of a piloted methane / air flame (flame d) using a finite-volume – monte carlo-pdf code: Models and boundary conditions. In: *Proceedings of the Fourth International Workshop on Measurement and Computation of Turbulent Nonpremixed Flames*. Darmstadt, Alemanha: [s.n.], 1999a. p. 221.

HINZ, A.; HASSEL, E. P.; JANICKA, J. Finite-volume – monte-carlo-pdf code. In: *Proceedings of the Fourth International Workshop on Measurement and Computation of Turbulent Nonpremixed Flames*. Darmstadt, Alemanha: [s.n.], 1999b. p. 221.

HOFFMANN, A. et al. Validierung eines JPDF-Modells sowie einer semi-globalen Reaktionskinetik anhand detaillierter Feldmessungen hochturbulenter vorgemischter Freistrahlfammen. In: *VDI-GET-Fachtagung "Verbrennung und Feuerungen-20. Deutscher Flammentag"*. [S.l.: s.n.], 2001. VDI-Bericht Nr. 1629.

HOLLMANN, C.; GUTHEIL, E. Flamelet-modeling of turbulent spray diffusion flames based on a laminar spray flame library. *Combustion Science and Technology*, v. 135, p. 175–192, 1998.

INCROPERA, F. P. F. P.; WITT, D. P. D. *Fundamentos de transferência de calor e de massa*. [S.l.]: Livros Técnicos e Científicos, 2003.

JANICKA, J.; KOLBE, W.; KOLLMANN, W. Closure of the transport equation for the probability density function of turbulent scalar fields. *Journal of Non-Equilibrium Thermodynamics*, de Gruyter, v. 4, n. 1, p. 47–66, 1979. ISSN 1437-4358. Disponível em: <<http://www.degruyter.com/view/j/jnet.1979.4.issue-1/jnet.1979.4.1.47/jnet.1979.4.1.47.xml>>.

JENNY, P.; ROEKAERTS, D.; BEISHUIZEN, N. Modeling of turbulent dilute spray combustion. *Progress in Energy and Combustion Science*, v. 6, n. 38, p. 846–887, 2012.

JONES, W.; PAUL, M. Combination of dom with les in a gas turbine combustor. *Int. J. Engineering Science*, v. 43, n. 5-6, p. 379–397, 2005.

JONES, W. P.; LYRA, S.; MARQUIS, A. J. Large eddy simulation of a droplet laden turbulent mixing layer. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, v. 31, p. 93–100, 2010.

JONES, W. P.; WHITELOW, J. H. Calculation of turbulent reacting flows: A review. *Combustion and Flame*, v. 48, p. 1–26, 1982.

JR, A. C.; SILVA, L. F. Figueira da. Assessment of a transient homogeneous reactor through in situ adaptive tabulation. *Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering*, Springer Berlin Heidelberg, v. 36, n. 2, p. 377–391, 2014. ISSN 1678-5878. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1007/s40430-013-0080-4>>.

KEE, R. J.; RUPLEY, F. M.; MILLER, J. A. *CHEMKIN-II: A FORTRAN Chemical Kinetics Package for the Analysis of Gas-Phase Chemical Kinetics*. [S.l.], 1989.

KERN, M. et al. Applicability of a flamelet and presumed JPDP 2-domain-1-step-kinetic turbulent reaction model for the simulation of a lifted swirl flame. In: *Proceedings of ASME Turbo Expo 2009*. [S.l.]: ASME, 2009. Paper number GT2009-5943.

KRISMAN, A. et al. A {DNS} evaluation of mixing models for transported {PDF} modelling of turbulent nonpremixed flames. *Combustion and Flame*, v. 161, n. 8, p. 2085 – 2106, 2014. ISSN 0010-2180. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0010218014000145>>.

KUO, K. K. *Principles of Combustion*. Estados Unidos da América: John Wiley & Sons, Inc., 1986.

LAUNDER, B. E.; SPALDING, D. B. The numerical computation of turbulent flows. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, v. 3, n. 2, p. 269–289, 1974.

LIN, S.; REITZ, R. Drop and spray formation from a liquid jet. *Annu Rev Fluid Mech*, n. 30, p. 85–105, 1998.

LOCKWOOD, F. C.; NAGUIB, A. S. The prediction of the fluctuations in the properties of free, round-jet, turbulent, diffusion flames. *Combustion and Flame*, v. 24, p. 109–124, 1975.

LU, L.; POPE, S. B. An improved algorithm for in situ adaptive tabulation. *Journal of Computational Physics*, v. 228, n. 2, p. 361 – 386, 2009. ISSN 0021-9991. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S002199910800483X>>.

MALISKA, C. R. *Transferência de calor e mecânica dos fluidos computacional*. Rio de Janeiro, Brasil: Livros Técnicos Científicos Editora, 2004. 453 p.

MASRI, A. R.; GOUNDER, J. D. Turbulent spray flames of acetone and ethanol fuels approaching extinction. In: *Proceedings of Sixth Mediterranean Combustion Symposium*. [S.l.: s.n.], 2009.

MEYER, D. W.; JENNY, P. Accurate and computationally efficient mixing models for the simulation of turbulent mixing with {PDF} methods. *Journal of Computational Physics*, v. 247, n. 0, p. 192 – 207, 2013. ISSN 0021-9991. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S002199911300243X>>.

MICHEL, J. et al. Using the tabulated diffusion flamelet model ADF-PCM to simulate a lifted methane-air jet flame. *Combustion and Flame*, ELSEVIER SCIENCE INC, 360 PARK AVE SOUTH, NEW YORK, NY 10010-1710 USA, 156, n. 7, p. 1318–1331, 2009.

MODEST, M. F. *Radiative Heat Transfer*. 2. ed. San Diego, Estados Unidos da América: Elsevier Science, 2003.

MUSTATA, R. et al. A probability density function eulerian monte carlo field method for large eddy simulations: Application to a turbulent piloted methane/air diffusion flame (sandia d). *Combustion and Flame*, v. 145, p. 88–104, 2006.

OBLIEGO, A.; GASS, J. Numerical simulation of a piloted methane / air flame (flame d) using a finite-volume – monte carlo-pdf code. In: *Proceedings of the Fourth International Workshop on Measurement and Computation of Turbulent Nonpremixed Flames*. Darmstadt, Alemanha: [s.n.], 1999. p. 221.

OIJEN, J. A. van; LAMMERS, F. A.; GOEY, L. P. H. de. Modeling of premixed laminar flames using flamelet generated manifolds. *Combustion Science and Technology*, v. 127, p. 2124–2134, 2001.

OLBRICHT, C. et al. Strategies for presumed PDF modeling for LES with premixed flamelet-generated manifolds. *Journal of Turbulence*, v. 11, n. 38, p. 1–18, 2010.

ORBEGOSO, E. M.; SILVA, L. F. Figueira da. Study of stochastic mixing models for combustion in turbulent flows. *Proceedings of the Combustion Institute*, v. 32, n. 1, p. 1595 – 1603, 2009. ISSN 1540-7489. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1540748908000163>>.

PAUL, S. C.; PAUL, M. C. Radiative heat transfer during turbulent combustion process. *International Communications in Heat and Mass Transfer*, v. 37, n. 1, p. 1–6, 1 2010. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0735193309002504>>.

POINSOT, T.; VEYNANTE, D. *Theoretical and Numerical Combustion*. [S.l.: s.n.], 2001.

POITOU, D. et al. Analysis of the interaction between turbulent combustion and thermal radiation using unsteady coupled les/dom simulations. *Combustion and Flame*, v. 159, n. 4, p. 1605–1618, 4 2012.

POPE, S. B. An explanation of the turbulent round-jet/plane-jet anomaly. *AIAA Journal*, v. 16, n. 3, p. 279–281, 1978.

POPE, S. B. PDF methods for turbulent reactive flows. *Progress in Energy and Combustion Science*, v. 11, n. 2, p. 119 – 192, 1985. ISSN 0360-1285. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0360128585900024>>.

POPE, S. B. Computationally efficient implementation of combustion chemistry using in situ adaptive tabulation. *Combustion Theory and Modelling*, v. 1, n. 1, p. 41–63, 1997. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1080/713665229>>.

POPE, S. B. *Turbulent Flows*. Nova Iorque, Estados Unidos da América: Cambridge University Press, 2000.

POPE, S. B. *Turbulent Flows*. [S.l.]: Cambridge University Press, 2000.

- POPE, S. B. A model for turbulent mixing based on shadow-position conditioning. *Physics of Fluids*, v. 25, n. 11, p. –, 2013. Disponível em: <<http://scitation.aip.org/content/aip/journal/pof2/25/11/10.1063/1.4818981>>.
- PRATHAP, C. et al. Analysis of NO_x formation in an axially staged combustion system at elevated pressure conditions. *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, v. 134, n. 3, p. 031507.1–8, 2012.
- RAMAN, V.; PITTSCH, H. A consistent les/filtered-density function formulation for the simulation of turbulent flames with detailed chemistry. *Proceedings of the Combustion Institute*, v. 31, n. 2, p. 1711 – 1719, 2007. ISSN 1540-7489. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S154074890600160X>>.
- REID, R. C.; PRAUSNITZ, J. M.; SHERWOOD, T. K. *The properties of gases and liquids*. [S.l.]: McGraw-Hill, 1977.
- ROCHAYA, D. *Numerical Simulation of Spray Combustion using Bio-mass Derived Liquid Fuels*. Tese (Doutorado) — Cranfield University, Inglaterra, 2007.
- SABEL'NIKOV, V. A.; SILVA, L. F. Figueira da. Partially stirred reactor: study of the sensitivity of the monte-carlo simulation to the number of stochastic particles with the use of a semi-analytic, steady-state, solution to the pdf equation. *Combustion and Flame*, v. 129, n. 1–2, p. 164 – 178, 2002. ISSN 0010-2180. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S001021800200336X>>.
- SACOMANO-FILHO, F. L. *Simulações de chamas turbulentas de etanol com modelo de turbulência $k - \epsilon$* . Dissertação (Mestrado) — Escola Politécnica da Universidade de São Paulo, São Paulo, Brasil, 2011.
- SANTOS, R. G. dos et al. A study of three-dimensional les of turbulent combustion with radiative heat transfer. Springer Berlin Heidelberg, p. 1–16, 2015. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1007/s40430-015-0322-8>>.
- SANTOS, R. Goncalves dos et al. Coupled large eddy simulations of turbulent combustion and radiative heat transfer. *Combustion and Flame*, v. 152, n. 3, p. 387–400, February 2008.

SCHNEIDER, C.; DREIZLER, A.; JANICKA, J. Flow field measurements of stable and locally extinguishing hydrocarbon-fuelled jet flames. *Combust. Flame*, v. 135, p. 185–190, 2003.

SHEIKHI, M. R. H.; GIVI, P.; POPE, S. B. Velocity-scalar filtered mass density function for large eddy simulation of turbulent reacting flows. *Physics of Fluids*, v. 19, n. 9, p. –, 2007. Disponível em: <<http://scitation.aip.org/content/aip/journal/pof2/19/9/10.1063/1.2768953>>.

SHEIKHI, M. R. H.; GIVI, P.; POPE, S. B. Frequency-velocity-scalar filtered mass density function for large eddy simulation of turbulent flows. *Physics of Fluids (1994-present)*, v. 21, n. 7, p. –, 2009. Disponível em: <<http://scitation.aip.org/content/aip/journal/pof2/21/7/10.1063/1.3153907>>.

SIRIGNANO, W. A. *Fluid Dynamics and Transport of Droplets and Sprays*. Nova Iorque, Estados Unidos da América: Cambridge University Press, 2010.

SMAGORINSKY, J. General circulation experiments with the primitive equations. I. The basic experiment. *Mon. Weather Rev.*, v. 91, p. 99–164, 1963.

SMITH, G. P. et al. *GRI-Mech 3.0*. [Http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/](http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/).

SQUIRES, K. D.; EATON, J. K. Effect of selective modification of turbulence on two-equation models for particle-laden turbulent flows. *ASME Journal of Fluids Engineering*, v. 116, p. 778–784, 1994.

STÖLLINGER, M.; HEINZ, S. Evaluation of scalar mixing and time scale models in {PDF} simulations of a turbulent premixed flame. *Combustion and Flame*, v. 157, n. 9, p. 1671 – 1685, 2010. ISSN 0010-2180. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S001021801000026X>>.

SUBRAMANIAM, S.; POPE, S. B. A mixing model for turbulent reactive flows based on euclidean minimum spanning trees. *Combustion and Flame*, v. 115, n. 4, p. 487 – 514, 1998. ISSN 0010-2180. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0010218098000236>>.

TURNS, S. R. *An introduction to combustion: concepts and applications*. Singapore: [s.n.], 2000. (McGraw-Hill series in mechanical engineering).

VEDOVOTO, J. M. et al. Application of the method of manufactured solutions to the verification of a pressure-based finite-volume numerical scheme. *Computers & Fluids*, v. 51, n. 1, p. 85 – 99, 2011. ISSN 0045-7930. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0045793011002404>>.

VEDOVOTO, J. M. et al. Influence of synthetic inlet turbulence on the prediction of low mach number flows. *Computers & Fluids*, v. 106, n. 0, p. 135 – 153, 2015. ISSN 0045-7930. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0045793014003910>>.

VERSTEEG, H. K.; MALALASEKERA, W. *An Introduction to Computational Fluid Dynamics: The Finite Volume Method*. Harlow, England: Pearson Education Limited, 2007. 503 p.

VILLERMAUX, J.; DEVILLON, J. C. Représentation de la coalescence et de la redispersion des domaines de ségrégation dans un fluide par un modèle d'interaction phénoménologique. In: *Proceedings of the 2nd International Symposium on Chemical Reaction Engineering*. New York: [s.n.], 1972.

VREMAN, A. W. et al. Premixed and Non-premixed generated manifolds in large-eddy simulation of Sandia flame D and F. *Combustion and Flame*, v. 153, p. 394–415, 2008.

WEBER, C. Zum Zerfall eines Flüssigkeitsstrahles. *Z Angew Math Mech*, n. 2, p. 136, 1931.

WETZEL, F.; HABISREUTHER, P.; ZARZALIS, N. Numerical investigation of lean blow out of a model gas turbine combustion chamber using a presumed JPDF-reaction model by taking heat loss processes into account. In: *Proceedings of ASME Turbo Expo 2006*. [S.l.]: ASME, 2006. Paper number GT2006-90064.

WILCOX, D. *Turbulence Modeling for CFD*. [S.l.]: DCW Industries, 2006.

YANG, Y. et al. Large-eddy simulation/probability density function modeling of a non-premixed co/h₂ temporally evolving jet flame. *Proceedings of the Combustion Institute*, v. 34, n. 1, p. 1241 – 1249, 2013. ISSN 1540-7489. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1540748912003884>>.

YUEN, M. C.; CHEN, L. W. On drag of evaporating liquid droplets. *Combustion Science and Technology*, v. 14, n. 4-6, p. 147–154, 1976.

ZHOU, Q.; YAO, C. Group modeling of impacting spray dynamics. *International Journal of Heat Mass Transfer*, v. 35, p. 121–129, 1992.