

7. COMBUSTÃO E TURBULÊNCIA

Luís Fernando Figueira da Silva

Departamento de Engenharia Mecânica – PUC-Rio

22453-900 Rio de Janeiro, RJ

Laboratoire de Combustion et de Détonique

Centre National de la Recherche Scientifique

86961 Futuroscope Chasseneuil FRANÇA

luisfer@mec.puc-rio.br

7.1. Introdução

O processo de combustão está presente em diversos momentos de nosso dia-a-dia, dos mais corriqueiros, tal como o acender do fogo para esquentar a água do café da manhã, aos que envolvem maior sofisticação técnica, como por exemplo, a queima que ocorre nos motores de automóveis. A importância da combustão para o homem é tal que diversos mitos e lendas, presentes em todas as culturas, colocam o fogo como elemento central do imaginário. Alguns historiadores chegam a datar o início da cultura como sendo o momento em que a humanidade começa a cozinhar seus alimentos, o que pressupõe a anterioridade no domínio do fogo. Em diversos acampamentos pré-históricos encontram-se artefatos destinados a serem utilizados em cerimoniais especificamente relacionados ao fogo, tal como o vasilhame mostrado na Fig. (7.1), que foi presumidamente utilizado para o transporte do fogo (Riggs, 1992). Porém, não são conhecidos com precisão nem o momento nem a maneira pela qual o homem dominou o fogo.

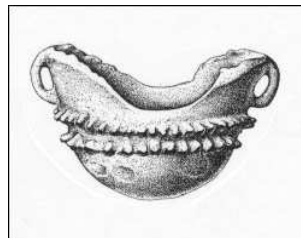


Figura 7.1: Vaso pré-histórico presumidamente utilizado para transporte do fogo.

Embora acompanhe a humanidade desde a aurora da civilização, a combustão permanece um fenômeno cuja descrição é aberta, não obstante progressos consideráveis realizados no último século. Estes progressos permitiram, por exemplo, o projeto de motores capazes de propulsar carros, navios, aviões e naves interplanetárias. Também foi alcançada uma melhor compreensão do desenvolvimento e da propagação de incêndios, sejam eles florestais ou urbanos. Diversos equipamentos industriais que utilizam a combustão como fonte de energia, tais como fornos, caldeiras e incineradores, tiveram sua eficiência grandemente aumentada pela melhor compreensão dos fundamentos da combustão. Porém, à sempre presente demanda de melhoria na eficiência energética dos processos de combustão, vieram se justapor, nos últimos 20 anos, solicitações de baixo impacto ambiental e de utilização de combustíveis que permitam um desenvolvimento sustentável. Estas preocupações combinadas constituem desafios que têm norteado o desenvolvimento de estudos e pesquisas.

Paralelamente aos problemas colocados pelos sistemas práticos existentes, o desenvolvimento de novas tecnologias de combustão pressupõe a existência do conhecimento detalhado das in-

terações fundamentais e seus mecanismos de controle. Dentre estas interações fundamentais, diversos problemas não resolvidos dizem respeito àquela que envolve o processo de combustão, em gases ou em fases dispersas, e a turbulência.

O processo de combustão envolve transformações químicas dos reagentes, durante as quais uma grande quantidade de calor é liberada quando das recombinações entre os átomos constituintes do sistema. Na imensa maioria dos sistemas reativos, a taxa de reação química é uma função crescente da temperatura. Estas duas características reunidas implicam que os processos de combustão são processos que se auto-aceleram, uma vez iniciados (Zel'dovich et al., 1985). Além disto, como resultado destas características, a transformação química e a liberação de calor a ela associada ocorrem em escalas de tempo e de comprimento pequenas quando comparadas às escalas características do escoamento. Estas escalas características serão descritas brevemente neste texto, abordagens mais exaustivas podem ser encontradas em livros clássicos (Lewis and von Elbe, 1961; Glassman, 1996; Williams, 1985; Kuznetsov and Sabel'nikov, 1990; Borghi and Champion, 2000; Peters, 2000; Warnatz et al., 1999).

Como foi visto nos capítulos anteriores, a turbulência pode ser caracterizada como um movimento fluido tri-dimensional e aleatório que possui um espectro contínuo de escalas de comprimento ou de tempo, envolvendo uma cinemática rotacional e uma dinâmica não linear e dissipativa (Chassaing, 2000). A interação entre as escalas características de comprimento e de tempo oriundas do movimento turbulento e aquelas representativas do processo de combustão leva a realização de diversos regimes possíveis para a combustão em escoamento turbulento.

Após introduzir conceitos fundamentais de chamas em meios gasosos, este texto descreve os resultados possíveis da interação entre combustão e turbulência e, por fim, apresenta algumas modelagens possíveis para esta interação.

7.2. Chamas laminares

As chamas laminares são aquelas em que o processo de transformação química ocorre sem que o escoamento se torne turbulento. Embora estas chamas pareçam constituir *a priori* um caso particular de pouca aplicação prática, alguns sistemas usuais operam com este tipo de regime de combustão. Dentre estes, cabe citar as velas para a iluminação doméstica e religiosa, os queimadores de fogões domésticos e de cozinhas industriais, e queimadores radiantes como os encontrados em *rotisseries* e padarias. Além disto, muitas vezes a iniciação do processo de combustão ocorre em regime laminar ou cuja turbulência é fraca, como é o caso de motores a ignição por centelha. Para estes sistemas, um adequado conhecimento do processo de combustão em regime laminar é essencial a um projeto bem sucedido. Por outro lado, a compreensão da fenomenologia das chamas laminares constitui a base necessária para o estudo da interação entre chama e turbulência.

7.2.1. Noções de cinética química

As reações químicas ocorrem segundo um conjunto de etapas elementares envolvendo choques entre as moléculas presentes. Cada uma destas etapas elementares possui seu próprio tempo característico de evolução, função da temperatura e da pressão. Mesmo as misturas combustíveis mais simples envolvem um grande número de etapas elementares e diversas espécies químicas. Para fins de ilustração, na Tab. (7.1) é dado um mecanismo para a cinética química de misturas envolvendo hidrogênio e ar (Balakrishnan and Williams, 1994). Nesta tabela são dados o coeficiente pré-exponencial, A , o expoente da temperatura, β , e a energia de ativação, E , presentes na lei de Arrhenius, para as diferentes reações químicas elementares. A expressão geral para uma reação química envolvendo I reações elementares na qual intervém

K espécies é

$$\sum_{k=1}^K \nu'_{ki} \chi_k \rightleftharpoons \sum_{k=1}^K \nu''_{ki} \chi_k, \quad i = 1, \dots, I, \quad (7.1)$$

onde χ_k é o símbolo químico da k -ésima espécie e ν'_{ki} ν''_{ki} são os coeficientes estequiométricos desta espécie na i -ésima etapa elementar, cuja taxa de reação é dada por

$$q_i = k_i^+ \prod_{k=1}^k n_k^{\nu'_{ki}} - k_i^- \prod_{k=1}^k n_k^{\nu''_{ki}}. \quad (7.2)$$

Nesta expressão, n_k é a concentração molar da espécie k e k_i^\pm é a taxa de avanço/retorno da reação i . A taxa de reação de cada uma das etapas elementares segue uma lei de Arrhenius

$$k_i^\pm = A_i T^{\beta_i} \exp(-E_i/RT), \quad (7.3)$$

sendo que as constantes de avanço/retorno são relacionadas pela constante de equilíbrio, $K_{c_i} = k_i^+/k_i^-$, que é função da temperatura, T , e das propriedades termodinâmicas

$$K_{c_i} = K_{p_i} \left(\frac{p_{atm}}{RT} \right)^{\sum_{k=1}^K \nu_{ki}}, \quad K_{p_i} = \exp \left(\frac{\Delta S_i^0}{R} - \frac{\Delta H_i^0}{RT} \right), \quad (7.4)$$

onde p_{atm} é a pressão atmosférica, R é a constante universal dos gases, $\nu_{ki} = \nu''_{ki} - \nu'_{ki}$, e o símbolo Δ exprime a variação correspondente à transformação de reagentes em produtos na i -ésima reação

$$\frac{\Delta S_i^0}{R} = \sum_{k=1}^K \nu_{ki} \frac{S_k^0}{R}, \quad \frac{\Delta H_i^0}{RT} = \sum_{k=1}^K \nu_{ki} \frac{H_k^0}{RT}. \quad (7.5)$$

As entalpias de formação, H_k^0 , e as entropias no estado padrão, S_k^0 , são expressões conhecidas da temperatura para cada espécie química (Kee et al., 1994).

Apesar do mecanismo de reação para misturas de hidrogênio e de ar dado na Tab. (7.1) não contemplar a dissociação do nitrogênio, 9 espécies químicas estão envolvidas em 21 reações elementares. No caso da combustão de hidrocarbonetos estes números são grandemente ampliados. Mecanismos de reação visando descrever a combustão de metano com ar envolvem cerca de 70 espécies químicas em mais de 350 reações elementares (Baulch et al., 1992; Gardiner Jr., 2000; Tan et al., 1994; Hughes et al., 2001a; Hughes et al., 2001b). Para hidrocarbonetos mais complexos o grau de incerteza dos mecanismos de reação detalhados aumenta, uma vez que o número de caminhos que a reação química pode percorrer aumenta com a complexidade das moléculas reagentes envolvidas (Cathonnet et al., 1981; Westbrook and Dryer, 1984; Warnatz, 1984). Nestes casos, o desenvolvimento de mecanismos detalhados é assunto de pesquisa atual.

Como é de se esperar, a reação química pode ocorrer apenas se houver contato entre os reagentes a nível molecular. No estudo das chamas laminares, é usual realizar uma classificação baseada no grau de pré-mistura entre combustível e oxidante. Para fins de análise, dois casos extremos podem ser identificados, no primeiro os reagentes encontram-se perfeitamente pré-misturados, constituindo uma mistura homogênea, enquanto que no segundo os reagentes encontram-se totalmente segregados. No caso de reagentes pré-misturados, a chama separa gases frescos dos produtos de combustão. Uma chama dita de difusão separa oxidante de combustível no segundo caso. Situações em que ocorre uma pré-mistura parcial podem ocorrer, como no caso da ignição por compressão que ocorre nos motores Diesel, mas não serão abordadas aqui.

Tabela 7.1: Mecanismo de reação química para misturas de hidrogênio e de ar, $k_f = AT^\beta \exp(-E/RT)$, A em (cm, mol, s), E em (cal/mol). Eficiências de terceiro corpo: $a-f_{H_2O} = 12.$, $f_{H_2} = 2.5$, $f_{N_2} = f_{O_2} = 1.0$; $b-f_{H_2O} = 6.5$, $f_{H_2} = 1.$, $f_{N_2} = f_{O_2} = 0.4$; $c-f_{H_2O} = 15.$, $f_{H_2} = 2.5$, $f_{N_2} = f_{O_2} = 1.0$.

REAÇÃO	A	β	E
$H+O_2 \rightleftharpoons OH+O$	3.52E16	-0.7	17070.
$H_2+O \rightleftharpoons OH+H$	5.06E4	2.67	6290.
$OH+OH \rightleftharpoons H_2O+O$	1.51E9	1.14	99.
$H_2+OH \rightleftharpoons H_2O+H$	1.17E9	1.3	3626.
$H+O_2+M \rightleftharpoons HO_2+M$	6.76E19 ^a	-1.42	0.
$H+HO_2 \rightleftharpoons OH+OH$	1.70E14	0.0	874.
$H+HO_2 \rightleftharpoons H_2+O_2$	4.28E13	0.0	1411.
$OH+HO_2 \rightleftharpoons H_2O+O_2$	2.89E13	0.0	-497.
$H+H+M \rightleftharpoons H_2+M$	1.80E18 ^b	-1.0	0.
$H+OH+M \rightleftharpoons H_2O+M$	2.20E22 ^a	-2.0	0.
$HO_2+HO_2 \rightleftharpoons H_2O_2+O_2$	3.02E12	0.0	1390.
$H_2O_2+M \rightleftharpoons OH+OH+M$	1.20E17 ^c	0.0	45500.
$H_2O_2+OH \rightleftharpoons H_2O+HO_2$	7.08E12	0.0	1430.
$O+HO_2 \rightleftharpoons OH+O_2$	2.00E13	0.0	0.
$H+HO_2 \rightleftharpoons O+H_2O$	3.10E13	0.0	1720.
$H+O+M \rightleftharpoons OH+M$	6.20E16 ^a	-0.6	0.
$O+O+M \rightleftharpoons O_2+M$	6.17E15 ^a	-0.5	0.
$H_2O_2+H \rightleftharpoons H_2O+OH$	1.00E13	0.0	3590.
$H_2O_2+H \rightleftharpoons HO_2+H_2$	4.79E13	0.0	7950.
$O+OH+M \rightleftharpoons HO_2+M$	1.00E16	0.0	0.
$H_2+O_2 \rightleftharpoons OH+OH$	1.70E13	0.0	47780.

7.2.2. Chamas laminares pré-misturadas

Uma mistura homogênea de combustível e de oxidante, quando ignitada, é consumida progressivamente por uma chama que se propaga dos gases queimados para os gases frescos. Talvez o exemplo mais conhecido de chama laminar que se propaga em escoamento pré-misturado é a chama estabilizada sobre um bico de Bunsen. A Fig. (7.2) mostra uma imagem direta da chama laminar juntamente com partículas sólidas utilizadas para marcar o escoamento (Echekki and Mungal, 1990). No caso de não ocorrerem instabilidades aerodinâmicas, como a instabilidade de Landau (Zel'dovich et al., 1985), por exemplo, nem obstáculos em seu caminho, uma chama pré-misturada laminar se propagará livremente em regime permanente e com velocidade constante. A experiência mostra que esta velocidade depende apenas do estado termodinâmico da mistura e de sua composição inicial. Uma vez que o raio de curvatura da frente de chama torna-se grande diante da espessura desta, a aproximação de escoamento monodimensional é adequada. As equações que descrevem a propagação desta frente de chama numa mistura de gases perfeitos são

$$\frac{\partial \rho u}{\partial x} = 0, \quad (7.6)$$

$$\rho u \frac{\partial Y_k}{\partial x} = -\frac{\partial j_{k,x}}{\partial x} + \dot{\omega}_k W_k, \quad k = 1, \dots, K, \quad (7.7)$$

$$\rho u c_p \frac{\partial T}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right) - \sum_{k=1}^K c_{p,k} j_{k,x} \frac{\partial T}{\partial x} - \sum_{k=1}^K \dot{\omega}_k W_k h_k + q_R. \quad (7.8)$$

Nestas equações $j_{k,x}$, $c_{p,k}$ e h_k são, respectivamente, o fluxo de difusão molecular na direção x ($-\rho Y_k V_{k,x}$), o calor específico a pressão constante e a entalpia específica da espécie k . A velocidade, temperatura e densidade do escoamento são u , T e ρ . O fluxo de calor por radiação é q_R , c_p e λ são o calor específico a pressão constante e a condutividade térmica da mistura. As equações completas que descrevem o processo de combustão em gases são dadas no apêndice.

No limite de baixos números de Mach, e desprezando-se o efeito do empuxo de Arquimedes, a equação de balanço de quantidade de movimento reduz-se a $p = \text{constante}$. Estas equações podem ser resolvidas tendo como condições de contorno gases frescos em $x \rightarrow -\infty$ e gases queimados em $x \rightarrow \infty$. A integração da equação de continuidade permite verificar que a vazão mássica é constante através da chama e que, por conseguinte, sua propagação ocorre com velocidade constante, u_L , em relação aos gases frescos. A existência desta velocidade própria da chama implica na existência de uma escala característica de comprimento, a espessura da chama, δ_L ,

$$\delta_L = \frac{\lambda}{\rho_0 u_L c_p} = \frac{\nu}{u_L} = \frac{D}{u_L}, \quad (7.9)$$

onde o índice “0” denota as condições em $x \rightarrow -\infty$. Nesta equação, que utiliza a hipótese de número de Lewis ($Le = \lambda/\rho c_p D$) e Schmidt ($Sc = \nu/D$) unitários, ν é a viscosidade cinemática e D o coeficiente de difusão molecular.

Mediante hipóteses de (i) ausência de transporte de calor por radiação, (ii) transporte de massa por difusão de espécies segundo a Lei de Fick, (iii) propriedades de transporte constantes, (iv) número de Lewis unitário e (iv) que um reagente minoritário controla o processo de combustão, estas equações podem ser simplificadas

$$m \frac{dc}{dx} - \rho D \frac{d^2c}{dx^2} = \rho^n A (1-c)^n \exp \left(\beta \frac{c}{c+1/\alpha} \right), \quad c = \frac{T - T_0}{T_{ad} - T_0} = \frac{Y_R}{Y_{R,0}}, \quad (7.10)$$

onde T_{ad} é a temperatura de chama adiabática, obtida em $x \rightarrow \infty$. Nesta equação m é a vazão mássica que atravessa a chama, c é a variável de avanço da reação, β e α são os valores adimensionais da energia de ativação, $\beta = E/RT_0$, e do calor liberado pela reação,

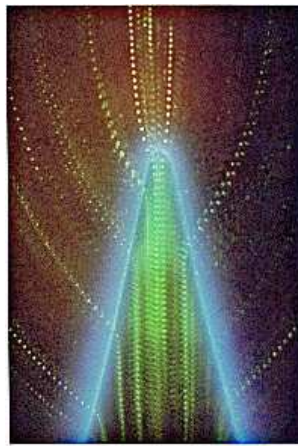


Figura 7.2: Chama laminar estabilizada sobre um bico de Bunsen.

$\alpha = (T_{ad} - T_0)/T_0$, respectivamente. O reagente limitante para o processo de combustão possui fração de massa Y_R . Esta equação possui solução semi-analítica que permite conhecer a velocidade de propagação como função das propriedades físico-químicas da mistura. Cabe notar que, para a grande maioria das reações de combustão, $\beta \gg 1$, o que implica que o consumo de reagentes só é importante na vizinhança de $c = 1$. Assim, a chama pode ser dividida em duas regiões distintas. Na primeira, conhecida como região de pré-aquecimento, de espessura δ_L [Eq. (7.9)], ocorre equilíbrio entre os processos de convecção e difusão de massa e calor, com reação química negligenciável. A segunda é caracterizada por um equilíbrio entre difusão e reação química, e possui espessura δ_R , dada por

$$\delta_R \approx \frac{\delta_L}{\beta}. \quad (7.11)$$

Esta separação em duas regiões distintas, consequência da hipótese de grande energia de ativação para a reação química, possibilita a determinação da estrutura das chamas, mesmo quando se leva em conta um mecanismo detalhado para descrição do processo químico (Peters and Williams, 1987; Seshadri and Peters, 1990).

No entanto, a solução numérica do sistema de equações (7.6–7.8) não apresenta, atualmente, dificuldades maiores, uma vez que estão disponíveis programas computacionais capazes de tratar uma mistura reativa qualquer, como por exemplo o programa Premix (Grcar et al., 1986; Kee et al., 1985). A estrutura de uma chama de pré-mistura propagando-se numa mistura estequiométrica de metano e de ar, calculada utilizando-se este programa, é mostrada na Fig. (7.3). Nesta figura é possível constatar que a espessura desta chama é da ordem de 0,7 mm.

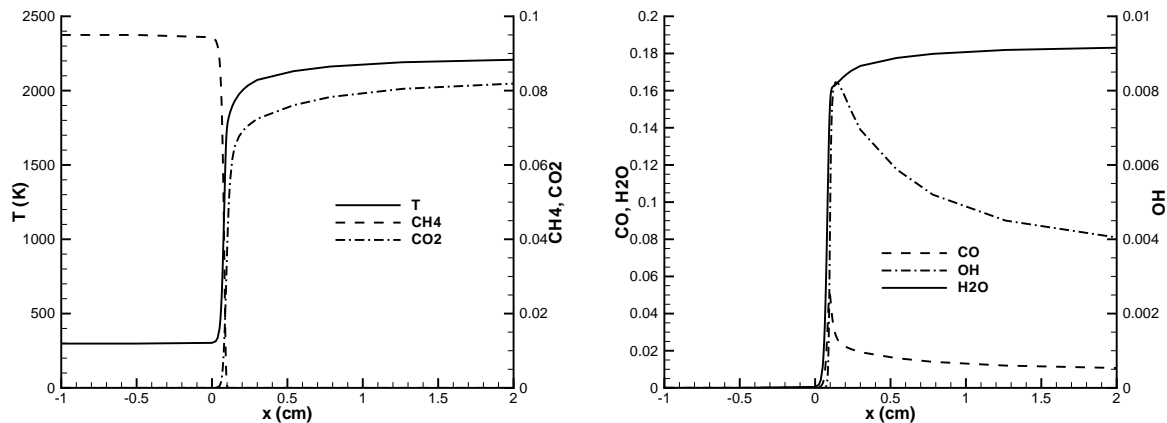


Figura 7.3: Estrutura da chama laminar propagando-se numa mistura de metano e de ar estequiométrica.

Neste caso, a velocidade de propagação da chama laminar é de 41 cm/s. A velocidade de propagação é máxima para misturas cuja composição é próxima da estequiométrica, e possui limites distintos a partir dos quais a propagação estacionária não é possível. A Fig. (7.4) mostra a variação calculada da velocidade de propagação da chama em uma mistura de metano e ar como função da composição da mistura. Nesta figura, a riqueza é definida como a razão entre o número de moles do combustível presente nos gases frescos e o número de moles do combustível na mistura estequiométrica. Este comportamento não monotônico da velocidade de chama com a riqueza deve ser levado em consideração quando da modelagem das chamas turbulentas.

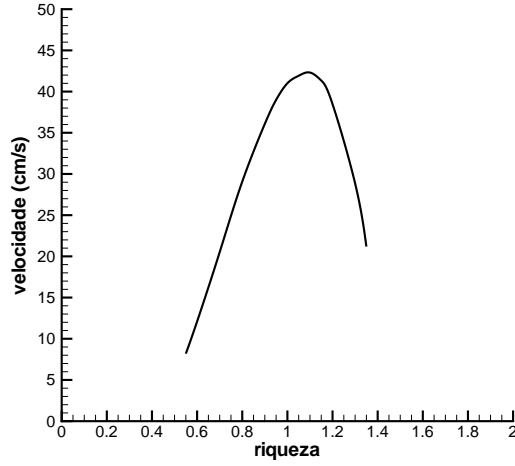


Figura 7.4: Velocidade de propagação da chama laminar numa mistura de metano e de ar em função da riqueza da mistura, $T_\infty = 300$ K, $p_\infty = 1$ atm.

7.2.3. Chamas laminares não pré-misturadas

Outra situação limite que aparece quando do estudo das chamas laminares é aquela em que oxidante e combustível encontram-se segregados pela superfície da chama. Isto ocorre, por exemplo, quando da combustão de gotas de combustível cercadas de comburente, como mostrado na Fig. (7.5 a) (Shaw et al., 1988), ou quando da queima de uma vela [Fig. (7.5 b)] (Anonymous, 2004). Neste caso, do pavio emana parafina em estado gasoso que, por difusão, migra até a superfície da chama. O ar é trazido até a zona de reação por convecção natural, e os produtos de combustão são retirados da proximidade do pavio devido ao efeito do empuxo de Arquimedes exercido sobre os gases quentes. Uma vez que a chama encontra-se posicionada na interface entre os reagentes, contrariamente ao caso da chama pré-misturada, este tipo de chama, que é conhecida como chama de difusão ou chama não pré-misturada, não possui velocidade própria.

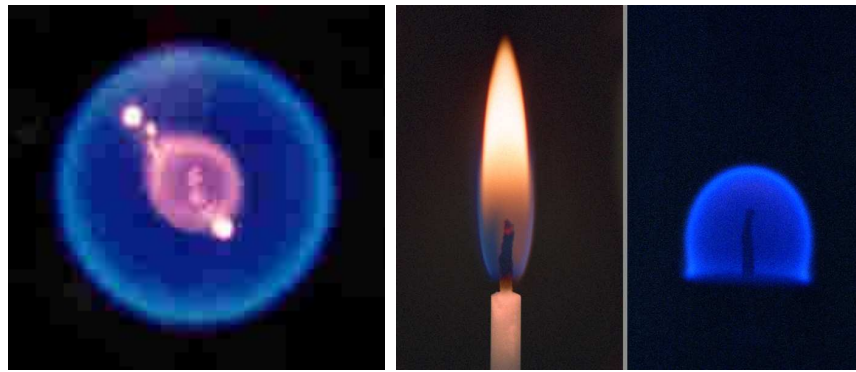
De maneira análoga às chamas pré-misturadas, o sistema de equações (7.6–7.8) descreve os processo de combustão em chamas de difusão. As condições de contorno apropriadas são oxidante em $x \rightarrow -\infty$ e combustível em $x \rightarrow \infty$. Uma descrição simplificada é possível considerando-se as seguintes hipóteses: (i) ausência de transporte de calor por radiação, (ii) transporte de massa por difusão de espécies segundo a Lei de Fick, (iii) propriedades de transporte constantes, (iv) número de Lewis unitário e (v) a reação química na chama pode ser descrita por um processo global no combustível (C) e oxidante (O) se transformam em produtos (P) segundo a reação



As hipóteses (i-iv) são conhecidas como aproximação de Schvab-Zeldovich. Pode-se então definir uma variável conhecida como fração de mistura, Z ,

$$Z = \frac{\frac{Y_O}{\nu W_O} - \frac{Y_C}{W_C} - \frac{Y_{O,0}}{\nu W_O}}{-\frac{Y_{C,0}}{W_C} - \frac{Y_{O,0}}{\nu W_O}} = \frac{\frac{Y_O}{\nu W_O} + \frac{Y_P}{W_P} - \frac{Y_{O,0}}{\nu W_O}}{-\frac{Y_{O,0}}{\nu W_O}} = \frac{h - h_O}{h_C - h_O}, \quad (7.13)$$

onde W é a massa molar e Y a fração de massa dos constituintes, o índice “0” representa os



(a) Chama em torno de uma gota em microgravidade

(b) Chama de uma vela em gravidade normal e em microgravidade

Figura 7.5: Situações em que os reagentes encontram-se segregados pela superfície de chama.

valores destas propriedades no combustível ou no oxidante. A fração de mistura é uma grandeza normalizada, $0 \leq Z \leq 1$, e sua equação de transporte

$$\rho u \frac{dZ}{dx} = \frac{d}{dx} \rho D \left(\frac{dZ}{dx} \right), \quad (7.14)$$

pode ser obtida por uma soma ponderada das equações governantes das espécies químicas. No caso das condições de contorno para as espécies químicas e a entalpia serem homogêneas, a variável Z é a única variável necessária para a descrição do processo de reação, devido à ausência de termo fonte. Note-se que as dificuldades associadas à resolução da Eq. (7.14) são menores que aquelas referentes às equações de transporte originais, Eqs. (7.6–7.8).

No caso em que o tempo característico da reação química τ_c é muito menor que o tempo característico dos transportes mecânicos, τ_m , a espessura da zona reativa é muito inferior do que aquela das zonas de difusão. A estrutura da chama laminar de difusão resultante desta hipótese, conhecida como aproximação de Burke-Schumann, é mostrada na Fig. (7.6). Neste caso, a reação entre combustível e oxidante ocorre apenas quando estes se encontram em proporção estequiométrica, i.e., $Z = Z_{st}$. Note-se que não há coexistência entre combustível e oxidante, e

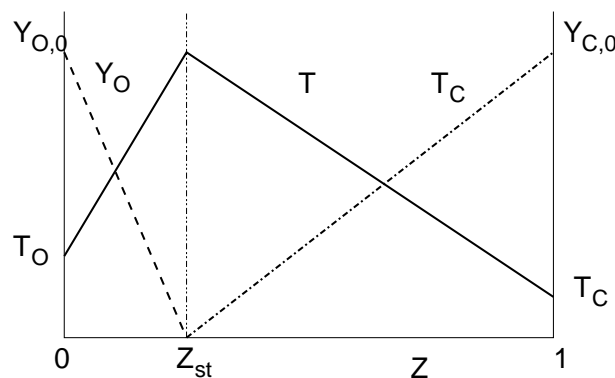
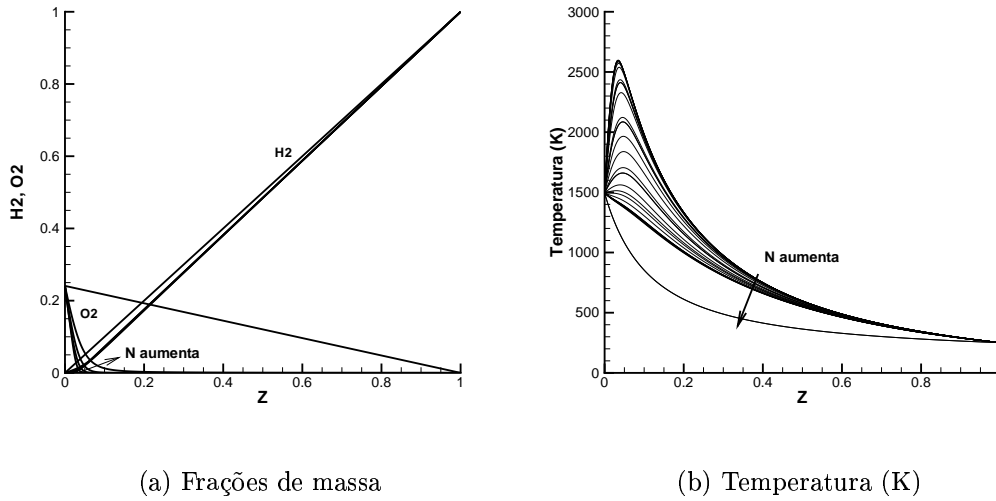


Figura 7.6: Estrutura da chama laminar não pré-misturada segundo a hipótese de Burke-Schumann.



(a) Frações de massa

(b) Temperatura (K)

Figura 7.7: Estrutura da chama não pré-misturada estirada. Evolução da temperatura e das frações de massa de hidrogênio e de oxigênio em uma chama de hidrogênio e de ar para diversos valores da taxa de estiramento N .

que a região de reação é ladeada por duas regiões nas quais o transporte de calor e de massa ocorre por difusão apenas.

Quando o número de Damköler, $Da = \tau_m/\tau_c$ é próximo de um, a aproximação de Burke-Schumann deixa de ser válida. Neste caso, uma descrição simplificada da combustão é possível escrevendo-se as Eqs. (7.6–7.8) num referencial normal à superfície de chama, e tomando-se como coordenada normal a esta a fração de mistura, Z . Definindo-se a taxa de estiramento da chama, N

$$N = 2D \left(\frac{dZ}{dn} \right)^2, \quad (7.15)$$

onde n representa a normal à superfície da chama, as Eqs. (7.7–7.8) podem ser re-escritas como

$$N \frac{d^2 Y_k}{dZ^2} = \dot{\omega}_k W_k, \quad k = 1, \dots, K, \quad (7.16)$$

$$\frac{d^2 h}{dZ^2} = 0. \quad (7.17)$$

Note-se que a taxa de estiramento é equivalente ao inverso de um tempo característico da reação química, representado assim um número de Damköler. Partindo-se do equilíbrio químico, situação da chama de Burke-Schumann, um aumento do estiramento modifica progressivamente a estrutura da chama. Esta modificação pode ser observada na Fig. (7.7), aonde é mostrada a evolução da temperatura e de frações de massa de uma chama de hidrogênio ($Z = 1$) e de ar ($Z = 0$) para diferentes valores da taxa de estiramento N (Sabel'nikov et al., 1998). A medida em que o estiramento aumenta, ocorre uma progressiva interpenetração dos reagentes. Esta interpenetração resulta na presença de combustível não queimado na região oxidante da chama, e vice-versa. Isto leva a uma diminuição progressiva da temperatura na chama, até o ponto em que não é mais possível manter combustão estacionária. Um aumento da taxa de

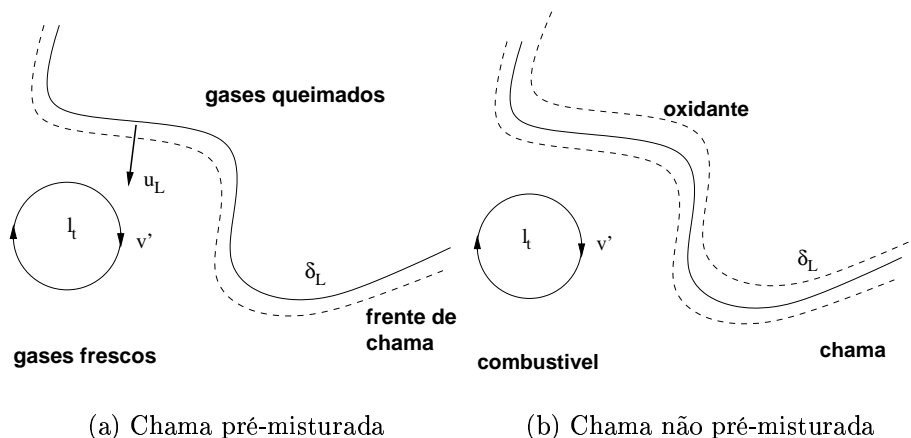


Figura 7.8: Processo de interação elementar entre um turbilhão e uma frente de combustão. A linha sólida representa o máximo da taxa de reação e a pontilhada delimita a espessura da região de pré-aquecimento.

estiramento leva então à extinção abrupta do processo de combustão, como pode ser observado na Fig. (7.7 b). A existência de um valor crítico da taxa de estiramento que acarreta a extinção da chama é intimamente ligada a descrição da taxa de reação por uma lei de Arrhenius na qual a energia de ativação é grande. Para valores da taxa de estiramento maiores do que este valor crítico, ocorre apenas mistura entre os reagentes, sem reação química. Na Fig. (7.7 a) esta situação é materializada pelas retas que vão de $Z = 0$ a $Z = 1$ aos valores máximos de concentração dos reagentes.

7.3. Regimes possíveis da combustão em escoamento turbulento

Damköhler foi o primeiro a propor uma descrição para a estrutura interna de uma chama turbulenta pré-misturada, como sendo constituída de uma chama laminar com espessura muito fina, continuamente dobrada e deslocada pelo escoamento turbulento (Borghini and Champion, 2000). Esta visão quase-estática corresponde ao processo elementar de interação entre um turbilhão de intensidade e dimensão conhecidas e chamas laminares, tal como o ilustrado na Fig. (7.8). Nesta interpretação, a frente de chama turbulenta é uma coleção, no sentido estatístico, de diversas realizações deste processo elementar. As observações experimentais corroboram esta descrição, tanto no caso de chamas pré-misturadas quanto no das chamas de difusão turbulentas. Entretanto, como se verá a seguir, existem diversos resultados possíveis deste processo de interação elementar entre combustão e turbulência em chamas, este é apenas um deles. Em particular, a estrutura interna das chamas laminares pode vir a ser substancialmente modificada pela turbulência.

7.3.1. Interações possíveis entre turbulência e combustão pré-misturada

Os tipos de chama podem ser classificados a partir de uma visão quase-estática das interações possíveis entre a turbulência e a combustão, a qual pressupõe que a chama laminar é caracterizada por sua espessura, δ_L [Eq. (7.9)], e por sua velocidade fundamental de propagação, u_L . Já a turbulência é constituída por uma cascata turbilhonar caracterizada por um valor de energia cinética, k , e uma escala de comprimento integral, l_t (Chassaing, 2000). Uma representação esquemática da interação entre um turbilhão e a chama é dada na Fig. (7.8 a).



Figura 7.9: Chama turbulenta pré-misturada estabilizada em geometria de ponto de estagnação.

Na Fig. (7.9) é mostrada uma imagem instantânea de uma chama turbulenta em escoamento de gases pré-misturados que interage com um anteparo sólido (Foat et al., 2001).

O tipo de chama turbulenta presente num escoamento depende das relações entre a intensidade da turbulência, $v' = (2k/3)^{1/2}$, e a velocidade fundamental de propagação de chama, u_L , e da escala integral de comprimento l_t e a espessura de chama laminar plana, δ_L , que se propagaria no meio considerado (Borghini and Champion, 2000; Veynante and Vervisch, 2002; Peters, 2000). Com estas escalas de comprimento e de velocidade é possível escrever números de Reynolds turbulento e de Damköler

$$Re_T = \frac{v' l_t}{u_L \delta_L} = \frac{v' l_t}{\nu}, \quad (7.18)$$

$$Da = \frac{u_L l_t}{v' \delta_L}, \quad (7.19)$$

e também o número de Karlovitz, que relaciona a espessura de chama a escala de comprimento de Kolmogorov, η ,

$$Ka = \left(\frac{\delta_L}{\eta} \right)^2, \quad \eta \approx l_t Re_T^{-3/4}. \quad (7.20)$$

Estes três números adimensionais estão relacionados como

$$Re_T = Da^2 Ka^2. \quad (7.21)$$

A Fig. (7.10) traz, num plano $(l_t/\delta_L, v'/u_L)$, os diferentes regimes de combustão possíveis quando da interação entre uma frente de chama e uma pré-mistura turbulenta. Nesta representação log – log, as linhas de Re_T constante possuem declividade -45° , a reta com declividade 45° que passa pela origem corresponde a $Da = 1$, e a reta para qual $Ka = 1$ também é mostrada. No semi-plano em que $Re_T < 1$, apenas chamas laminares ocorrem.

Quando as escalas de comprimento da turbulência são todas maiores que a espessura da chama laminar, ou seja, $\eta > \delta_L$, e a intensidade v' é da ordem de grandeza da velocidade de chama laminar u_L , i.e., $Ka < 1$, a chama turbulenta é constituída de elementos de chama laminares (*flamelets*) que são continuamente dobrados e estirados pela turbulência. A chama turbulenta é o conjunto, no sentido estatístico, de diversas realizações destes elementos de chama. Posto que $Ka < 1$, a estrutura interna de cada elemento de chama não é afetada

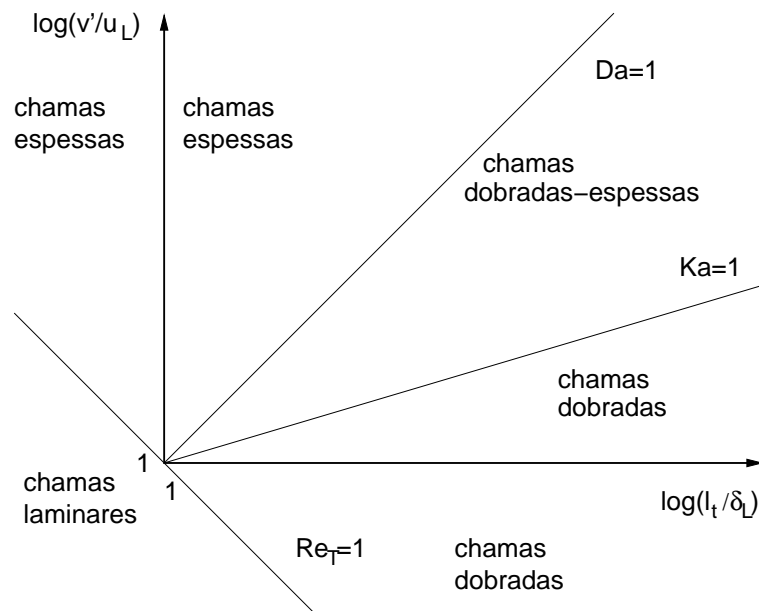


Figura 7.10: Diferentes tipos de chama turbulenta de pré-mistura.

pela turbulência. Este regime de combustão, conhecido como regime de elementos de chama dobrados, leva a uma importante intensificação da taxa de conversão entre reagentes e produtos de combustão por unidade de tempo e de volume. O processo de conversão é controlado pela turbulência, e a experiência mostra que uma correlação existe entre a velocidade da frente de chama turbulenta u_T e a intensidade da agitação turbulenta (Borghini and Champion, 2000)

$$\frac{u_T}{u_L} = \left[1 + c \left(\frac{v'}{u_L} \right)^2 \right]^{1/2}, \quad (7.22)$$

onde c é uma constante empírica. Este regime é aquele no qual operam os motores alternativos a base do ciclo Otto.

No caso em que $Da < 1$, i.e., quando a intensidade e a dimensão característica das flutuações turbulentas é tal que a estrutura interna da frente de chama é totalmente permeada pela turbulência, o regime de chama espessa é obtido. Neste regime as flutuações turbulentas provocam numerosas interações entre os elementos de chama. A intensidade do movimento de agitação turbulenta é tão maior do que a velocidade de chama laminar que, de um ponto de vista macroscópico, ocorre intensa mistura entre reagentes e produtos de combustão. De um ponto de vista microscópico, a zona de transformação química pode ser fortemente alterada pela turbulência, com surgimento de extinções locais e conseqüente perda de continuidade da frente de chama. Este regime é controlado pelo tempo característico da reação química, a frente de chama comporta-se como uma frente de chama laminar, tornada espessa pela difusão turbulenta. Esta situação é próxima a do reator homogêneo, sistema muito utilizado em processos de engenharia.

Quando $Ka > 1$ e $Da > 1$, interações entre os elementos de chama mais próximos começam a acontecer com grande freqüência. Isto acontece devido ao dobramento intenso a que os elementos de chama são submetidos. O raio de curvatura destes dobramentos, neste regime de escoamento, é da ordem de grandeza de δ_L . Em conseqüência de tais dobramentos, a espessura da frente de chama torna-se em alguns pontos superior a δ_L . Em outros locais, devido a altas taxas de cisalhamento impostas pela turbulência à chama, uma extinção local



Figura 7.11: Chama turbulenta não pré-misturada.

da chama pode ocorrer. Estas interações entre elementos de chama e estas extinções locais provocam descontinuidades na superfície da chama, e o consesqüente surgimento de bolsões de gases frescos completamente envoltos por produtos de combustão. Este regime de combustão é conhecido como regime de chama dobrada–espessa. A presença destes bolsões, aliada ao fato de que $\eta < \delta_L < l_t$, dificulta substancialmente a análise deste regime (Borghini and Champion, 2000).

Não se deve perder de vista o fato de que a fronteira exata da entre os diferentes regimes de combustão turbulenta é imprecisa, uma vez que as escalas de tempo e de comprimento utilizadas são quantidades médias. Além disto, para grandes valores do número de Karlovitz, uma extinção completa do processo de combustão pode ocorrer. Os mecanismos envolvidos nesta extinção ainda não foram completamente identificados, há indicações de que esta fronteira seria função do número de Lewis do reagente limitante para o processo de combustão.

7.3.2. Interações possíveis entre turbulência e combustão não pré-misturada

No caso de escoamentos turbulentos sem pré-mistura, e de maneira análoga ao que ocorre para as chamas de pré-mistura, as interações entre a turbulência e o processo químico acarretam dobramentos, estiramentos e extinções das chamas elementares, influenciando significativamente a taxa de reação. Neste caso, porém, a frente de chama não possui dinâmica própria. A Fig. (7.11) mostra uma fotografia de uma chama turbulenta na qual um jato central de combustível queima em contato com um jato exterior e concêntrico de ar (Peeters et al., 1994).

Para classificar os tipos de chama de difusão, optou-se por adotar a descrição através dos números de Damköhler Da e de Reynolds turbulento Re_T , (Borghini and Champion, 2000). O número de Damköhler é definido pela razão entre a escala de tempo da turbulência τ_t , a qual pode ser estimada a partir da flutuação da velocidade v' como sendo $\tau_t = l_t/v'$ e o tempo

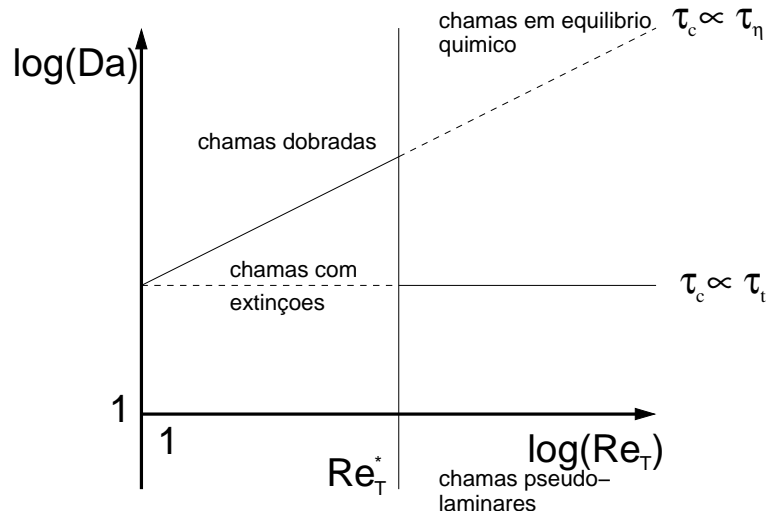


Figura 7.12: Classificação dos diferentes tipos de chama de difusão.

característico do processo químico, τ_c ,

$$Da = \frac{\tau_t}{\tau_c}. \quad (7.23)$$

O número de Reynolds turbulento foi definido na Eq. (7.18).

As chamas turbulentas podem ser classificadas em dobradas, com extinções e chamas pseudo-laminares e em equilíbrio. Esta classificação encontra-se ilustrada na Fig. (7.12).

Na região de chamas pseudo-laminares o tempo característico da reação química é maior do que a escala das flutuações turbulentas. Neste regime, a turbulência permeia a totalidade do processo de reação, e as flutuações de velocidade são dissipadas com velocidade maior do que aquela em que a transformação química ocorre. Esta chama difusiva quase não flutua, sendo ladeada por zonas de difusão, as quais são controladas pela turbulência.

Quando $Da \rightarrow \infty$, a chama turbulenta é composta por um conjunto de chamas elementares nas quais a reação química é muito mais rápida do que o mais rápido movimento de agitação turbulenta. O processo químico encontra-se em equilíbrio, e a frente de chama é distorcida e transportada pela turbulência.

Uma linha $\tau_c/\tau_\eta = \text{constante}$ separa as chamas turbulentas constituídas de elementos de chamas dobrados das chamas nas quais ocorrem extinções locais, onde τ_η corresponde ao tempo turbulento da escala de Kolmogorov, representativo dos menores vórtices. Estas extinções podem ocorrer quando a turbulência afeta fortemente o desenrolar da conversão química.

Na região correspondente a elementos de chamas com extinções locais, fenômenos intrinsecamente transientes podem ocorrer quando os elementos de chama são estirados. Uma pré-mistura parcial ocorre entre combustível e comburente durante o tempo em que o elemento de chama encontra-se apagado. Quando o elemento de chama volta a acender, uma chama parcialmente pré-misturada é formada, o que complica a modelagem da chama turbulenta.

Nesta figura também foi traçado o número de Reynolds crítico Re_T^* que limita a região onde elementos de chama (*flamelets*) podem ser encontrados. Este número de Reynolds pode ser expresso em termos da variância das flutuações do escalar passivo, \widetilde{Z}''^2 , e da espessura da zona reativa, $(\Delta Z)_r$,

$$Re_T^* = \frac{(\widetilde{Z}''^2)^2}{(\Delta Z)_r^4}. \quad (7.24)$$

Quando $Re_T > Re_T^*$, o processo de combustão é totalmente afetado pela turbulência, e não é possível distinguir elementos de chama individuais.

Após esta breve discussão das interações possíveis entre as escalas da turbulência com as chamas no caso de escoamentos pré-misturados ou não, pretende-se introduzir separadamente as abordagens utilizadas para modelagem da combustão e da turbulência.

7.4. Modelagem da Turbulência

Como foi visto nos capítulos anteriores, a turbulência é um fenômeno complexo com um grande número de graus de liberdade. A resolução direta das equações que regem tal fenômeno, as equações determinísticas clássicas de Navier-Stokes, levam a comportamento aleatório devido a sua natureza não linear e também a impossibilidade de serem definidas condições de contorno a cada instante de tempo e a cada ponto da fronteira, pelo menos para escoamentos de interesse prático (Hinze, 1959).

Felizmente, para a maior parte das aplicações de engenharia, e mesmo para a compreensão fenomenológica dos escoamentos, a previsão exata dos valores instantâneos das variáveis características do escoamento não é indispensável. Uma boa predição dos primeiros momentos estatísticos do sistema estudado é muitas vezes suficiente. Estas considerações levam a utilização de ferramentas estatísticas na modelagem da turbulência (Pope, 2000).

Os primeiros modelos para a descrição da transferência de quantidade de movimento linear e de energia em escoamentos turbulentos partem, essencialmente, da identificação de grandezas adimensionais para a caracterização do escoamento (Incropera and DeWitt, 1996). Os modelos assim desenvolvidos relacionam quantidades como número de Nusselt em função de parâmetros tais como números de Reynolds e Prandtl. Embora úteis em algumas situações, essas correlações são, via de regra, limitadas à geometrias específicas e às faixas de número de Reynolds e Prandtl às quais foram ajustadas, além de não permitir uma caracterização detalhada dos escoamentos.

Com o advento dos computadores eletrônicos digitais, tornou-se possível a aplicação de técnicas numéricas para a solução das equações governantes do escoamento. Ao longo destes últimos anos algumas técnicas tem se destacado, sendo amplamente empregadas em problemas de turbulência, podendo ser citadas as Médias de Reynolds para equações de Navier-Stokes (*Reynolds Averaged Navier-Stokes*, RANS), Simulação Numérica das Grandes Escalas (*Large Eddy Simulation*, LES) e Simulação Numérica Direta (*Direct Numerical Simulation*, DNS) como as técnicas mais usuais.

A Simulação Numérica Direta (Moin and Mahesh, 1998; Sarkar et al., 1991; Sakar and So, 1997) é uma técnica numérica sofisticada, tendo por objetivo a solução de todos os graus de liberdade do sistema em questão, ou seja, todo o espectro de frequência da turbulência. Esta técnica é limitada a solução de sistemas com baixos números de Reynolds, já que o número de graus de liberdade do sistema a ser resolvido é uma função crescente do número de Reynolds. Entretanto, é a técnica que possui melhor potencial de representar, em termos estatísticos, os escoamentos turbulentos, e tem servido como ferramenta para uma melhor compreensão da fenomenologia envolvida (Pope, 2000).

A necessidade de soluções de escoamentos com maiores números de Reynolds, nos quais a técnica de DNS torna-se proibitiva, levam a utilização da Simulação Numérica de de Grandes Escalas (Lesieur, 1997; Sagaut, 2001; Piomelli, 1999; Speziale, 1998). A técnica LES consiste em filtrar as equações governante, seja no espectro de frequências, seja no espaço físico. As estruturas turbulentas responsáveis pelo transporte de energia e de quantidade de movimento são resolvidas diretamente, enquanto que apenas as menores estruturas são modeladas. Como as menores estruturas tendem a ser mais homogêneas e isotrópicas (Hinze, 1959), e portanto menos afetadas pelas condições de contorno, acredita-se que uma representação realista do

escoamento possa ser obtida.

As metodologias de DNS e LES são semelhantes no sentido que ambas necessitam a solução numérica tridimensional e transiente das equações de Navier-Stokes. Embora os modelos LES continuam a exigir malhas relativamente refinadas, é possível a solução de escoamentos a números de Reynolds bem superiores aos obtidos com DNS (Sagaut, 2001).

Mesmo que informações sobre as menores escalas do escoamento turbulento sejam relevantes, em muitas situações é suficiente uma descrição do escoamento médio. A técnica de média de Reynolds das equações de Navier-Stokes (RANS) é usualmente empregada para a descrição do escoamento médio (Speziale, 1998). De acordo com esta técnica, qualquer propriedade do escoamento pode ser decomposta em uma quantidade média e de uma flutuação associada à turbulência. Aplicando esta decomposição a todas as propriedades do escoamento, pode-se deduzir uma equação para a descrição do escoamento médio através de uma média temporal das equações de Navier-Stokes. Este procedimento resulta no aparecimento de novos termos de ordem superior nas equações, os quais envolvem correlações entre flutuações de velocidades. A habilidade e a generalidade desta técnica para prever valores médios depende dos modelos de fechamento para determinação dos momentos de ordem superior. Este método permite o uso de malhas bem menos refinadas, e o emprego de hipóteses simplificadoras tais como escoamento bidimensional, regime permanente, etc. Em consequência, uma redução drástica dos recursos computacionais é obtida.

A busca de metodologias alternativas é uma área de pesquisa em aberto, uma vez que as opções disponíveis no momento não são plenamente satisfatórias. Neste contexto, os métodos de transporte da função densidade de probabilidade (PDF) posicionam-se como uma alternativa, relativamente pouco explorada, na modelagem da turbulência (Pope, 1994; Pope, 2000). Nestes, utiliza-se uma equação de transporte para descrever a PDF conjunta de todas as propriedades do fluido. Estes métodos podem ser empregados separadamente ou acoplados a outros métodos tais como RANS e LES para descrever o comportamento dos tensores de ordem superior.

7.5. Modelagem da Combustão em Escoamentos Turbulentos

A turbulência, conforme visto nos capítulos anteriores, é por si só um fenômeno bastante complexo. Tendo em vista a discussão desenvolvida nos parágrafos acima, é esperado que a predição da interação entre combustão e turbulência acarrete um grau de dificuldade ainda maior. No caso de escoamentos reativos, as técnicas de DNS e LES tendem a se tornarem ainda mais restritas a escoamentos com baixo números de Reynolds, envolvendo geometrias e misturas simples de gases perfeitos. Por este motivo, modelos que utilizam alguma forma de média temporal desempenham um papel essencial na predição de escoamentos reativos complexos, os quais são a maioria dos problemas de interesse prático.

A maioria das modelagens para escoamentos turbulentos reativos são derivadas das equações de conservação de massa, quantidade de movimento linear, energia e espécies químicas. Dentre as metodologias empregadas, a mais usual consiste na aplicação, a estas equações, das médias de Reynolds ou de Favre, esta última utilizada quando se trata de escoamentos com densidade variável (Launder and Spalding, 1976; Chassaing, 2000). As médias de Reynolds e de Favre de uma variável ϕ são representadas por $\bar{\phi}$ e $\tilde{\phi}$, respectivamente, e definidas como

$$\bar{\phi} = \frac{1}{\Delta t} \int_0^{\Delta t} \phi dt, \quad (7.25)$$

$$\tilde{\phi} = \frac{\overline{\rho\phi}}{\bar{\rho}}, \quad (7.26)$$

onde Δ_t é um intervalo de tempo suficientemente grande quando comparado à duração das flutuações turbulentas. Usualmente pressão e densidade são decompostas utilizando-se a média de Reynolds, enquanto que as demais propriedades são decompostas via média de Favre. Para a descrição completa do escoamento turbulento reativo, é necessário aplicar este procedimento de média estatística ao conjunto de equações governantes. Tal procedimento resulta em equações médias de transporte de \tilde{Y}_k e termos de flutuação associados a turbulência, os quais necessitam modelagem. Os termos provenientes das equações de quantidade de movimento linear são determinados através de modelos de turbulência. Embora o processo de combustão influencie o transporte de energia no meio reativo, será dada ênfase aqui apenas à modelagem da equação de transporte de massa das espécies químicas, pois nela residem alguns dos principais problemas de fechamento encontrados. As equações de transporte de massa das espécies químicas podem ser escritas aplicando-se a média de Reynolds à Eq. (7.7)

$$\bar{\rho}\tilde{u}\frac{\partial\tilde{Y}_k}{\partial x} = -\frac{\partial\overline{\rho u''Y_k''}}{\partial x} - \frac{\partial\bar{j}_{k,x}}{\partial x} + \bar{\rho}\tilde{\omega}_k W_k, \quad k = 1, \dots, K. \quad (7.27)$$

Nesta equação, u'' e Y_k'' representam as flutuações de velocidade e de fração de massa da espécie k em torno das respectivas médias de Favre. O termo $\overline{\rho u''Y_k''} = \bar{\rho}\tilde{u}\tilde{Y}_k''$ é usualmente conhecido como fluxo de Reynolds da espécie k na direção x , por analogia aos tensores de Reynolds $\overline{u_i''u_j''}$. Este termo representa o transporte de massa das espécies químicas presentes no escoamento sob o efeito da agitação turbulenta. Para fechamento do sistema, torna-se necessário a modelagem do fluxo de Reynolds, bem como o termo de produção médio da k -ésima espécie química, $\tilde{\omega}_k$ (Borghì and Champion, 2000; Peters, 2000).

Em escoamentos quimicamente inertes, os termos de flutuação presentes nas equações médias de energia e espécies químicas são freqüentemente modelados através de uma hipótese de viscosidade turbulenta (Veynante and Vervisch, 2002; Bray et al., 1994). No caso reativo esta hipótese nem sempre é uma boa aproximação, em particular no caso de combustão em gases pré-misturados. Como será visto adiante, a solução de equações para os fluxos turbulentos é uma maneira de evitar a utilização da hipótese de viscosidade turbulenta.

A dificuldade de previsão do termo de produção médio de espécies químicas em escoamentos turbulentos está associada à forte dependência da taxa de reação com a temperatura [Eq. (7.3)]. Isto acarreta, em particular, a impossibilidade de utilizar-se concentrações médias e temperaturas médias para o cálculo das taxas médias de produção de espécies

$$\overline{\exp(-E/RT)} \neq \exp(-E/R\bar{T}) \quad (7.28)$$

Para contornar esta dificuldade, diversos modelos foram desenvolvidos, alguns dos quais serão abordados a seguir.

Situações em que o tempo turbulento, τ_t , é muito pequeno diante do tempo químico, τ_c , ver as Figs. (7.10-7.12), e as flutuações das espécies e temperatura são pequenas, é o único caso em que uma boa aproximação para taxa de reação média é obtida através da utilização da composição e da temperatura médias (Borghì and Champion, 2000).

Uma alternativa para avaliar a taxa de reação consiste em desenvolver em série de Taylor, truncada no segundo termo, o termo de produção de espécies químicas (Bray et al., 1994; Veynante and Vervisch, 2002) e resolver equações para os valores médios da temperatura e das concentrações. Porém, esse procedimento só leva a bons resultados para escoamentos onde as flutuações de temperatura não excedam 1% do valor médio, o que dificilmente ocorre na prática (Warnatz et al., 1999).

Um método interessante para solucionar os problemas causados pela forma funcional da taxa de reação média é a aproximação estatística usando função densidade de probabilidade

(PDF). Utilizando-se a hipótese de ergodicidade (Chassaing, 2000), a média temporal comuta com a média de um conjunto de realizações de um mesmo escoamento turbulento. Esta média de conjunto pode ser utilizada, em particular na determinação de

$$\tilde{\omega}_k(\bar{p}, \tilde{T}, \tilde{Y}_i) = \int \int \dots \int \dot{\omega}_k(p, T, Y_j) P(p, T, Y_j) dp dT dY_j, \quad (7.29)$$

onde $P(p, T, Y_j)$ é a PDF conjunta de (p, T, Y_j) em um dado ponto do escoamento (Pope, 1985). Se a PDF conjunta da pressão, da temperatura e da composição é conhecida, a taxa de reação média pode ser obtida por integração (Bray et al., 1994). Entretanto, a forma desta PDF só é conhecida com exatidão para classes de escoamentos particulares como, por exemplo, jatos livres ou camadas limites. Felizmente, a experiência mostra que estas geometrias simplificadas aproximam, de maneira razoável, diversos sistemas práticos.

Evidentemente, uma integração direta da Eq. (7.29) no caso de escoamentos tridimensionais e considerando-se um mecanismo detalhado para a descrição do processo químico é inviável. Assim, é necessário adotar hipóteses simplificadoras, tanto no tocante a descrição do termo de produção instantâneo, quanto da PDF conjunta das propriedades do escoamento. A seguir serão discutidas brevemente algumas possibilidades no tocante a especificação desta PDF. As simplificações na descrição do processo químico desenvolvidas na seção (7.2) serão examinadas a luz do processo de combustão em escoamento turbulento.

7.5.1. Modelagem da combustão em escoamentos pré-misturados

No caso da combustão em escoamentos em que uma chama turbulenta se propaga em relação a uma pré-mistura homogênea, a descrição mais simples do processo de combustão passa pela formulação apresentada na seção (7.2.2). Nesta formulação o processo químico é descrito por um único escalar reativo, c [Eq. (7.10)]. Aplicando-se a média de Reynolds a esta equação, obtém-se

$$\bar{\rho} \tilde{u} \frac{d\tilde{c}}{dx} = - \frac{d\bar{\rho} \tilde{u} c''}{dx} + \bar{\rho} \tilde{\omega}, \quad (7.30)$$

Nesta equação a média do termo de transporte molecular foi negligenciado diante do termo de transporte turbulento. O termo de produção pode ser obtido através da aplicação a Eq. (7.29) das hipóteses simplificadoras desenvolvidas seção (7.2.2),

$$\tilde{\omega} = \int_0^1 \dot{\omega}(c) P(c) dc. \quad (7.31)$$

Modelos assumindo cinética química rápida

Para chamas turbulentas propagando-se no regime de elementos de chama, isto é, para um número de Karlovitz pequeno, a espessura do elemento de chama é inferior à menor escala do movimento de agitação turbulento (Bray and Peters, 1994). Neste regime a PDF da variável de avanço da reação, $P(c)$, assume uma forma bimodal

$$P(c) = (1 - \tilde{c}) \delta(c) + \tilde{c} \delta(1 - c), \quad (7.32)$$

onde $\delta(c)$ é a função delta de Dirac. Note-se que esta expressão respeita as condições de normalização da PDF $\int_0^1 P(c) dc = 1$ e $\int_0^1 c P(c) dc = \tilde{c}$, e que o segundo momento da variável de avanço da reação pode ser escrito como

$$\tilde{c}''^2 = \tilde{c} (1 - \tilde{c}). \quad (7.33)$$

Para obter-se uma expressão para o termo de produção, é interessante escrever a equação de transporte para o segundo momento da variável de avanço da reação, que pode ser derivada multiplicando-se a Eq. (7.10) por c , aplicando-se a média de Reynolds e subtraindo o resultado da Eq. (7.30) multiplicada por \tilde{c}

$$\bar{\rho}\tilde{u}\frac{d\tilde{c}''^2}{dx} = -\frac{d\bar{\rho}u''\tilde{c}''^2}{dx} - 2\bar{\rho}u''\tilde{c}''\frac{d\tilde{c}}{dx} - \bar{\rho}\epsilon_c + 2\bar{\rho}c''\tilde{\omega}'' , \quad (7.34)$$

onde ϵ_c é a taxa de dissipação das flutuações de c ,

$$\epsilon_c = 2D\left(\frac{dc''}{dx}\right)^2 . \quad (7.35)$$

Utilizando-se a Eq. (7.32) é possível expressar as correlações que aparecem nesta equação

$$u''\tilde{c}''^2 = (1 - 2\tilde{c})u''\tilde{c}'' , \quad (7.36)$$

$$c''\tilde{\omega}'' = (b_0 - \tilde{c})\tilde{\omega}'' , \quad (7.37)$$

onde $b_0 = \left[\int_0^1 c \dot{\omega} P(c) dc\right] / \left[\int_0^1 \dot{\omega} P(c) dc\right]$, o qual depende apenas da forma de $\dot{\omega}$. Estas relações podem ser introduzidas na Eq. (7.34) e, por comparação com a Eq. (7.30), encontra-se uma expressão para a taxa de reação

$$\tilde{\omega} = -\frac{\epsilon_c}{1 - 2b_0} . \quad (7.38)$$

O modelo mais usual para a taxa de dissipação das flutuações de c é aquele que supõe uma analogia entre dissipação e flutuação do escalar e dissipação, ϵ , e flutuação da energia cinética do movimento turbulento, k ,

$$\frac{\epsilon_c}{c''^2} = C_D \frac{\epsilon}{k} = \frac{C_D}{\tau_t} , \quad (7.39)$$

onde C_D é uma constante de ordem 1. Ou seja, a hipótese de reação química rápida implica em que a reação é controlada pelo tempo característico da turbulência. Por fim, o termo de produção pode ser escrito como

$$\tilde{\omega} = -\frac{C_D}{1 - 2b_0} \frac{\tilde{c}(1 - \tilde{c})}{\tau_t} , \quad (7.40)$$

ou seja, a taxa de conversão é máxima quando uma quantidade idêntica de gases frescos e queimados encontram-se em um dado volume de fluido, i.e., quando $\tilde{c} = 0,5$. Note-se que este modelo para a taxa de reação foi objeto de diversas melhorias, as quais visam incluir efeitos do estiramento e da riqueza da mistura na conversão entre reagentes e produtos (Bray et al., 1991; Bray et al., 1998; Bray et al., 1992; Bray et al., 2000; Bray et al., 2001).

Para o fechamento da Eq. (7.30) é necessário modelar o fluxo de Reynolds $u''\tilde{c}''$. A maneira usual de proceder com escalares quimicamente inertes é utilizar uma hipótese gradiente, isto é, ligar o fluxo de Reynolds ao gradiente da grandeza transportada média através de um coeficiente de difusão turbulento, D_t ,

$$u''\tilde{c}'' = -D_t \frac{d\tilde{c}}{dx} . \quad (7.41)$$

Porém, no caso de um meio constituído unicamente de gases frescos e de produtos de combustão, pode-se mostrar que

$$\widetilde{u''c''} = \tilde{c}(1 - \tilde{c})(\bar{u}_1 - \bar{u}_0), \quad (7.42)$$

onde \bar{u}_1 e \bar{u}_0 são as velocidades médias do escoamento nos gases queimados e nos gases frescos, respectivamente. Uma vez que é razoável esperar que $\bar{u}_1 > \bar{u}_0$, o fluxo de difusão turbulenta é positivo, qualquer que seja o sinal do gradiente de \tilde{c} . Uma maneira possível para contornar este problema é escrever uma equação de transporte para $\widetilde{u''c''}$. Esta equação, que introduz novos termos abertos necessitando de modelagem, não será abordada aqui.

Modelos assumindo cinética química com velocidade finita

Diversos desenvolvimentos se propoem a levar em conta efeitos de cinética química com velocidade finita sobre a taxa de reação em escoamento turbulento pré-misturado. Dentre estes, uma alternativa consiste em fazer aparecer, na expressão da taxa de produção [Eq. (7.40)], a velocidade de chama laminar e incorporar a esta os efeitos de riqueza não unitária, curvatura da frente de chama, e estiramento aerodinâmico, por exemplo. Outra possibilidade é escrever diretamente uma equação para a taxa de produção turbulenta. Esta equação fenomenológica possui um grande número de termos em aberto que requerem modelagem (Borghini and Champion, 2000).

Mais recentemente, foi introduzida uma abordagem denominada *level set* (Peters, 2000), na qual é definido um escalar não reativo, o qual é ligado à posição superfície de chama. A equação que descreve este escalar incorpora diversos efeitos provenientes de um número de Damköler finito.

Uma possibilidade que também sido explorada é a resolução da equação de transporte para a função densidade de probabilidade do escalar reativo, $P(c)$. Nesta equação, que pode ser derivada aplicando-se as técnicas de cálculo estocástico (Gardiner, 1985; Pope, 1985), os processos de convecção e de reação química não necessitam de modelagem. Em compensação, o processo de micro-mistura aparece como termo aberto, bem como o termo de flutuação de pressão (Sabel'nikov and Figueira da Silva, 2002).

7.5.2. Modelagem da combustão em escoamentos não pré-misturados

Quando a chama turbulenta separa combustível e oxidante, é possível definir um escalar passivo, a fração de mistura [Eq. (7.14)], de modo que as concentrações das espécies químicas e a temperatura estão a ele relacionados através da Eq. (7.13). A equação de transporte do valor médio deste escalar passivo é

$$\bar{\rho}\bar{u}\frac{d\tilde{Z}}{dx} = -\frac{d\bar{\rho}u''\tilde{Z}''}{dx}. \quad (7.43)$$

Nesta equação apenas o fluxo de Reynolds $u''\tilde{Z}''$ necessita de modelagem. Contrariamente ao caso de propagação de chamas em pré-misturas, por tratar-se do fluxo turbulento de um escalar passivo, a utilização de uma hipótese tipo gradiente para descrever este termo é muitas vezes suficiente

$$u''\tilde{Z}'' = -D_t\frac{d\tilde{Z}}{dx}, \quad (7.44)$$

onde D_t é um coeficiente de difusão turbulento. Assim, levando-se em conta as hipóteses simplificadoras desenvolvidas na seção (7.2.3), as diversas propriedades do escoamento, como

por exemplo temperatura, frações de massa, etc., podem ser obtidas por integração

$$\tilde{\phi} = \int_0^\infty \int_0^1 \phi(Z, N) P(Z, N) dZ dN, \quad (7.45)$$

onde ϕ representa (T, Y_i) e $P(Z, N)$ é a função densidade de probabilidade conjunta do escalar passivo e de sua taxa de dissipação.

Modelos assumindo química rápida

Os primeiros modelos a realizarem com sucesso a predição da combustão em misturas turbulentas utilizaram a hipótese de que a reação química encontra-se em equilíbrio. Neste caso, $\phi(Z, N) = \phi(Z)$ e $P(Z, N) = P(Z)$. O comportamento dos escalares ϕ no equilíbrio é dado na Fig. (7.6).

Porém, ainda é necessário determinar a forma da PDF de Z . Para escoamentos simples, esta é conhecida como função dos dois primeiros momentos da PDF, \tilde{Z} e \tilde{Z}''^2 . Por exemplo, no caso da região plenamente desenvolvida de jatos co-axiais de combustível e de ar (Kuznetsov and Sabel'nikov, 1990)

$$P(Z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\tilde{Z}''^2}} \exp \left[-\frac{(Z - \tilde{Z})^2}{2\tilde{Z}''^2} \right], \quad (7.46)$$

isto é, a distribuição estatística de Z é uma distribuição Gaussiana com média \tilde{Z} e variância \tilde{Z}''^2 . Assim, torna-se necessário resolver uma equação de transporte para a variável média \tilde{Z} [Eq. (7.43)], e outra para \tilde{Z}''^2 , variância de Z

$$\bar{\rho}\tilde{u} \frac{d\tilde{Z}''^2}{dx} = -\frac{d\bar{\rho}u''\tilde{Z}''^2}{dx} - \bar{\rho}u''\tilde{Z}'' \frac{d\tilde{Z}}{dx} - \bar{\rho}\tilde{N}, \quad (7.47)$$

onde o fluxo de Reynolds $u''\tilde{Z}''^2$ e a taxa de dissipação das flutuações do escalar,

$$\bar{\rho}\tilde{N} = \overline{2\rho D \left(\frac{dZ''}{dx} \right)^2}, \quad (7.48)$$

necessitam ser modelados. Note-se que esta equação, colocada apenas para ilustrar as dificuldades envolvidas na modelagem, não se aplica a escoamentos de jatos turbulentos bidimensionais. O fluxo de Reynolds $u''\tilde{Z}''^2$ é usualmente modelado mediante a uma hipótese gradiente análoga a da Eq. (7.44). A taxa de dissipação do escalar passivo pode ser modelada aplicando-se uma analogia entre o transporte de quantidade de movimento e de escalar passivo, i.e.,

$$\frac{\tilde{N}}{\tilde{Z}''^2} = C_N \frac{1}{\tau_t}, \quad (7.49)$$

onde C_N é uma constante de ordem 1.

Modelos de Elementos de Chama (*Flamelets*)

Os modelos de elementos de chama para escoamentos de gases não pré-misturados partem do pressuposto de que a chama turbulenta é um conjunto de elementos de chama laminares continuamente transportados e estirados pelo escoamento. O efeito do estiramento sobre um elemento de chama laminar foi examinado na seção (7.2.3). Neste caso, as propriedades do escoamento reativo (T, Y_i) são funções do escalar passivo Z e da sua taxa de dissipação N .

Esta dependência funcional permite a construção de bibliotecas de elementos de chama, nas quais (T, Y_i) são tabuladas para diversos valores destes dois parâmetros (Peters, 1984). A especificação da PDF conjunta de Z e de N , $P(Z, N)$, é usualmente realizada partindo-se do princípio que a taxa de dissipação é ligada às pequenas escalas do escoamento, enquanto que o escalar passivo é influenciado pelas grandes escalas do movimento, o que implica em

$$P(Z, N) = P(Z)P(N), \quad (7.50)$$

que é conhecida como hipótese de independência estatística de Kolmogorov (Kuznetsov and Sabel'nikov, 1990). A PDF de Z depende do tipo de escoamento considerado, como já mencionado. Na escala dissipativa dos escoamentos turbulentos plenamente desenvolvidos verifica-se um comportamento universal, e $P(N)$ pode ser descrita pela expressão clássica (Kuznetsov and Sabel'nikov, 1990)

$$P(N) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}N\sigma_N} \exp \left[-\frac{(\ln N - \mu_N)^2}{2\sigma_N^2} \right], \quad (7.51)$$

onde μ_N e σ_N estão relacionados por

$$\tilde{N} = \exp(\mu_N + 0,5\sigma_N^2), \quad (7.52)$$

$$\widetilde{N}^{\prime 2} = \tilde{N}^2 (\exp \sigma_N^2 - 1). \quad (7.53)$$

Outros modelos baseados nas equações médias foram propostos, destinados em particular a prever a ignição em escoamentos parcialmente pré-misturados. Nesta categoria destacam-se o Modelo Intermitente Lagrangeano (MIL, Borghi, 1988) e o modelo de Fechamento dos Momentos Condicionais (CMC, Bilger, 1993; Klimenko and Bilger, 1999; Veynante and Vervisch, 2002). O primeiro utiliza reatores parcialmente misturados para prever a reação química, que é ligada ao escoamento médio por uma PDF conjunta da fração de mistura, Z , e de um tempo característico de ignição. Já o segundo resolve equações de momentos condicionais da composição. Ambos os modelos são dificilmente generalizáveis para situações em que vários reagentes são injetados separadamente na câmara de combustão.

Modelos de Transporte da PDF

Os modelos de chamas não pré-misturadas aqui apresentados necessitam que seja prescrita uma forma de PDF para as frações de massa ou de mistura. Esta hipótese pode ser relaxada quando se resolve uma equação de transporte para a função densidade de probabilidade conjunta das concentrações, da temperatura, da velocidade e da pressão. As vantagens desta técnica são que o termo de produção química e a convecção não necessitam modelagem, e obtém-se informação estatística completa sobre a evolução das grandezas turbulentas. Porém, necessitam de fechamento o termo de transporte devido à micro-mistura e também o de gradiente de flutuação de pressão (Pope, 1985).

A equação de transporte para a PDF conjunta das propriedades do escoamento reativo pode ser derivada a partir do cálculo diferencial estocástico (Gardiner, 1985; Pope, 1985; Pope, 1994). Esta equação descreve a evolução da PDF no espaço físico e no espaço de propriedades do escoamento. Assim, devido a grande dimensão do sistema a ser resolvido, normalmente recorre-se a técnica de partículas em coordenadas Lagrangeanas (Monte-Carlo) para solução de tal sistema (Pope, 1976; Pope, 1985; Xu and Pope, 2000). As equações que descrevem a evolução das partículas fluidas contém termos determinísticos e termos de flutuação aleatórios, portanto, métodos numéricos específicos são necessários para resolvê-las (Pope, 1995).

7.6. Conclusões

Neste capítulo procurou-se colocar, de maneira breve, o problema da interação entre combustão e turbulência. A abordagem escolhida, que se atém a casos simples de sistemas reativos descritos por equações monodimensionais e estacionárias, deve se apreendida no seu caráter introdutório. Voluntariamente, deixou-se de enfatizar resultados específicos e comparações entre modelos e experiências, pois estes são abundantemente cobertos nos livros e periódicos especializados.

Espera-se que este breve sobrevôo da combustão em escoamentos turbulentos e subsônicos de gases possa levar o leitor a abordar textos mais completos e tópicos de pesquisa atuais. Dentre estes, destacam-se a combustão em misturas estratificadas de gases (Lahjaily et al., 1998), a interação entre combustão e turbulência em fase dispersa, e a interação entre combustão, turbulência e compressibilidade aerodinâmica (Deshaies et al., 1997). Cada um destes temas traz consigo inúmeros desafios, que certamente continuarão a estimular o trabalho de jovens pesquisadores ao longo dos próximos anos.

7.7. Agradecimentos

Este trabalho foi realizado durante um período de licença do *Centre National de la Recherche Scientifique/Laboratoire de Combustion et de Détonique* (França) com bolsa PROFIX do CNPq. O autor agradece as contribuições de A.O. Niecele e D. Irigon de Irigon a este manuscrito.

7.8. Referências

- Anonymous, 2004, <http://microgravity.grc.nasa.gov/combustion/>.
- Balakrishnan, G. and Williams, F. A., 1994, Turbulent Combustion Regimes for Hypersonic Propulsion Employing Hydrogen-Air Diffusion Flames, “Journal of Propulsion and Power”, Vol. 10, No. 3, pp. 434–436.
- Baulch, D. L., Cobos, C. J., Cox, R. A., Esser, C., Frank, P., Just, T., Kerr, J. A., Pilling, M. J., Troe, J., Walker, R. W., and Warnatz, J., 1992, Evaluated Kinetic Data for Combustion Modelling, “Journal of Physical and Chemical Reference Data”, Vol. 21, No. 3, pp. 411–736.
- Bilger, R., 1993, Conditional Moment Closure for Turbulent Reacting Flow, “Physics of Fluids A”, Vol. 5, No. 2, pp. 436.
- Borghi, R., 1988, Turbulent Combustion Modeling, “Progress in Energy and Combustion Science”, Vol. 14, pp. 245–292.
- Borghi, R. and Champion, M., 2000, “Modélisation et Théorie des Flamme”, Éditions Technip, Paris, France.
- Bray, K., Libby, P., and Williams, F., 1994, High Speed Turbulent Combustion, “Turbulent Reacting Flows”, pp. 609–638. Academic Press Inc.
- Bray, K. N. C., Champion, M., and Libby, P. A., 1991, Premixed Flames in Stagnating Turbulence: Part I. The General Formulation for Counterflowing Streams and Gradient Models for Turbulent Transport, “Combustion and Flame”, Vol. 84, No. 3-4, pp. 391–410.
- Bray, K. N. C., Champion, M., and Libby, P. A., 1992, Premixed Flames in Stagnating Turbulence: Part III. The $\tilde{\kappa} - \tilde{\epsilon}$ Theory for Reactants Impinging on a Wall, “Combustion and Flame”, Vol. 91, No. 2, pp. 165–186.
- Bray, K. N. C., Champion, M., and Libby, P. A., 1998, Premixed Flames in Stagnating Turbulence: Part II. The Mean Velocities and Pressure and the Damköhler Number, “Combustion and Flame”, Vol. 112, No. 4, pp. 635–653.
- Bray, K. N. C., Champion, M., and Libby, P. A., 2000, Premixed Flames in Stagnating Tur-

- bulence: Part IV. A New Theory for the Reynolds Stresses and Reynolds Fluxes Applied to Impinging Flows, "Combustion and Flame", Vol. 120, No. 1-2, pp. 1–18.
- Bray, K. N. C., Champion, M., and Libby, P. A., 2001, Premixed Flames in Stagnating Turbulence: Part IV. Evaluation of Models for the Chemical Source Term, "Combustion and Flame", Vol. 127, No. 1-2, pp. 2023–2040.
- Bray, K. N. C. and Peters, N., 1994, Laminar Flamelets in Turbulent Flames, "Turbulent Reacting Flows", pp. 63–113. Academic Press Inc.
- Cathonnet, M., Boettner, J. C., and James, H., 1981, Experimental Study and Numerical Modeling of High Temperature Oxidation of Propane and N-Butane, "Eighteenth Symposium (International) on Combustion", pp. 903–913, Pittsburgh. The Combustion Institute, The Combustion Institute.
- Chassaing, P., 2000, "Turbulence en Mécanique des Fluides", Cépaduès-éditions, France.
- Deshaies, B., Figueira da Silva, L. F., and René-Corail, M., 1997, Some Generic Problems Related to Combustion of Hydrogen and Air in Supersonic Flows, Champion, M. and Deshaies, B., editors, "IUTAM Symposium on Combustion in Supersonic Flows", pp. 15–42, Dordrecht. IUTAM, Kluwer Academic Publishers, Inc.
- Echekki, T. and Mungal, M. G., 1990, Particle Tracking in a Laminar Premixed Flame, "Physics of Fluids A", Vol. 2, No. 9, pp. 1523.
- Foat, T., Yap, K. P., and Zhang, Y., 2001, The visualisation and mapping of turbulent premixed impinging flames, "Combustion and Flame", Vol. 125, No. 1-2, pp. 839–851.
- Gardiner, C. W., 1985, "Handbook of Stochastic Methods for Physics, Chemistry and the Natural Sciences", Springer Verlag, Berlin Heidelberg.
- Gardiner Jr., W. C., 2000, "Gas Phase Combustion Chemistry", Springer Verlag, New York.
- Glassman, I., 1996, "Combustion", Academic Press, third edition.
- Grcar, J. F. and, K. R. J., Smooke, M. D., and Miller, J. A., 1986, A Hybrid Newton/Time-Integration Procedure for the Solution of Steady, Laminar, One-Dimensional, Premixed Flames, "Twenty-First Symposium (International) on Combustion", pp. 1773–1782, Pittsburgh. The Combustion Institute, The Combustion Institute.
- Hinze, J. O., 1959, "Turbulence", McGraw-Hill, New York, 1 edition.
- Hughes, K., Tomlin, A., Hampartsoumian, E., Nimmo, W., Zsély, I., Ujvári, M., Turányi, T., Clague, A., and Pilling, M., 2001a, An Investigation of Important Gas Phase Reactions of Nitrogen Species from the Simulation of Bulk Experimental Data in Combustion Systems, "Combustion and Flame", Vol. 124, pp. 573–589.
- Hughes, K., Turányi, T., Clague, A., and Pilling, M., 2001b, Development and testing of a comprehensive chemical mechanism for the oxidation of methane, "International Journal of Chemical Kinetics", Vol. 33, pp. 513–538.
- Incropera, F. P. and DeWitt, D. P., 1996, "Fundamentals of Heat and Mass Transfer", John Wiley & Sons, New York, 4 edition.
- Kee, R. J., Grcar, J. F., Smooke, M. D., and Miller, J. A., 1985, A Fortran Program for Modeling Steady Laminar One-Dimensional Premixed Flames, Technical Report SAND85-8240/UC-4, Sandia National Laboratories.
- Kee, R. J., Rupley, F. M., and Miller, J. A., 1994, The Chemkin Thermodynamic Database, Technical Report SAND87-8215B, Sandia National Laboratories.
- Klimenko, A. and Bilger, R., 1999, Conditional Moment Closure for Turbulent Combustion, "Progress in Energy and Combustion Science", Vol. 25, No. 6, pp. 595–687.
- Kuznetsov, V. R. and Sabel'nikov, V. A., 1990, "Turbulence and Combustion", Hemisphere Publishing Corp., New York.
- Lahjaily, H., Karmed, D., Champion, M., and Bruel, P., 1998, Introduction of Dilution in

- the BML model: Application to a Stagnating Turbulent Flame, "Combustion Science and Technology", Vol. 135, pp. 153–173.
- Launder, B. E. and Spalding, D. B., 1976, "Lectures in Mathematical Models of Turbulence", Academic Press, London, 1st edition.
- Lesieur, M., 1997, "Turbulence in Fluids", Kluwer Academic Publishers, Inc., Dordrecht, 3 edition.
- Lewis, B. and von Elbe, G., 1961, "Combustion, Flames and Explosions of Gases", Academic Press, New York.
- Moin, P. and Mahesh, K., 1998, Direct Numerical Simulation: A Tool in Turbulence Research, "Annual Review of Fluid Mechanics", Vol. 30, pp. 539–578.
- Peeters, T. W. J., Strommer, P. P. J., de Vries, J. E., Roeckaerts, J. E., and Hoogendoorn, C. J., 1994, Comparative Experimental and Numerical Investigation of a Piloted Turbulent Natural Gas Diffusion Flame, "25th Symposium (International) on Combustion", pp. 1241–1248. The Combustion Institute.
- Peters, N., 1984, Laminar Diffusion Flamelet Models in Non-Premixed Turbulent Combustion, "Progress in Energy and Combustion Science", Vol. 10, pp. 319–339.
- Peters, N., 2000, "Turbulent Combustion", Cambridge University Press, Cambridge, U.K.
- Peters, N. and Williams, F. A., 1987, The Asymptotic Structure of Stoichiometric Methane-Air Flames, "Combustion and Flame", Vol. 68, pp. 185–207.
- Piomelli, U., 1999, Large-Eddy Simulation: Achievement and Challenges, "Progress in Aerospace Sciences", Vol. 35, No. 1-2, pp. 335–362.
- Pope, S., 1976, The Probability Approach to the Modelling of Turbulent Reacting Flows, "Combustion and Flame", Vol. 27, No. 3, pp. 299–312.
- Pope, S., 1994, Lagrangian PDF Methods for Turbulent Flows, "Annual Review of Fluid Mechanics", Vol. 26, pp. 23–63.
- Pope, S., 1995, Particle Method for Turbulent Flows: Integration of Stochastic Model Equations, "Journal of Computational Physics", Vol. 117, pp. 332–349.
- Pope, S., 2000, "Turbulent Flows", Cambridge University Press, United Kingdom.
- Pope, S. B., 1985, PDF Methods for Turbulent Reactive Flows, "Progress in Energy and Combustion Science", Vol. 11, pp. 119–192.
- Riggs, B., 1992, Archaeological Evidence of Fire Cerimonialism in the Late Prehistorical Southeast, "Research Notes of the Frank H. McClung Museum", Vol. 11.
- Sabel'nikov, V., Deshaies, B., and Figueira da Silva, L., 1998, Revisited Flamelet Model for Non-Premixed Combustion in Supersonic Turbulent Flows, "Combustion and Flame", Vol. 114, No. 3-4, pp. 577–584.
- Sabel'nikov, V. and Figueira da Silva, L., 2002, 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", Vol. 129, pp. 164–178.
- Sagaut, P., 2001, "Large Eddy Simulation for Incompressible Flows", Springer Verlag, Berlin Heildeberg.
- Sakar, A. and So, R., 1997, A Critical Evaluation of Near-Wall Two-Equation Models Against Direct Numerical Simulation Data, "International Journal of Heat and Fluid Flow", Vol. 18, No. 2, pp. 197–208.
- Sarkar, S., Erlebacher, G., and Hussaini, M. Y., 1991, Direct Simulation of Compressible Turbulence in a Shear Flow, "Theoretical and Computational Fluid Dynamics", Vol. 2, pp. 291–305.
- Seshadri, K. and Peters, N., 1990, The Inner Structure of Methane-Air Flames, "Combustion

- and Flame”, Vol. 81, pp. 96–118.
- Shaw, B., Dryer, F., Williams, F., and Haggard, J.B., J., 1988, Sooting and Disruption in Spherically Symmetrical Combustion of Decane Droplets in Air, “Acta Astronautica”, Vol. 17, pp. 1195–1202.
- Speziale, C. G., 1998, Turbulence Modeling for Time-Dependent RANS and VLES: A Review, “AIAA Journal”, Vol. 36, No. 2, pp. 173–184.
- Tan, Y., Dagaut, P., Cathonnet, M., and Boettner, J. C., 1994, Oxidation and ignition of methane-propane and methane-ethane-propane mixtures: experiments and modeling, “Combustion Science and Technology”, Vol. 103, pp. 133–151.
- Veynante, D. and Vervisch, L., 2002, Turbulent Combustion Modeling, “Progress in Energy and Combustion Science”, Vol. 28, pp. 193–266.
- Warnatz, J., 1984, Chemistry of High Temperature Combustion of Alkanes up to Octane, “Twentieth Symposium (International) on Combustion”, pp. 845–856, Pittsburgh. The Combustion Institute, The Combustion Institute.
- Warnatz, J., Maas, U., and Dibble, R. W., 1999, “Combustion Physical and Chemical Fundamentals, Modeling and Simulation, Experiments, Pollutant Formation”, Springer, Berlin, 2nd edition.
- Westbrook, C. K. and Dryer, F. L., 1984, Chemical Kinetic Modeling of Hydrocarbon Combustion, “Progress in Energy and Combustion Science”, Vol. 10, pp. 1–57.
- Williams, F. A., 1985, “Combustion Theory”, Benjamin/Cummings Publishing Company, Inc., second edition.
- Xu, J. and Pope, S., 2000, PDF Calculations of turbulent nonpremixed flames with local extinction, “Journal of Computational Physics”, Vol. 123, pp. 281–307.
- Zel’dovich, Y., Barenblatt, G., Librovich, V., and Makhviladze, G., 1985, “The Mathematical Theory of Combustion and Explosions”, Consultants Bureau, New York.

Apêndice

As equações de transporte de massa, quantidade de movimento, energia e espécies químicas para uma escoamento reativo transiente podem ser escritas como (Williams, 1985)

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \rho \mathbf{u} = 0,$$

$$\rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \rho \mathbf{u} \nabla \cdot \mathbf{u} = -\nabla (p \mathbf{I} + \boldsymbol{\tau}) + \sum_{k=1}^K Y_k \mathbf{f}_k,$$

$$\rho \frac{\partial e}{\partial t} + \rho \mathbf{u} \nabla \cdot e = -\nabla \cdot \mathbf{q} - (p \mathbf{I} + \boldsymbol{\tau}) \nabla \cdot \mathbf{u} + \rho \sum_{k=1}^K Y_k \mathbf{f}_k \cdot \mathbf{V}_k,$$

$$\rho \frac{\partial Y_k}{\partial t} + \rho \mathbf{u} \nabla \cdot Y_k = -\nabla \cdot (\rho Y_k \mathbf{V}_k) + \dot{\omega}_k W_k \quad k = 1, \dots, K.$$

Nestas equações, t é o tempo, ρ é a densidade, \mathbf{u} é o vetor velocidade, p é a pressão, e é a energia interna específica, T é a temperatura e \mathbf{I} é a matriz identidade. No que se refere à k -ésima espécie química, a fração de massa, o vetor das forças de corpo, o vetor da velocidade de difusão, a entalpia estática, o termo de produção molar e a massa molar são dados por Y_k , \mathbf{f}_k , \mathbf{V}_k , h_k , $\dot{\omega}_k$ e W_k , respectivamente. A estas equações é necessário acrescentar uma equação de estado

$$p = \rho R T \sum_{k=1}^K \frac{Y_k}{W_k},$$

aqui escrita para uma mistura de gases perfeitos, uma equação termodinâmica para cada uma das K espécies químicas

$$h_k = h_k^0 + \int_0^T c_{p_k} dT = e_k + \frac{p}{\rho},$$

onde h_k^0 é a entalpia de formação e c_{p_k} é o calor específico a pressão constante, e também uma relação constitutiva para o tensor de tensões viscosas

$$\tau = \frac{2}{3}\mu\nabla\mathbf{u}\mathbf{I} - \mu [(\nabla\mathbf{u}) + (\nabla\mathbf{u})^T],$$

para um fluido Newtoniano com viscosidade de volume nula e onde μ é a viscosidade. A velocidade de difusão da k -ésima espécie é calculada resolvendo-se o sistema

$$\begin{aligned} \nabla X_k &= \sum_{l=1}^K \left(\frac{X_k X_l}{D_{kl}} \right) (\mathbf{V}_l - \mathbf{V}_k) + (Y_k - X_k) \left(\frac{\nabla p}{p} \right) \\ &+ \sum_{l=1}^K \left[\left(\frac{X_k X_l}{\rho D_{kl}} \right) \left(\frac{D_{T,l}}{Y_l} - \frac{D_{T,k}}{Y_k} \right) \right] \left(\frac{\nabla T}{T} \right), \quad k = 1, \dots, K, \end{aligned}$$

onde X_k é a fração molar, D_{kl} é o coeficiente de difusão binário e $D_{T,k}$ o coeficiente de difusão térmica. O terceiro termo à direita desta equação, que exprime o transporte das espécies químicas sob a ação do gradiente de temperatura, é conhecido como efeito Soret. A barodifusão, segundo termo à direita, representa o transporte das espécies químicas sob efeito do gradiente de pressão. Ambos estes termos agem de forma diferenciada sob espécies de massas molares diferentes.

Por fim, o fluxo de calor \mathbf{q} escreve-se

$$\mathbf{q} = -\lambda\nabla T + \rho \sum_{k=1}^K Y_k h_k \mathbf{V}_k + RT \sum_{i=1}^K \sum_{j=1}^K \left(\frac{X_j D_{T,i}}{W_i D_{ij}} \right) (\mathbf{V}_i - \mathbf{V}_j) + \mathbf{q}_R,$$

onde \mathbf{q}_R é o fluxo de calor transmitido por radiação e λ é a condutividade térmica da mistura. A lei de Fourier da condução de calor é o primeiro termo à direita, seguido pelo transporte de calor devido à difusão de massa. O efeito Dufour terceiro termo à direita desta igualdade, é o transporte de calor sob efeito da difusão térmica diferenciada das espécies químicas.