

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE PELOTAS**  
Instituto de Física e Matemática  
Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática



Dissertação

**Simulação Numérica de Chamas Difusivas de Hidrogênio**

**Evanildo Franco de Jesus**

Pelotas, 2020

**Evanildo Franco de Jesus**

**Simulação Numérica de Chamas Difusivas de Hidrogênio**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática da Universidade Federal de Pelotas, como requisito parcial à obtenção do título de Mestre em Modelagem Matemática

Orientadora: Prof<sup>a</sup>. Dr<sup>a</sup>. Daniela Buske  
Coorientador: Prof. Dr. Régis Sperotto de Quadros

Pelotas, 2020

Universidade Federal de Pelotas / Sistema de Bibliotecas  
Catalogação na Publicação

J58s Jesus, Evanildo Franco de

Simulação numérica de chamas difusivas de hidrogênio /  
Evanildo Franco de Jesus ; Daniela Buske, orientadora ; Régis  
Sperotto de Quadros, coorientador. — Pelotas, 2020.

63 f. : il.

Dissertação (Mestrado) — Programa de Pós-Graduação em  
Modelagem Matemática, Instituto de Física e Matemática,  
Universidade Federal de Pelotas, 2020.

1. Hidrogênio. 2. Chamas difusivas. 3. Mecanismo  
reduzido. 4. Simulação numérica. I. Buske, Daniela, orient. II.  
Quadros, Régis Sperotto de, coorient. III. Título.

CDD : 511.8

Elaborada por Ubirajara Buddin Cruz CRB: 10/901

## **Simulação Numérica de Chamas Difusivas de Hidrogênio**

por

**Evanildo Franco De Jesus**

Dissertação submetida ao Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática, PPGMMat, do Instituto de Física e Matemática da Universidade Federal de Pelotas, como parte dos requisitos necessários para a obtenção do Título de

**Mestre em Modelagem Matemática**

Banca Examinadora:

Prof. Dra. Daniela Buske – Orientadora (Universidade Federal de Pelotas)

Prof. Dr. Régis Sperotto de Quadros – Coorientador (Universidade Federal de Pelotas)

Prof. Dr. Álvaro Luiz de Bortoli (Universidade Federal do Rio Grande do Sul)

Prof. Dra. Fernanda Tumelero (Universidade Federal de Pelotas)

Profa. Dra. Francieli Aparecida Vaz (Universidade Federal do Pampa)

Prof. Dr. Glênio Aguiar Gonçalves (Universidade Federal de Pelotas)

Prof. Dr. Guilherme Jahnecke Weymar (Universidade Federal de Pelotas)

Pelotas, 29 de abril de 2020

## **AGRADECIMENTOS**

Agradeço a Deus por todas as suas bênçãos em minha vida.

Agradeço à minha família, pelo apoio e incentivo durante o tempo que estive cursando o mestrado.

Aos meus orientadores, Professor Dr. Régis de Quadros e Professora Dra. Daniela Buske pelo apoio e estímulo na elaboração do trabalho e no decorrer do curso.

Aos amigos e colegas, por todos os momentos vividos, pela força e amizade.

Aos membros da banca, pelas relevantes contribuições e sugestões para melhorar o trabalho.

À Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES) pelo apoio financeiro e ao Centro Nacional de Supercomputação (CESUP) pelo suporte computacional.

E, por fim, a todos os professores do PPGMMat por seus ensinamentos e contribuições para minha formação acadêmica.

**Qualquer um que parar de aprender é velho, seja aos 20 ou aos 80 anos.  
Qualquer pessoa que mantém a aprendizagem continua jovem. A coisa mais  
importante da vida é manter sua mente jovem.**

— HENRY FORD

## RESUMO

FRANCO DE JESUS, Evanildo. **Simulação Numérica de Chamas Difusivas de Hidrogênio**. 2020. 63 f. Dissertação (Mestrado em Modelagem Matemática) – Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática, Instituto de Física e Matemática, Universidade Federal de Pelotas, Pelotas, 2020.

A crescente poluição no mundo incentivou a procura por novos tipos de combustíveis que emitissem menos gases tóxicos. Por isso, pesquisas estão sendo desenvolvidas com os biocombustíveis, há algum tempo, e o hidrogênio vem se destacando nesse meio, pois da sua combustão é gerado vapor de água, sendo considerado um combustível limpo. O objetivo deste trabalho foi simular numericamente uma chama difusiva de hidrogênio na forma de um jato turbulento. Para tanto, usam-se as equações reativas de Navier-Stokes, fração de mistura para o fluxo e para a parte química a técnica *Flamelet*. O método LES é empregado para tratar a turbulência presente no escoamento. Com o intuito de diminuir a complexidade do problema algumas hipóteses são realizadas, como considerar baixo número de *Mach* e a pressão constante, simplificando assim as equações. Para a discretização das equações utiliza-se o método de diferenças finitas, considerando um domínio tridimensional. Os resultados numéricos obtidos foram comparados com os dados experimentais encontrados na literatura, e de maneira geral, estão em concordância com estes, apresentando algumas diferenças próximo à extremidade da chama.

**Palavras-chave:** Hidrogênio; Chamas Difusivas; Mecanismo Reduzido; Simulação Numérica.

## ABSTRACT

FRANCO DE JESUS, Evanildo. **Numerical simulation of diffusion flames of hydrogen**. 2020. 63 f. Dissertação (Mestrado em Modelagem Matemática) – Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática, Instituto de Física e Matemática, Universidade Federal de Pelotas, Pelotas, 2020.

The increasing pollution in the world has stimulated the demand for new types of fuels that emit less toxic gases. For this reason, research has been carried out with biofuels for some time, and hydrogen has been standing out in this environment, since its combustion generates water vapor, being considered a clean fuel. The objective of this work was to numerically simulate a diffusion flame of hydrogen in the form of a turbulent jet. Therefore, the reactive *Navier-Stokes* equations, the mixture fraction for the flow and the *Flamelet* technique for the chemical part are used. The LES method is used to treat the turbulence present in the flow. In order to reduce the complexity of the problem, some hypotheses are made, such as considering a low *Mach* number and constant pressure, thus simplifying the equations. For the discretization of the equations, the finite difference method is used, considering a three-dimensional domain. The numerical results obtained were compared with the experimental data found in the literature, and in general, they are in agreement with these, showing some differences near the flame end.

**Keywords:** Hydrogen; Diffusion Flames; Mechanism Reduced; Numerical Simulation.

## LISTA DE FIGURAS

1	Representação tridimensional da câmara de combustão . . . . .	46
2	Representação tridimensional da malha utilizada . . . . .	46
3	Fração de mistura em relação ao eixo axial . . . . .	50
4	Fração de mistura em relação ao eixo central da câmara de combustão	51
5	Fração de mistura em $x/d = 20$ . . . . .	52
6	Fração de mistura em $x/d = 40$ . . . . .	52
7	Fração mássica do combustível $H_2$ ao longo do eixo central da câmara de combustão . . . . .	53
8	Fração mássica do combustível $H_2$ em $x/d = 20$ . . . . .	54
9	Fração mássica do combustível $H_2$ em $x/d = 40$ . . . . .	54
10	Fração mássica do oxidante $O_2$ em $x/d = 20$ . . . . .	55
11	Fração mássica do oxidante $O_2$ em $x/d = 40$ . . . . .	56

## LISTA DE TABELAS

1	Poder calorífico superior dos combustíveis . . . . .	17
2	Coeficientes estequiométricos da reação (15) . . . . .	24
3	Condições iniciais utilizadas na câmara de combustão . . . . .	47
4	Condições de contorno utilizadas na câmara de combustão . . . . .	48

## LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

### Símbolos

$A$	Fator de frequência
$c$	Concentração molar da mistura ( $mol/m^3$ )
$c_k$	Concentração molar da espécie $k$ ( $mol/m^3$ )
$C_s$	Constante de <i>Smagorinsky</i>
$C_p$	Calor específico à pressão constante ( $J/(Kg \cdot K)$ )
$C_{pk}$	Calor específico da espécie $k$ ( $J/(Kg \cdot K)$ )
$Da$	Número de <i>Damköhler</i>
$D_k$	Coeficiente de difusão da espécie $k$ ( $m^2/s$ )
$D_t$	Difusividade turbulenta $k$ ( $m^2/s$ )
$e$	Energia interna ( $J$ )
$e_t$	Energia total ( $J/Kg$ )
$E$	Energia de ativação ( $J/mol$ )
$f_{k,i}$	Força externa sobre a espécie $k$ na direção $i$
$h$	Entalpia específica ( $J/Kg$ )
$h_s$	Entalpia sensível ( $J/Kg$ )
$h_{sk}$	Entalpia sensível da espécie $k$ ( $J/Kg$ )
$h_t$	Entalpia total ( $J/Kg$ )
$He$	Taxa de liberação de calor
$k$	Espécie química
$l_\kappa$	Escala de comprimento de <i>Kolmogorov</i> ( $m$ )
$m$	Massa total da mistura ( $Kg$ )
$Ma$	Número de <i>Mach</i>
$m_k$	Massa da espécie $k$ ( $Kg$ )
$\dot{m}_1$	Fluxo de massa do combustível ( $Kg/(m^2 \cdot s)$ )
$\dot{m}_2$	Fluxo de massa do oxidante ( $Kg/(m^2 \cdot s)$ )

$M_k$	Símbolo químico da espécie $k$
$MW$	Massa molar total ( $Kg/mol$ )
$MW_k$	Massa molar da espécie $k$ ( $Kg/mol$ )
$n$	Número de espécies químicas
$n_k$	Número de mols da espécie $k$
$n_{sis}$	Número total de mols no sistema
$p$	Pressão ( $Pa$ )
$q_i$	Fluxo de calor ( $J/s$ )
$Q$	Fonte de calor devido à radiação ( $J/s$ )
$R$	Constante universal dos gases ( $J/(mol \cdot K)$ )
$Re$	Número de <i>Reynolds</i>
$S$	Superfície
$Sc$	Número de <i>Schmidt</i>
$t$	Tempo ( $s$ )
$t_\kappa$	Escala de tempo de <i>Kolmogorov</i> ( $s$ )
$T$	Temperatura ( $K$ )
$\vec{u}$	Vetor velocidade da espécie $k$ ( $m/s$ )
$v$	Velocidade média ( $m/s$ )
$v_\kappa$	Escala de velocidade de <i>Kolmogorov</i> ( $m/s$ )
$V$	Volume ( $m^3$ )
$V_{ki}$	Velocidade de difusão molecular da espécie $k$ ( $m/s$ )
$\dot{w}_k$	Taxa de reação da espécie $k$ ( $mol/(m \cdot s^3)$ )
$\dot{w}_T$	Taxa de liberação de calor ( $mol/(m \cdot s^3)$ )
$W$	Trabalho realizado ( $J$ )
$X_k$	Fração molar da espécie $k$
$Y_k$	Fração mássica da espécie $k$
$Y_{F,a}$	Fração mássica do combustível não queimado
$Y_{F,b}$	Fração mássica do combustível queimado
$Y_{F,1}$	Fração mássica do combustível inicial
$Y_{O_2,a}$	Fração mássica do oxidante não queimado
$Y_{O_2,b}$	Fração mássica do oxidante queimado
$Y_{O_2,2}$	Fração mássica do oxidante inicial
$Z$	Fração de mistura
$Ze$	Número de <i>Zel'dovich</i>

$Z_{st}$  Fração de mistura estequiométrica

### Símbolos Gregos

$\delta_{ij}$	Delta de <i>Kronecker</i>
$\epsilon$	Taxa de dissipação viscosa ( $m^2/s^3$ )
$\vec{\eta}$	Vetor normal unitário
$\lambda$	Condutividade térmica ( $J/(m \cdot s \cdot K)$ )
$\mu$	Viscosidade dinâmica ( $Kg/(m \cdot s)$ )
$\nu$	Viscosidade cinemática ( $m^2/s$ )
$\nu_{st}$	Razão de massa estequiométrica
$\nu_k$	Coefficiente estequiométrico da espécie $k$
$\rho$	Massa específica ( $Kg/m^3$ )
$\rho_k$	Massa específica da espécie $k$ ( $Kg/m^3$ )
$\sigma_{ij}$	Tensor tensão ( $Kg/(m \cdot s^2)$ )
$\tau$	Coordenada do tempo do modelo <i>flamelet</i> ( $s$ )
$\tau_{ij}$	Tensor viscoso ( $Kg/(m \cdot s^2)$ )
$\chi$	Taxa de dissipação escalar ( $1/s$ )

### Espécies Químicas

$CO_2$	Dióxido de Carbono
$CH_4$	Metano
$H_2O$	Monóxido de Di-Hidrogênio ou vapor de água
$H_2$	Di-Hidrogênio
$H$	Hidrogênio
$O$	Oxigênio
$O_2$	Dioxigênio

### Siglas

CaC	Célula a Combustível
DFC	Dinâmica dos Fluidos Computacional
DES	<i>Detached Eddy Simulation</i>
DNS	<i>Direct Numerical Simulation</i>
EDP	Equações Diferenciais Parciais
ENS	Equações de <i>Navier-Stokes</i>
LES	<i>Large Eddy Simulation</i>

MDF Método de Diferenças Finitas  
MEF Método de Elementos Finitos  
MVF Método de Volumes Finitos  
NASA *National Aeronautics and Space Administration*  
RANS *Reynolds Averaged Navier-Stokes*  
URANS *Unsteady Reynolds Averaged Navier-Stokes Equations*

# SUMÁRIO

<b>1</b>	<b>INTRODUÇÃO</b>	15
1.1	Combustão	18
1.2	Objetivos	21
1.3	Organização do Trabalho	21
<b>2</b>	<b>METODOLOGIA</b>	22
2.1	<b>Definições e Variáveis</b>	22
2.1.1	Fração Molar	22
2.1.2	Fração Mássica	23
2.1.3	Estequiometria	24
2.1.4	Fração de Mistura	25
2.2	<b>Equações Governantes</b>	27
2.2.1	Conservação da Massa	27
2.2.2	Quantidade de Movimento	28
2.2.3	Conservação da Massa das Espécies Químicas	29
2.2.4	Conservação da Energia	31
2.3	<b>Equações Governantes Simplificadas</b>	34
2.4	<b>Modelagem da Turbulência</b>	35
2.5	<b>Simulação em Grandes Escalas</b>	37
2.5.1	Equações governantes filtradas espacialmente	38
2.6	<b>Modelo <i>Flamelet</i></b>	40
2.7	<b>Adimensionalização das Equações Governantes</b>	42
<b>3</b>	<b>MODELAGEM COMPUTACIONAL</b>	44
3.1	<b>Método de Diferenças Finitas</b>	44
3.2	<b>Descrição e Domínio do Caso em Estudo</b>	45
3.3	<b>Condições Auxiliares</b>	47
<b>4</b>	<b>RESULTADOS NUMÉRICOS</b>	49
4.1	<b>Comparação entre a fração de mistura experimental e numérica</b>	50
4.2	<b>Comparação entre as frações mássicas experimentais e numéricas para os reagentes</b>	53
<b>5</b>	<b>CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS</b>	57
	<b>REFERÊNCIAS</b>	59

# 1 INTRODUÇÃO

Atualmente existe a constante preocupação com o meio ambiente devido ao aquecimento global, a maioria dos países procuram formas de desenvolvimento sustentáveis visando reduzir os efeitos climáticos provocados e sentidos no mundo. Uma das principais causas da poluição no mundo é o uso dos combustíveis fósseis, como gasolina, óleo diesel, gás natural e carvão mineral (DAS; VEZIROGLU, 2001). A queima ou a combustão destes combustíveis geralmente é usada para gerar energia, movimentar motores de máquinas, acionar meios de transportes, no processamento de materiais, na propulsão de foguetes e nas indústrias de produção de energia (VAZ, 2010). Como principais consequências por utilizar combustíveis fósseis temos o aquecimento global, efeito estufa, formação de gases poluentes e substâncias tóxicas na atmosfera, nocivos à saúde dos seres vivos (SILVA, 2016).

Os combustíveis fósseis são fontes de energias não renováveis, ou seja, ficam cada vez mais escassos e limitados, conforme são utilizados. Na procura de formas alternativas de energias renováveis e limpas que pudessem substituir os combustíveis fósseis e diminuir a emissão de gases poluentes como o dióxido de carbono ( $CO_2$ ), surgiram os biocombustíveis (AZEVEDO; AZEVEDO LIMA, 2016). Os biocombustíveis e seus derivados são combustíveis que provêm da queima de biomassa (material de constituição orgânica, usado para produção de energia), como o etanol, o biodiesel, o biogás, o óleo vegetal, entre outros. A biomassa geralmente provêm de plantas oleaginosas ou vegetais como cacau, babaçu, mamona, cana-de-açúcar, soja, milho, entre outros.

Algumas das principais vantagens de fazer uso dos biocombustíveis são que estes apresentam menor índice de poluição com a sua queima, como também, diminuem a dependência em relação ao uso dos combustíveis fósseis. Mas, tem-se também como uma desvantagem a necessidade de utilizar grandes áreas agrícolas para a produção da matéria-prima dos biocombustíveis, o que pode causar o aumento do desmatamento florestal, ocasionando grandes impactos para o meio ambiente (AZEVEDO; AZEVEDO LIMA, 2016) .

Apesar da redução da emissão de gases poluentes na atmosfera, ainda assim a

maioria dos biocombustíveis como o etanol e o biodiesel emitem  $CO_2$  contribuindo com o aquecimento global (SILVA, 2016). Por isso, o hidrogênio é considerado como o combustível do futuro, pois da sua combustão são gerados apenas energia na forma de calor e vapor de água ( $H_2O$ ).

A popularidade do hidrogênio como uma possível fonte de combustível iniciou em 1970 em decorrência da crise do uso dos combustíveis como petróleo e seus derivados (BENEMANN, 1996), mas foi em 1990 que o interesse nele foi intensificado diante das preocupações com o efeito estufa. Hoje em dia o hidrogênio é testado como combustível alternativo para motores de combustão interna, como os de automóveis, sendo que a célula a combustível (CaC) também vem sendo testada em carros (DAMASCENA; GÓES, 2013). O hidrogênio também é utilizado em processos industriais e em projetos da NASA como combustíveis para foguetes e propulsão para cápsulas espaciais (OLIVEIRA et al., 2011).

O hidrogênio é um átomo formado por apenas um próton e um elétron. É o elemento mais simples, o mais leve e abundante no universo. Cerca de 75% do universo e aproximadamente 70% da superfície terrestre é formada por esse elemento (RODRIGUES, 2008). Normalmente, encontra-se o hidrogênio associado com outros elementos como carbono, oxigênio, nitrogênio, entre outros, por isso é considerado como uma fonte intermediária e não uma fonte primária como o petróleo (BENEMANN, 1996). Para ser utilizado como fonte de energia é necessário separá-lo desses elementos por meio de processos químicos, para obtê-lo na sua forma molecular e no estado gasoso ( $H_2$ ) (CHAMOISIS, 2000).

Inúmeros são os processos químicos existentes para se obter o hidrogênio, alguns desses são: reforma do gás natural, eletrólise da água, gaseificação da biomassa, biofotólise, fermentação, etc. A reforma do gás é um método que consiste em expor o gás natural em altas temperaturas para formar o hidrogênio. Mais de 40% da produção de hidrogênio no mundo provém da reforma do gás natural. Na eletrólise da água a energia elétrica é utilizada como meio para separar os seus componentes, o hidrogênio ( $H_2$ ) e o oxigênio ( $O$ ). Pela gaseificação da biomassa, é possível convertê-la em uma mistura gasosa de hidrogênio e outros componentes aplicando calor sob pressão na presença de vapor de água e uma quantidade de oxigênio controlada (OLIVEIRA et al., 2011).

Na biofotólise, um sistema biológico de microorganismos compostos por mecanismos fotossintéticos como algas é utilizado para produzir hidrogênio. Mecanismos fermentativos formados por bactérias são responsáveis pela produção de  $H_2$  através da fermentação, que se baseia na oxidação de matérias orgânicas como materiais residuais e efluentes, provenientes das indústrias de papel e celulose, e da agricultura, como bagaço de cana-de-açúcar e vinhaça (SILVA, 2016).

Sabe-se que durante o processo de combustão há liberação de energia por parte

do combustível. Quanto mais energia for liberada pelo combustível, significa que esse apresenta um poder calorífico eficiente, oferecendo mais energia para ser convertida. O poder calorífico é a quantidade de energia liberada pelo combustível, sendo medido experimentalmente e quantificado por meio do poder calorífico inferior e superior (SANTOS; SANTOS, 2005). A diferença entre estes é denominado de calor de vaporização, que determina a quantidade necessária para vaporizar o combustível do estado líquido para o estado gasoso.

Comparado com outros combustíveis, o hidrogênio é mais eficiente, pois apresenta maior grau de calor liberado por unidade de massa durante o processo da combustão. Isso pode ser observado na Tabela 1, na qual são mostrados o poder calorífico superior para diversos tipos de combustíveis. Segundo Santos e Santos (2005) o poder de combustão do hidrogênio é aproximadamente 2,5 vezes maior do que qualquer outro combustível e a alta energia contida no hidrogênio faz com que a energia de explosão do gás hidrogênio seja também cerca de 2,5 vezes maior do que os outros.

Tabela 1: Poder calorífico superior dos combustíveis

Combustível	Poder Calorífico Superior ( $KJ/g$ )
Hidrogênio	141,9
Metano	55,5
Propano	50,4
Gasolina	47,5
Diesel	44,8
Metanol	19,6

Fonte: Santos; Santos (2005, p. 253)

O hidrogênio tem velocidade de chama bem maior que a de outros hidrocarbonetos (metano, gasolina, propano, etc), sua chama é muito quente apresentando densidade energética de  $38\text{ KWh/Kg}$  contra a densidade da gasolina de  $14\text{ KWh/Kg}$  (RODRIGUES, 2008). Outra característica importante do  $H_2$  é ter maior difusividade do que os hidrocarbonetos, espalhando-se rapidamente através de materiais ou outros gases devido sua baixa densidade. É considerado como um dos combustíveis mais seguros, pois apesar de ser inflamável sua baixa densidade faz com que se disperse mais rápido na atmosfera e em caso de acidente não irá contaminar o ambiente por não ser tóxico.

O desenvolvimento do hidrogênio encontra algumas barreiras, como falta de uma infraestrutura, dificuldades de armazenamento e técnicas de produção com custos mais acessíveis. Entretanto, as vantagens oferecidas pelo hidrogênio são bastantes significativas, tanto no setor ambiental e tecnológico, motivando pesquisas em áreas como a combustão no Brasil e no mundo, para superar esses desafios e desenvolver a tecnologia do hidrogênio.

## 1.1 Combustão

A combustão desempenha um papel fundamental na vida dos seres vivos, pois está envolvida em diversos processos biológicos, físico-químicos e industriais. Sem ela dificilmente o mundo seria como é atualmente, porque foi a partir da descoberta do fogo que o homem conseguiu obter avanços importantes na forma de agir, pensar, se proteger e viver, que provocaram mudanças essenciais em sua vida (HOERLLE, 2015), sendo refletido nos dias atuais pelo avanço tecnológico adquirido ao longo do tempo. É considerada a tecnologia mais antiga da civilização que revolucionou o mundo e o desenvolvimento da humanidade.

A combustão é um processo complexo que ocorre por meio de reações químicas envolvendo combustível e oxidante (DE BORTOLI, 2009), assim como outras variáveis como temperatura, energia, pressão, etc. A combustão pode acontecer com chamas ou sem chamas, pode ser rápida ou lenta, laminar ou turbulenta, dependendo do meio onde ocorre. Se a combustão for com chamas, esta é classificada como pré-misturada, parcialmente pré-misturada ou difusiva, de acordo com a forma que os reagentes são manipulados antes da zona de reação ou combustão (PETERS, 1992).

As chamas pré-misturadas são definidas como sendo a situação de combustão onde o combustível e o oxidante são misturados antes de entrarem na zona de combustão (LACAVA, 2014). Chamas pré-misturadas são observadas em fornos de aquecimento por condução ou convecção do calor, fogões domésticos, motores do tipo otto onde a combustão ocorre com ignição por centelha. De acordo com Lacava (2014), a vantagem das chamas pré-misturadas é que estas conseguem alcançar com facilidade o processo de combustão completa, com menor emissão de fuligem e produtos de combustão de oxidação parcial, como hidrocarbonetos não queimados. Esse tipo de chama exige maior controle para atingir a estabilização a fim de evitar riscos de explosão e danos em equipamentos, extinção da chama (HOERLLE, 2015) ou propagação da chama para dentro do queimador, quando essas se alimentam da mistura de gases não queimados (VAZ, 2010).

Quando os reagentes são misturados na zona de combustão, as chamas são difusivas e apresentam características completamente diferentes das chamas pré-misturadas. Nessas o processo de difusão dos reagentes é mais lento do que as reações químicas, ou seja, a taxa de mistura entre os reagentes é que controla o processo (LACAVA, 2014). As chamas difusivas são aplicadas para diferentes finalidades nas indústrias, em projetos de queimadores em razão da maior taxa de transferência de calor por meio da radiação, motores a diesel, lamparinas, sendo que estas chamas são mais seguras, estáveis e melhores de controlar durante o processo de combustão (GAYDON; WOLFHARD, 1979).

Chamas laminares ou turbulentas dependem da velocidade com que o combustível

é injetado na zona de combustão, sendo que a maior parte dos processos de combustão envolvem fluxos difusivos e turbulentos (ANDREIS, 2011). A turbulência traz como consequências a aceleração do processo de combustão, aumento da taxa de difusão e troca de calor. Para tratar a combustão turbulenta aplica-se uma das técnicas desenvolvidas denominada *Flamelet*. Essa técnica consiste em modelar uma chama turbulenta, onde cada elemento da frente da chama é analisado como um conjunto de pequenas chamas laminares (PETERS, 2004).

Modelar problemas envolvendo combustão não é uma tarefa fácil, pois envolve inúmeros fatores como transferência de energia, de massa das espécies químicas, de temperatura, cinética química e seus mecanismos detalhados ou reduzidos de reações químicas, radiação, pressão, e principalmente as equações de *Navier-Stokes*, que servem como a base da solução do problema. Como uma forma de diminuir um pouco a complexidade, pode-se fazer algumas simplificações e desconsiderar alguns fatores que não são importantes no caso em estudo.

As equações de *Navier-Stokes* com as equações difusivas-convectivas para as espécies químicas e temperatura são utilizadas na modelagem de chamas difusivas, formando um sistema de Equações Diferenciais Parciais (EDP's) acopladas e não-lineares (VAZ, 2013). Encontrar soluções para essas equações é um desafio, principalmente soluções analíticas para casos nada simples. Por isso, foram surgindo outras técnicas como análise assintótica e métodos numéricos, que ajudam a obter análises melhores em processos de combustão, como a estrutura de chamas e seu comportamento.

Na simulação numérica do processo de combustão, as escalas de tempo e comprimento relacionadas a velocidade, energia, etc (ALMEIDA KOZEN, 2006), devem ser consideradas para obter uma solução apropriada do processo (VAZ, 2013). As simulações numéricas são ferramentas importantes para pesquisas científicas e otimização industrial, nas quais inúmeras são as técnicas numéricas aplicadas para tratar a turbulência, como: DNS (*Direct Numerical Simulation*), LES (*Large Eddy Simulation*) e RANS (*Reynolds Averaged Navier-Stokes*) (WARNATZ; MASS; DIBBLE, 2006), sendo que essas são as mais comuns e utilizadas atualmente.

Na simulação numérica DNS, a malha exigida deve ser fina o suficiente para obter a solução do problema em relação as pequenas escalas do fluxo e a estrutura interna das chamas (DE BORTOLI; ANDREIS, 2010). Como consequência, esta técnica exige um custo computacional muito alto, ficando inviável obter uma solução para casos com geometrias complexas e números de *Reynolds* elevados. Portanto, a técnica é empregada atualmente apenas para casos de escoamentos com geometria simples e com número de *Reynolds* moderados, sendo vista como uma boa ferramenta de validação para estas condições (CORRÊA, 2016).

Os modelos RANS propõem determinar uma solução para as equações de *Navier-*

*Stokes*, na qual as variáveis dependentes destas equações são decompostas em uma componente média mais uma parte flutuante, onde apenas as variáveis médias são resolvidas. Para a parte flutuante é necessário o uso de modelos de turbulência com um modelo de combustão turbulento para descrever a conversão das espécies químicas e a liberação de calor (ANDREIS, 2011; OLIVEIRA et al., 2014). Esta técnica oferece como vantagem a possibilidade de utilizar malhas mais grossas. Mas, como restrição não pode ser empregada para análise de estruturas mais finas, pois resolve apenas a média das variáveis das equações do balanço instantâneas, levando a resultados poucos precisos para estes casos.

A técnica de simulação em grandes escalas, denominada por LES, é um método intermediário entre DNS e RANS. Esse método consiste em separar as grandes escalas das pequenas por meio do processo de filtragem espacial ou temporal das equações de *Navier-Stokes*. Nesta, as maiores estruturas são resolvidas pela filtragem das equações e apenas as estruturas menores são modeladas fisicamente (POINSOT; VEYNANTE, 2001). A escala das pequenas estruturas é determinada pelo tamanho da malha usada para a solução das equações filtradas; desta forma as estruturas turbulentas, que são menores do que a resolução da malha, são modeladas pelos chamados modelos sub-malha (OLIVEIRA et al., 2014). Como as grandes escalas são resolvidas diretamente e as pequenas modeladas, os erros obtidos são menores, já que a transferência de energia ocorre das grandes para as pequenas escalas (CORRÊA, 2016). Através da LES é possível resolver escoamentos para elevados números de *Reynolds*, obtendo uma boa solução para o problema com menor custo computacional do que exigido pela DNS.

Estudos relacionados à combustão têm sido abordados por diversos autores como Liñan (1974), Peters e Göttgens (1991), Agrawal e Prasad (2003) que desenvolveram soluções analíticas para determinar a temperatura, velocidade, fração de mistura em chamas como pré-misturadas e as difusivas. Gokarn et al.(2006), Klein, Sadiki e Janicka (2003), Boersma e Lele (1999), Rawat, Pitsch e Ripoll (2002) se dedicaram no estudo de métodos numéricos para chamas. Também a parte de cinética química foi abordada por Lu e Law (2008), Westbrook (1985), Konnov (2009), Marinov, Westbrook e Pitz (1995), onde os mecanismos detalhados e reduzidos foram estudados contribuindo para a compreensão da combustão dos combustíveis.

Entender melhor e dominar os princípios que regem o processo de combustão é importante para obter avanços tecnológicos em áreas como das engenharias. Também, em processos industriais para minimizar a formação de subprodutos e substâncias poluentes decorrentes de processos químicos. Além disso, são relevantes para desenvolver combustíveis com mais qualidade e oferecer mais segurança e prevenção de acidentes de trabalhos em indústrias, plataformas e fábricas que lidam com produtos inflamáveis.

## 1.2 Objetivos

Um dos principais objetivos deste trabalho é modelar uma chama difusiva de hidrogênio, utilizando um mecanismo de reação química de apenas um passo e simular numericamente essa chama. Para isso, utilizam-se as equações reativas de *Navier-Stokes*, a fração de mistura para o escoamento e o modelo *Flamelet* para a parte química.

Dentre os objetivos específicos pretende-se:

- Aplicar a técnica *Flamelet* e LES nas equações governantes;
- Simular numericamente chamas difusivas de hidrogênio;
- Comparar e validar os resultados numéricos com dados encontrados na literatura.

## 1.3 Organização do Trabalho

Este trabalho está estruturado da seguinte forma: no capítulo 2 são abordadas definições e variáveis importantes na combustão, como também as equações governantes que são empregadas para simular numericamente uma chama difusiva de hidrogênio. Neste mesmo capítulo, também consta o processo de simplificação e adimensionalização das equações, assim como a modelagem da turbulência para o escoamento, na qual utiliza-se o método LES para o fluxo e o *Flamelet* para a estrutura química da chama.

A discretização das equações usando o método de diferenças finitas, a descrição do domínio do problema, suas características e as condições iniciais e de contorno empregadas são descritas no capítulo 3.

Os resultados obtidos são apresentados no capítulo 4, onde estes serão comparados com os resultados experimentais presentes na literatura. E no último capítulo consta as conclusões e perspectivas a serem realizadas no prosseguimento deste trabalho.

## 2 METODOLOGIA

Nesta seção são apresentados aspectos teóricos que são a base para entender o processo da combustão em chamas, como variáveis e equações. Todos os escoamentos são regidos por equações básicas denominadas de equações governantes, que determinam o comportamento do fluxo em relação à velocidade, densidade, temperatura, pressão, entre outras variáveis. A modelagem de uma chama difusiva e turbulenta é descrita pelas equações da conservação da massa, quantidade de movimento, energia, conservação da massa das espécies químicas e fração de mistura. É importante salientar que as equações governantes principais são abordadas na forma de notação vetorial, podendo ser utilizadas com qualquer sistema de coordenadas. São abordados também nesta seção, métodos numéricos para tratar a turbulência e processos de simplificações e adimensionalização necessários nas equações.

### 2.1 Definições e Variáveis

De acordo com Turns (2013), dois conceitos importantes e úteis para caracterizar a composição de uma mistura são as frações molares e mássicas que formam a mistura. Durante uma reação química, a massa dos elementos químicos é conservada, mas a massa das espécies não. Portanto, em uma reação química é importante e necessário verificar a conservação de massa dos elementos químicos por meio da estequiometria. Introduz-se, nesta subseção, as definições de fração molar, fração mássica, fração de mistura e estequiometria.

#### 2.1.1 Fração Molar

A fração molar é utilizada para definir a concentração das inúmeras espécies químicas presentes na mistura (VAZ, 2010). A fração molar  $X_k$  da espécie química  $k$  é expressa como sendo a fração do número de mols  $n_k$  da espécie química  $k$ , correspondente ao número total de mols  $n_{sis}$  contido no sistema, expresso por:

$$X_k = \frac{n_k}{n_{sis}}, \quad (1)$$

onde  $n_{sis}$  é determinado por:

$$n_{sis} = \sum_{k=1}^n n_k. \quad (2)$$

Também a fração molar pode ser expressa em relação à concentração molar da espécie ( $c_k$ ) e da mistura ( $c$ ), como

$$X_k = \frac{n_k}{n_{sis}} = \frac{c_k}{c} \quad (3)$$

onde  $c_k$  e  $c$  são definidos como o número de moles por unidade de volume, dados como:

$$c_k = \frac{n_k}{V}, \quad (4)$$

$$c = \frac{n_{sis}}{V} = \frac{1}{V} \sum_{k=1}^n n_k = \sum_{k=1}^n c_k. \quad (5)$$

### 2.1.2 Fração Mássica

A fração mássica  $Y_k$  da espécie  $k$  é a razão entre a massa da espécie química  $k$  e a massa total do sistema:

$$Y_k = \frac{m_k}{m}, \quad (6)$$

no qual  $m$  representa a soma das massas das inúmeras espécies químicas contidas no sistema, dada por:

$$m = \sum_{k=1}^n m_k. \quad (7)$$

A massa  $m_k$  da espécie  $k$  é determinada por:

$$m_k = (MW_k)n_k, \quad (8)$$

em que  $MW_k$  é a massa molar da espécie  $k$ .

A soma total das frações molares e das frações mássicas de todas as espécies químicas presentes no sistema devem ser unitárias, isto é,

$$\sum_{k=1}^n X_k = 1, \quad \sum_{k=1}^n Y_k = 1. \quad (9)$$

As frações molares e as frações mássicas são facilmente convertidas de uma para outra usando as massas molares das espécies químicas  $k$  (TURNS, 2013):

$$Y_k = X_k \left( \frac{MW_k}{MW} \right), \quad (10)$$

$$X_k = Y_k \left( \frac{MW}{MW_k} \right), \quad (11)$$

na qual a massa molar total  $MW$  é calculada por:

$$MW = \sum_{k=1}^n X_k (MW_k), \quad (12)$$

$$MW = \frac{1}{\sum_{k=1}^n (Y_k / MW_k)}. \quad (13)$$

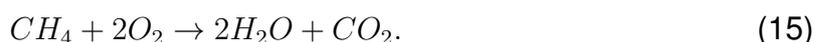
### 2.1.3 Estequiometria

A estequiometria é o cálculo que permite relacionar quantidades de reagentes e produtos que participam de uma reação química. Uma equação de reação química pode ser representada de forma genérica como:

$$\sum_{k=1}^n \nu'_k M_k = \sum_{k=1}^n \nu''_k M_k \quad (14)$$

onde  $M_k$  representa o símbolo químico da espécie  $k$ ,  $\nu'_k$  e  $\nu''_k$  são os coeficientes estequiométricos do reagente e produto, respectivamente, e  $n$  é o número total de espécies químicas no sistema.

Pelo princípio de *Lavoisier*, os elementos químicos não podem ser criados e nem destruídos durante uma reação química, portanto, a conservação dos elementos químicos deve ser sempre satisfeita (LAW, 2006). Como exemplo, tem-se a reação do metano com o oxigênio que produz água e dióxido de carbono,



A equação anterior está estequiometricamente balanceada, e seus coeficientes estequiométricos são apresentados na Tabela 2.

Tabela 2: Coeficientes estequiométricos da reação (15)

$k$	Espécie química	$\nu'_k$	$\nu''_k$
1	$CH_4$	1	0
2	$O_2$	2	0
3	$H_2O$	0	2
4	$CO_2$	0	1

Fonte: Elaboração do autor

O coeficiente estequiométrico líquido é determinado por

$$\nu_k = \nu_k'' - \nu_k' \quad (16)$$

sendo positivo para produtos e negativo para reagentes (PETERS, 1992).

Uma das características da estequiometria é descrever a produção molar e o consumo de cada espécie de uma reação química. A variação do número de moles da espécie  $k$  para a espécie 1 é expressa por:

$$\frac{dn_k}{\nu_k} = \frac{dn_1}{\nu_1} \quad (17)$$

Pela equação (8), tem-se que  $n_k = m_k/MW_k$ , aplicando  $n_k$  na equação (17) obtém-se:

$$\frac{dm_k}{\nu_k(MW_k)} = \frac{dm_1}{\nu_1(MW_1)} \quad (18)$$

que estabelece a relação entre as massas parciais.

No sistema a massa total não depende da reação química, assim a relação entre as frações de massa é

$$\frac{dY_k}{\nu_k(MW_k)} = \frac{dY_1}{\nu_1(MW_1)} \quad (19)$$

Tem-se uma mistura oxidante-combustível (ou ar-combustível), quando a quantidade de oxidante e combustível é tal que ambas são completamente consumidas, restando como produto deste processo apenas  $CO_2$  e  $H_2O$  (KUO, 2005).

#### 2.1.4 Fração de Mistura

A fração de mistura é uma variável extremamente útil na combustão, principalmente para a combustão com chamas difusivas (PETERS, 1992). Considere um sistema homogêneo, onde uma corrente de combustível com fluxo de massa  $\dot{m}_1$  se mistura com uma corrente de oxidante com fluxo  $\dot{m}_2$ , a fração de mistura é dada por:

$$Z = \frac{\dot{m}_1}{\dot{m}_1 + \dot{m}_2} \quad (20)$$

A fração de massa do combustível na mistura não queimada  $Y_{F,a}$  é proporcional à fração de massa do combustível original  $Y_{F,1}$ , portanto:

$$Y_{F,a} = Y_{F,1}Z \quad (21)$$

Pode-se determinar a fração de massa do oxidante na mistura não queimada  $Y_{O_2,a}$

por meio da expressão seguinte:

$$Y_{O_2,a} = Y_{O_2,2}(1 - Z), \quad (22)$$

onde  $Y_{O_2,2}$  representa a fração mássica inicial do oxidante.

A fração de mistura pode ser expressa como função da fração de massa do combustível e do oxidante, assim:

$$Z = \frac{\nu_{st}Y_F - Y_{O_2} + Y_{O_2,2}}{\nu_{st}Y_{F,1} + Y_{O_2,2}}, \quad (23)$$

em que  $\nu_{st}$  é denominado de razão de massa estequiométrica, dada por:

$$\nu_{st} = \frac{\nu_{O_2}(MW_{O_2})}{\nu_F(MW_F)}. \quad (24)$$

Para uma mistura estequiométrica, tem-se  $Y_{O_2} = \nu_{st}Y_F$ , onde a fração de mistura estequiométrica é escrita como:

$$Z_{st} = \left[ 1 + \frac{\nu_{st}Y_{F,1}}{Y_{O_2,2}} \right]^{-1}. \quad (25)$$

Quando  $Z < Z_{st}$ , significa que existe mais oxidante na mistura do que combustível, então a mistura é pobre em combustível. Assim, a combustão termina quando todo o combustível é consumido (queimado),  $Y_{F,b} = 0$ . A fração de massa do oxidante restante ao final da combustão é calculada por:

$$Y_{O_2,b} = Y_{O_2,2} \left( 1 - \frac{Z}{Z_{st}} \right), \quad Z < Z_{st}. \quad (26)$$

A mistura é rica em combustível para  $Z \geq Z_{st}$ , nesse caso a quantidade de oxidante é insuficiente para que ocorra a combustão completa do combustível. Logo, a combustão termina quando todo o oxidante for queimado,  $Y_{O_2,b} = 0$ . Assim pode-se calcular a fração mássica do combustível restante por:

$$Y_{F,b} = Y_{F,1} \left( \frac{Z - Z_{st}}{1 - Z_{st}} \right), \quad Z \geq Z_{st}. \quad (27)$$

Para facilitar a resolução de sistemas de equações, utiliza-se a fração de mistura ao invés da fração mássica, pois a partir da fração de mistura determinam-se as frações mássicas dos componentes presentes em uma reação global (PEREIRA, 2012).

## 2.2 Equações Governantes

Nesta seção aborda-se todas as equações básicas para a simulação de uma chama difusiva turbulenta. Também métodos para modelar a turbulência presente no escoamento, como a técnica LES e *Flamelet*, são tratados aqui.

### 2.2.1 Conservação da Massa

Durante o processo de combustão a massa não pode ser criada e nem destruída, ou seja, a massa permanece constante, conservando sua propriedade. A conservação da massa para qualquer espécie química  $k$  pode ser escrita como (LAW, 2006):

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho_k dV = \int_V \dot{w}_k dV. \quad (28)$$

O lado esquerdo é a variação temporal da massa da espécie  $k$  dentro do volume  $V$  e o lado direito é a taxa de formação ou consumo da espécie  $k$  pela reação química. Admitindo que a massa específica ( $\rho_k$ ) e a taxa de reação ( $\dot{w}_k$ ) da espécie  $k$  são funções contínuas das variáveis termodinâmicas, temporais e espaciais, a taxa da massa total da reação para todas as espécies  $k = 1, 2, \dots, n$  deve satisfazer:

$$\sum_{k=1}^n \dot{w}_k = 0. \quad (29)$$

Isto significa que apesar da massa de cada espécie estar variando, a massa total permanece constante (ALMEIDA KOZEN, 2006). Utilizando o teorema do divergente no primeiro termo da equação (28), obtém-se:

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho_k dV = \int_V \left( \frac{d\rho_k}{dt} + \rho_k \nabla \cdot u_k \right) dV, \quad (30)$$

substituindo a equação (30) em (28), fica-se com:

$$\int_V \left( \frac{d\rho_k}{dt} + \rho_k \nabla \cdot u_k \right) dV = \int_V \dot{w}_k dV \quad (31)$$

$$\int_V \left( \frac{d\rho_k}{dt} + \rho_k \nabla \cdot u_k - \dot{w}_k \right) dV = 0 \quad (32)$$

onde  $u_k$  é o vetor velocidade da espécie  $k$  e  $d/dt$  é a derivada material em relação a espécie  $k$ . Esta equação deve ser válida para qualquer volume  $V$ , assim:

$$\frac{d\rho_k}{dt} + \rho_k \nabla \cdot u_k - \dot{w}_k = 0. \quad (33)$$

A derivada material em relação à velocidade da espécie é:

$$\frac{d\rho_k}{dt} = \frac{\partial\rho_k}{\partial t} + u_k \cdot \nabla\rho_k, \quad (34)$$

assim a equação da conservação da massa da espécie química  $k$  pode ser escrita na forma conservativa como:

$$\frac{\partial\rho_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_k u_k) = \dot{w}_k. \quad (35)$$

A velocidade média é determinada por:

$$v = \frac{1}{\rho} \sum_{k=1}^n \rho_k u_k. \quad (36)$$

Somando-se as  $n$  equações em (35), obtém-se a equação da conservação da massa total, portanto:

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\vec{v}) = 0. \quad (37)$$

É possível também representar a equação anterior usando a derivada material  $D/Dt$ . Assim a equação da conservação da massa pode ser reescrita como:

$$\frac{D\rho}{Dt} + (\nabla \cdot \vec{v})\rho = 0. \quad (38)$$

### 2.2.2 Quantidade de Movimento

A equação da quantidade de movimento é estabelecida basicamente pelo princípio da conservação da quantidade de movimento. Este define que a variação da quantidade de movimento no volume  $V$  seja igual a soma das forças de volume e das forças de superfície (ALMEIDA KOZEN, 2006), portanto:

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho\vec{v} dV = \int_V \rho \sum_k Y_k \vec{f}_k dV + \int_S \vec{\sigma} \cdot \vec{\eta} dS, \quad (39)$$

em que  $\vec{f}_k$  é a força externa sobre a espécie  $k$ ,  $\vec{\sigma}$  é o tensor de tensão e  $\vec{\eta}$  é o vetor unitário exterior a superfície  $S$  no volume fixo  $V$ .

A derivada total do primeiro termo da equação pode ser colocada para dentro da integral, pois o domínio de integração não muda com relação ao tempo porque o volume é fixo.

$$\int_V \frac{d}{dt} \rho\vec{v} dV = \int_V \rho \sum_k Y_k \vec{f}_k dV + \int_S \vec{\sigma} \cdot \vec{\eta} dS. \quad (40)$$

Aplicando o teorema da divergência de Gauss para transformar o terceiro termo da

equação anterior em uma integral de volume, obtém-se:

$$\int_V \rho \frac{dv_i}{dt} dV = \int_V \rho \sum_k Y_k f_{ki} dV + \int_V \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} dV, \quad (41)$$

$$\int_V \rho \frac{dv_i}{dt} dV = \int_V \left( \rho \sum_k Y_k f_{ki} + \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} \right) dV. \quad (42)$$

Como o volume é arbitrário, o integrando deve ser nulo, portanto:

$$\rho \frac{dv_i}{dt} = \rho \sum_k Y_k f_{ki} + \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j}. \quad (43)$$

Considerando um fluido *newtoniano*, o tensor de tensão é expresso como:

$$\sigma_{ij} = \tau_{ij} - p\delta_{ij}, \quad (44)$$

em que  $\tau_{ij}$  é o tensor viscoso,  $p$  é a pressão estática e  $\delta_{ij}$  é a função delta de *Kronecker* ( $\delta_{ij} = 1$  para  $i = j$  e  $\delta_{ij} = 0$  para  $i \neq j$ ).

O tensor viscoso é dado por (POINSOT; VEYNANTE, 2001):

$$\tau_{ij} = \mu \left( \frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \mu \left( \frac{\partial v_k}{\partial x_k} \right) \delta_{ij}, \quad (45)$$

onde  $\mu$  é a viscosidade dinâmica.

Substituindo (44) em (43), tem-se a equação da quantidade de movimento:

$$\frac{\partial \rho v_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho v_i v_j}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} + \rho \sum_k Y_k f_{ki}, \quad (46)$$

ou

$$\frac{\partial \rho v_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho v_i v_j}{\partial x_j} = \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} + \rho \sum_k Y_k f_{ki}. \quad (47)$$

### 2.2.3 Conservação da Massa das Espécies Químicas

A equação da conservação da massa das espécies é dada por (CALEGARI, 2012):

$$\frac{\partial \rho_k}{\partial t} + \frac{\partial \dot{m}_{k,i}}{\partial x_i} = \dot{w}_k \quad (48)$$

em que  $\dot{m}_{k,i}$  é o fluxo de massa da espécie, expresso por:

$$\dot{m}_{k,i} = \rho Y_k \vec{v}_k, \quad (49)$$

sendo  $\vec{v}_k$  a velocidade da espécie  $k$ .

O termo  $\rho_k$  da massa específica da espécie química  $k$  é:

$$Y_k = \frac{\rho_k}{\rho}. \quad (50)$$

Substituindo as equações (49) e (50) na equação (48) obtém-se:

$$\frac{\partial(\rho Y_k)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho Y_k v_{k,i})}{\partial x_i} = \dot{w}_k. \quad (51)$$

Conforme Law (2006) existem duas fontes que podem causar mudanças na massa da espécie  $k$ . A primeira é de natureza volumétrica, causada pela presença de reação química representado pela taxa de produção de  $k$  por unidade de volume,  $\dot{w}_k$ . A segunda é um processo de superfície, devido a difusão através da superfície de controle quando não existe uniformidade espacial na concentração de  $k$ . Este transporte difusivo é efetuado através da colisão molecular e sua magnitude é proporcional ao fluxo de massa  $\rho_k Y_k v_{k,i}$  do movimento aleatório molecular.

Utilizando a velocidade de difusão da espécie  $k$  descrita por Law (2006), a qual é obtida pela diferença da velocidade da espécie química  $\vec{v}_k$  e a velocidade do escoamento  $\vec{v}$ , dada por:

$$\vec{V}_k = \vec{v}_k - \vec{v} \quad (52)$$

e substituindo a equação (52) na equação (51), tem-se:

$$\frac{\partial(\rho Y_k)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} [\rho Y_k (v_i + V_{k,i})] = \dot{w}_k. \quad (53)$$

O termo  $V_{k,i} Y_k$  é expresso da seguinte forma (POINSOT; VEYNANTE, 2001):

$$V_{k,i} Y_k = -D_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_i}. \quad (54)$$

onde  $D_k$  é o coeficiente de difusão da espécie.

Fazendo a substituição da equação (54) na (53), a equação da conservação da massa para as espécies químicas pode ser reescrita como:

$$\rho \frac{\partial Y_k}{\partial t} + \rho v_i \frac{\partial Y_k}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \rho D_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_i} \right) + \dot{w}_k, \quad (55)$$

$$\rho \frac{\partial Y_k}{\partial t} + \rho v_i \frac{\partial Y_k}{\partial x_i} = \rho D_k \left( \frac{\partial^2 Y_k}{\partial x_i \partial x_i} \right) + \dot{w}_k, \quad i = 1, 2, 3. \quad (56)$$

A fração de mistura é um escalar conservativo, quimicamente independente (PETERS, 2004), por isso sua equação não apresenta o termo da taxa de reação porque

os elementos químicos são preservados durante a combustão. Desta forma, tem-se:

$$\rho \left( \frac{\partial Z}{\partial t} + v_i \frac{\partial Z}{\partial x_i} \right) = \rho D_k \left( \frac{\partial^2 Z}{\partial x_i \partial x_i} \right). \quad (57)$$

As equações (56) e (57) podem ser expressas por meio da derivada material como:

$$\rho \frac{DY_k}{Dt} = \nabla \left( \rho D_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_i} \right) + \dot{w}_k, \quad (58)$$

$$\rho \frac{DZ}{Dt} = \nabla \left( \rho D_k \frac{\partial Z}{\partial x_i} \right). \quad (59)$$

#### 2.2.4 Conservação da Energia

Uma das leis mais fundamentais da natureza é a primeira lei da termodinâmica ou princípio da conservação de energia, que oferece uma base sólida para o estudo das relações e interações entre as diversas formas de energia (ÇENGEL; CIMBALA, 2007).

A energia não pode ser criada e nem destruída, ela apenas muda de forma, assim durante um processo todas as partes da energia devem ser consideradas, principalmente em fenômenos relacionados a combustão.

O princípio da conservação de energia aplicado em um volume afirma que a variação da energia total ( $e_t$ ) é igual a transferência de calor ( $C$ ) e a taxa do trabalho realizado ( $W$ ), sendo que a energia total é a soma da energia interna, a cinética e a potencial. Assim, a equação da conservação da energia total é escrita como:

$$\rho \frac{De_t}{Dt} = C + W \quad (60)$$

na qual o termo  $C$  contém os efeitos das fontes de calor sobre a energia total, assim:

$$C = -\frac{\partial q_i}{\partial x_i} + Q \quad (61)$$

onde  $q_i$  é o fluxo de calor e  $Q$  a taxa de transferência de calor devido à radiação.

O fluxo de calor  $q_i$  é determinado por:

$$q_i = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} + \rho \sum_{k=1}^n h_k Y_k V_{ki}, \quad (62)$$

sendo que o primeiro termo no lado direito da equação (62) representa a difusão de calor expresso pela lei de *Fourier* e o segundo termo a difusão das espécies com diferentes entalpias<sup>1</sup> (POINSOT; VEYNANTE, 2001).

<sup>1</sup>Grandeza física definida como a energia máxima de um sistema termodinâmico, que pode ser

O trabalho realizado é dado por:

$$W = \frac{\partial(\sigma_{ij}v_i)}{\partial x_j} + \rho \sum_{k=1}^n Y_k f_{ki}(v_i + V_{ki}), \quad (63)$$

ou seja, é a soma das tensões viscosas e a pressão mais a potência produzida pela força de volume  $f_k$  na espécie  $k$ .

Substituindo a equação (61) e (63) em (60), obtém-se:

$$\rho \frac{De_t}{Dt} = -\frac{\partial q_i}{\partial x_i} + \frac{\partial(\sigma_{ij}v_i)}{\partial x_j} + Q + \rho \sum_{k=1}^n Y_k f_{ki}(v_i + V_{ki}). \quad (64)$$

Por meio da relação entre a energia e a entalpia,  $e_t = h_t - p/\rho$ , juntamente com a equação da conservação da massa, tem-se:

$$\rho \frac{De_t}{Dt} = \rho \frac{Dh_t}{Dt} - \frac{Dp}{Dt} - p \frac{\partial v_i}{\partial x_i}. \quad (65)$$

Aplicando a equação (65) na equação (64), tem-se a equação da conservação para a entalpia total, como:

$$\rho \frac{Dh_t}{Dt} = \frac{\partial p}{\partial t} - \frac{\partial q_i}{\partial x_i} + \frac{\partial(\tau_{ij}v_i)}{\partial x_j} + Q + \rho \sum_{k=1}^n Y_k f_{ki}(v_i + V_{ki}) \quad (66)$$

A equação de conservação para a energia cinética ( $\frac{1}{2}v_i v_i$ ) é obtida quando multiplica-se a equação (47) por  $v_i$ , assim:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{1}{2} \rho v_i v_i \right) + \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \frac{1}{2} \rho v_i v_i v_j \right) = v_i \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} + \rho \sum_{k=1}^n Y_k f_{ki} v_i. \quad (67)$$

Subtraindo a equação (67) da equação (64), tem-se a equação da energia interna ( $e$ ):

$$\rho \frac{De}{Dt} = -\frac{\partial q_i}{\partial x_i} + \sigma_{ij} \frac{\partial v_i}{\partial x_j} + Q + \rho \sum_{k=1}^n Y_k f_{ki} V_{ki}, \quad (68)$$

notando que  $e_t = e + (v_i v_i / 2)$ .

A equação para a entalpia  $h$  é fornecida por:

$$\rho \frac{Dh}{Dt} = \frac{Dp}{Dt} - \frac{\partial q_i}{\partial x_i} + \tau_{ij} \frac{\partial v_i}{\partial x_j} + Q + \rho \sum_{k=1}^n Y_k f_{ki} V_{ki} \quad (69)$$

---

removida deste sob forma de calor. A variação da entalpia corresponde ao calor envolvido em transformações que ocorrem a uma dada pressão constante.

onde  $\rho \frac{Dh}{Dt}$  foi expresso em relação a  $h = e + \frac{p}{\rho}$ , como:

$$\rho \frac{Dh}{Dt} = \rho \frac{De}{Dt} + \frac{Dp}{Dt} + p \frac{\partial v_i}{\partial x_i}. \quad (70)$$

Substituindo  $h_s$  por  $h$  na equação (70) e pela definição que  $h_s = h - \sum_{k=1}^n \Delta h_{fk}^0 Y_k$ , onde  $\Delta h_{fk}^0$  é a entalpia de formação da espécie química  $k$ , tem-se:

$$\begin{aligned} \rho \frac{Dh_s}{Dt} = \dot{w}_T + \frac{Dp}{Dt} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) - \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \rho \sum_{k=1}^n h_{sk} Y_k V_{ki} \right) \\ + \tau_{ij} \frac{\partial v_i}{\partial x_j} + Q + \rho \sum_{k=1}^n Y_k f_{ki} V_{ki} \end{aligned} \quad (71)$$

onde  $\dot{w}_T$  é devido à liberação de calor pela reação, sendo expresso por:

$$\dot{w}_T = - \sum_{k=1}^n \Delta h_{fk}^0 \dot{w}_k. \quad (72)$$

Da derivada de  $h_s = \sum_{k=1}^n h_{sk} Y_k$ , obtém-se:

$$\rho \frac{Dh_s}{Dt} = \sum_{k=1}^n h_{sk} \rho \frac{DY_k}{Dt} + \rho C_p \frac{DT}{Dt}, \quad (73)$$

onde  $h_{sk}$  é a entalpia sensível da espécie  $k$ .

Substituindo (73) em (71) tem-se:

$$\begin{aligned} \rho C_p \frac{DT}{Dt} = \dot{w}'_T + \frac{Dp}{Dt} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) - \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \rho \sum_{k=1}^n C_{pk} Y_k V_{ki} \right) \frac{\partial T}{\partial x_i} \\ + \tau_{ij} \frac{\partial v_i}{\partial x_j} + Q + \rho \sum_{k=1}^n Y_k f_{ki} V_{ki}. \end{aligned} \quad (74)$$

Observe que o termo  $\dot{w}'_T$  não é igual a  $\dot{w}_T$ :

$$\dot{w}'_T = - \sum_{k=1}^n h_{sk} \dot{w}_k - \sum_{k=1}^n \Delta h_{fk}^0 \dot{w}_k, \quad (75)$$

ambos os termos são devido à liberação de calor, diferindo apenas por uma pequena quantidade devida à contribuição da entalpia sensível,  $h_{sk}$ . Esses termos são iguais quando as capacidades de calor  $C_{pk}$  são supostamente iguais.

## 2.3 Equações Governantes Simplificadas

Em muitos problemas é necessário realizar algumas simplificações nas equações governantes ou desconsiderar algumas variáveis que não são muito importantes para obter a solução. No caso do fenômeno da combustão, existem inúmeras variáveis envolvidas no processo; como já mencionado anteriormente, tem-se a presença da força da gravidade, das forças externas, da radiação, da pressão, entre outras.

Na equação (47), assume-se que as forças externas são desconsideradas, assim ela torna-se:

$$\frac{\partial \rho v_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho v_i v_j}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j}. \quad (76)$$

O termo da taxa de reação da equação (56) é aproximado como:

$$\dot{w}_k = \pm \nu_k (MW_k) A \left( \frac{\rho Y_F}{MW_F} \right) \left( \frac{\rho Y_O}{MW_O} \right) \exp \left( \frac{-E}{RT} \right), \quad (77)$$

sendo positivo para o produto e negativo para o combustível e o oxidante. O termo  $A$  é o fator de frequência,  $E$  a energia de ativação (quantidade mínima de energia para iniciar uma reação química) (CHANG; GOLDSBY, 2013),  $R$  a constante universal dos gases. Por meio da equação (77) é possível calcular a variação da velocidade de uma reação química com a temperatura (VAZ, 2010). O termo exponencial em (77), conhecida como exponencial de *Arrhenius*, depende fortemente da temperatura que modifica consideravelmente a densidade, afetando a estabilidade de um procedimento numérico (DE BORTOLI, 2009).

O termo da radiação na equação (74) pode ser desconsiderado, pois este só é importante em casos onde ocorrem grandes perdas de calor em relação aos contornos do domínio (LAW, 2006). A pressão é considerada constante, assim a derivada temporal da pressão é negligenciada, como também o termo de dissipação viscosa devido ao número de *Mach* apresentar uma razão pequena.

Considerando que todas as espécies presentes na reação química tenham capacidades de calor iguais, que não há presença de forças externas, a equação para a conservação da energia é dada por:

$$\rho C_p \frac{DT}{Dt} = \dot{w}'_T + \frac{\partial}{\partial x} \left( \lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right), \quad (78)$$

ou

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} + \rho C_p v_i \frac{\partial T}{\partial x_i} = \lambda \frac{\partial^2 T}{\partial x_i \partial x_i} + \dot{w}'_T \quad (79)$$

em que  $\lambda = \rho C_p D_k$ .

Portanto, as equações governantes para o problema de uma chama difusiva de hidrogênio são, respectivamente, a equação da quantidade de movimento (76), da

fração mássica das espécies (56), da fração de mistura (57) e conservação da energia (79), considerando um escoamento compressível e com número de *Mach* baixo.

## 2.4 Modelagem da Turbulência

A maioria dos escoamentos que ocorrem na natureza são turbulentos. Há muitas oportunidades para observar fluxos turbulentos em nosso cotidiano, como a fumaça de uma chaminé, a água de um rio ou cachoeira. Ao observar uma cachoeira, nota-se que o fluxo é instável, irregular, aparentemente caótico e certamente o movimento de cada turbilhão ou gota é imprevisível (POPE, 2000). A turbulência é uma propriedade do escoamento e não do fluido (SCHIESTEL, 2008), e é considerada um fenômeno altamente complexo, na qual encontra-se presente uma ampla variedade de escalas temporais e espaciais (PEREIRA, 2006).

Não existe uma definição precisa de turbulência em fluidos, nem uma teoria geral sobre. Por isso, a turbulência é descrita por inúmeras características como difusão, irregularidade, rotacionalidade, vorticidade, tridimensionalidade, números de *Reynolds* elevados e multiplicidade de escalas (SCHIESTEL, 2008). Em fluxos que são originalmente laminares, o regime turbulento surge de instabilidades que se desenvolvem com o aumento do número de *Reynolds*, apresentando um movimento caótico com uma grande capacidade de mistura e dissipação. A instabilidade e a rotacionalidade está relacionada diretamente com os termos não lineares presentes nas equações de *Navier-Stokes*.

A variedade de escalas existentes no escoamento turbulento são classificadas em grandes e pequenas escalas. As grandes escalas contêm um nível maior de energia cinética turbulenta, possuem baixa frequência e apresentam tamanho comparável à dimensão característica do sistema no qual ocorre o escoamento (PEREIRA, 2006; PETERS, 2004). Nas pequenas escalas predominam as forças da viscosidade, responsáveis pelos efeitos de dissipação da energia no fluido.

As menores escalas dissipativas que podem ocorrer em um escoamento turbulento foram definidas por *Kolmogorov*, no qual se baseou na hipótese de que turbilhões de maior tamanho transferem energia aos turbilhões menores e estes aos turbilhões de tamanho ainda menores (PEREIRA, 2012). Esse processo de transferência contínua de energia dos turbilhões maiores para os menores acontece até que a energia dos turbilhões com o menor tamanho seja dissipada pelas forças viscosas na forma de calor.

As escalas de turbulência envolvem grandezas como comprimento, tempo, velocidade e energia, que são utilizadas para determinar as escalas de *Kolmogorov*. As escalas de *Kolmogorov* para o comprimento ( $l_\kappa$ ), tempo ( $t_\kappa$ ) e velocidade ( $v_\kappa$ ) são des-

critas como:

$$l_{\kappa} = \left( \frac{\nu^3}{\epsilon} \right)^{1/4}, \quad (80)$$

$$t_{\kappa} = \left( \frac{\nu}{\epsilon} \right)^{1/2}, \quad (81)$$

$$v_{\kappa} = (\nu\epsilon)^{1/4}, \quad (82)$$

onde  $\epsilon$  é a taxa de dissipação viscosa e  $\nu$  a viscosidade cinemática do fluido.

Segundo Souza et al. (2011), para escoamentos completamente desenvolvidos a taxa de dissipação viscosa ( $\epsilon$ ) nas pequenas escalas é igual à taxa na qual a energia, por unidade de massa, é suprida aos grandes vórtices pelo escoamento médio (grandes escalas). Assim a taxa de dissipação viscosa ( $\epsilon$ ) é:

$$\epsilon \approx \frac{U^2}{t} = \frac{U^3}{L}, \quad (83)$$

onde  $U$  e  $L$  são as escalas características de velocidade e comprimento do escoamento e  $t = L/U$ .

A equação (83) permite estabelecer uma relação entre as pequenas e grandes escalas de turbulência (SOUZA et al., 2011). Substituindo (83) em (80), (81) e (82) tem-se as seguintes equações:

$$l_{\kappa} = \left( \frac{\nu^3}{\epsilon} \right)^{1/4} = \left( \frac{\nu^3 L}{U^3} \right)^{1/4} = \frac{L}{Re^{3/4}}, \quad (84)$$

$$t_{\kappa} = \left( \frac{\nu}{\epsilon} \right)^{1/2} = \left( \frac{\nu L}{U^3} \right)^{1/2} = \frac{t}{Re^{1/2}}, \quad (85)$$

$$v_{\kappa} = (\nu\epsilon)^{1/4} = \left( \frac{\nu^3 U^3}{L} \right)^{1/4} = \frac{U}{Re^{1/4}}. \quad (86)$$

Nota-se que as escalas dos menores vórtices da turbulência são muito menores do que aquelas dos grandes vórtices e, esta diferença é maior conforme o número de *Reynolds* aumenta. Nas pequenas escalas de *Kolmogorov* o número de *Reynolds* é unitário e expresso por  $Re_{\kappa} = (v_{\kappa} l_{\kappa})/\nu$ , confirmando que os efeitos viscosos passam a dominar os efeitos de inércia (VAZ, 2013).

Considerando as escalas de *Kolmogorov* para a vorticidade e energia dadas por:

$$\omega_{\kappa} = \left( \frac{\epsilon}{\nu} \right)^{1/2}, \quad (87)$$

$$e_{\kappa} = (\nu\epsilon)^{1/2}, \quad (88)$$

e observando as equações (84), (85) e (86), percebe-se que as pequenas escalas têm mais vorticidade e que as grandes escalas possuem mais energia.

## 2.5 Simulação em Grandes Escalas

Uma das ferramentas numéricas atuais mais viável e promissora para simular fluxos realistas de turbulência e transição é a simulação em grandes escalas (LES)(ZHIYIN, 2015). Nesta, os movimentos das grandes escalas de fluxo turbulento são calculados diretamente e apenas os movimentos das pequenas escalas são modelados, resultando em uma redução significativa no custo computacional se comparado ao DNS. O LES também é mais preciso e eficiente do que o método RANS, uma vez que os grandes turbilhões contêm a maior parte da energia turbulenta e são responsáveis pela maior parte da transferência de momento e mistura, e o LES captura esses turbilhões com mais detalhes, enquanto eles são modelados na abordagem RANS.

A simulação de grandes escalas consiste em separar as grandes escalas das menores pelo processo de filtragem das equações do balanço, onde as variáveis dependentes são expressas como a soma entre uma componente média e uma flutuação. No processo de filtragem normalmente são utilizadas as médias de *Reynolds* e de *Favre* para decompor uma variável dependente.

Considerando uma variável  $f$ , pela média de *Reynolds* esta é decomposta em uma parte filtrada ou média  $\bar{f}$  e uma flutuação  $f'$ , como:

$$f = \bar{f} + f', \quad (89)$$

sendo que esta decomposição apresenta as seguintes propriedades:

$$\begin{aligned} \overline{f'} &= 0, \\ \overline{\bar{f}} &= \bar{f}, \\ \frac{\partial \bar{f}}{\partial x} &= \frac{\partial(\bar{f}+f')}{\partial x} = \frac{\partial \bar{f}}{\partial x}, \\ \int f dx &= \int (\bar{f} + f') dx = \int \bar{f} dx. \end{aligned} \quad (90)$$

A média de *Favre* é aplicada com a finalidade de separar as flutuações turbulentas do fluxo médio. Como na combustão os escoamentos apresentam grandes mudanças na densidade, é comum introduzir uma média ponderada pela densidade  $\tilde{f}$  e uma flutuação  $f''$ .

A variável  $f$  é decomposta assim:

$$f = \tilde{f} + f'' \quad (91)$$

e suas propriedades são:

$$\begin{aligned}\overline{\rho f} &= \bar{\rho} \tilde{f}, \\ \overline{\rho f''} &\cong 0, \\ \overline{\rho \tilde{f}} &= \bar{\rho} \tilde{f}, \\ \overline{\rho f \tilde{f}} &= \bar{\rho} \tilde{f} \tilde{f}.\end{aligned}\tag{92}$$

É importante enfatizar que a média de *Favre* é somente uma manipulação matemática e não possui significado físico. Esta elimina o termo com as flutuações de densidade nas equações médias de *Reynolds*, mas não remove os efeitos dessas flutuações na turbulência (SOUZA, 2015).

### 2.5.1 Equações governantes filtradas espacialmente

Processos de filtragem podem ser tanto temporais como espaciais, mas nas simulações de escoamentos turbulentos via LES, utiliza-se apenas a operação de filtragem espacial, porque a simulação do escoamento é um processo de marcha no tempo (PEREIRA, 2006).

Empregando as médias e suas propriedades nas equações da quantidade de movimento (76), da fração mássica das espécies (56), da fração de mistura (57) e conservação da energia (79), o conjunto dessas equações é dado por:

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{v}_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{v}_i\tilde{v}_j)}{\partial x_j} = -\frac{\partial\bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial\bar{\tau}_{ij}}{\partial x_j} - \frac{\partial}{\partial x_j}[\bar{\rho}(\widetilde{v_i v_j} - \tilde{v}_i\tilde{v}_j)],\tag{93}$$

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{Y}_k)}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{v}_i\tilde{Y}_k)}{\partial x_i} = \frac{\partial^2(\bar{\rho}\bar{D}_k\tilde{Y}_k)}{\partial x_i\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_i}[\bar{\rho}(\widetilde{v_i Y_k} - \tilde{v}_i\tilde{Y}_k)] + \bar{w}_k,\tag{94}$$

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{Z})}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{v}_i\tilde{Z})}{\partial x_i} = \frac{\partial^2(\bar{\rho}\bar{D}_k\tilde{Z})}{\partial x_i\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_i}[\bar{\rho}(\widetilde{v_i Z} - \tilde{v}_i\tilde{Z})],\tag{95}$$

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{T})}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{v}_i\tilde{T})}{\partial x_i} = \frac{\partial^2(\bar{\lambda}/C_p\tilde{T})}{\partial x_i\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_i}[\bar{\rho}(\widetilde{v_i T} - \tilde{v}_i\tilde{T})] + \frac{1}{C_p}\bar{w}'_T.\tag{96}$$

As equações anteriores precisam de modelos de fechamento para as quantidades indefinidas, como o tensor de *Reynolds*  $\bar{\rho}(\widetilde{v_i v_j} - \tilde{v}_i\tilde{v}_j)$ , o fluxo das espécies  $\bar{\rho}(\widetilde{v_i Y_k} - \tilde{v}_i\tilde{Y}_k)$ , mistura  $\bar{\rho}(\widetilde{v_i Z} - \tilde{v}_i\tilde{Z})$  e de calor  $\bar{\rho}(\widetilde{v_i T} - \tilde{v}_i\tilde{T})$ . Esses termos são escritos usando modelos de viscosidade turbulenta (ANDREIS, 2011). Assim:

$$\bar{\rho}(\widetilde{v_i v_j} - \tilde{v}_i\tilde{v}_j) = -\sigma_{ij}^{sgs},\tag{97}$$

$$\bar{\rho}(\widetilde{v_i Y_k} - \tilde{v}_i\tilde{Y}_k) = -\bar{\rho}D_t \frac{\partial\tilde{Z}}{\partial x_i},\tag{98}$$

$$\bar{\rho}(\widetilde{v_i Z} - \widetilde{v_i} \widetilde{Z}) = -\bar{\rho} D_t \frac{\partial \widetilde{Y}_k}{\partial x_i}, \quad (99)$$

$$\bar{\rho}(\widetilde{v_i T} - \widetilde{v_i} \widetilde{T}) = -\bar{\rho} D_t \frac{\partial \widetilde{T}}{\partial x_i}, \quad (100)$$

sendo  $D_t$  a difusividade turbulenta e  $\sigma_{ij}^{sgs}$  tensor de *Smagorinsky*.

Uma das primeiras medidas a ser adotada é aplicar a hipótese de *Boussinesq* que expressa o tensor de *Reynolds* em função da viscosidade turbulenta, como segue:

$$\sigma_{ij}^{sgs} = 2\nu_t \left( \widetilde{S}_{ij} - \frac{1}{3} \widetilde{S}_{kk} \delta_{ij} \right), \quad (101)$$

sendo  $\nu_t$  a viscosidade turbulenta e  $\widetilde{S}_{ij}$  o tensor de deformação do campo filtrado, dado por:

$$\widetilde{S}_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial \widetilde{v}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \widetilde{v}_j}{\partial x_i} \right). \quad (102)$$

Para modelar a viscosidade turbulenta é utilizado o modelo submalha de *Smagorinsky*. Este modelo tem a função de acrescentar os efeitos das pequenas escalas nas equações filtradas (CORRÊA, 2016), sendo também um dos modelos mais usados. Portanto, a viscosidade turbulenta é determinada como:

$$\nu_t = (C_s \Delta)^2 |\widetilde{S}_{ij}|, \quad (103)$$

em que  $C_s$  é a constante de *Smagorinsky*,  $\Delta = \sqrt[3]{dx dy dz}$  é o tamanho do filtro e  $|\widetilde{S}_{ij}| = \sqrt{2\widetilde{S}_{ij}\widetilde{S}_{ij}}$  a norma de *Frobenius*. A constante de *Smagorinsky* depende muito do tipo de escoamento; normalmente seu valor é estabelecido entre 0,1 e 0,3 para que os resultados sejam satisfatórios (PITSCH, 2006; ANDREIS, 2011).

De acordo com Peters (2004), a viscosidade dinâmica é muito menor se comparada com a viscosidade turbulenta, por isto ela pode ser desconsiderada. Portanto as equações governantes são as seguintes:

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\widetilde{v}_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho}\widetilde{v}_i\widetilde{v}_j)}{\partial x_j} = -\frac{\partial\bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial\sigma_{ij}^{sgs}}{\partial x_j}, \quad (104)$$

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\widetilde{Y}_k)}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho}\widetilde{v}_i\widetilde{Y}_k)}{\partial x_i} = \frac{\partial^2(\bar{\rho}D_t\widetilde{Y}_k)}{\partial x_i\partial x_i} + \bar{w}_k, \quad (105)$$

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\widetilde{Z})}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho}\widetilde{v}_i\widetilde{Z})}{\partial x_i} = \frac{\partial^2(\bar{\rho}D_t\widetilde{Z})}{\partial x_i\partial x_i}, \quad (106)$$

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\widetilde{T})}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho}\widetilde{v}_i\widetilde{T})}{\partial x_i} = \frac{\partial^2(\bar{\rho}D_t\widetilde{T})}{\partial x_i\partial x_i} + \frac{1}{C_p} \bar{w}'_T. \quad (107)$$

## 2.6 Modelo *Flamelet*

O modelo *flamelet* é aplicado na área da combustão especificamente para chamas turbulentas. Para isso, considera-se que cada elemento da superfície de uma chama difusiva envolvido pelo fluxo turbulento apresenta a estrutura e a característica de uma pequena chama laminar (PETERS, 1986). Portanto, o modelo *flamelet* consiste em abordar uma chama turbulenta como um conjunto de pequenas chamas laminares. Isso é possível porque em chamas turbulentas as escalas de tempo de difusão turbulenta são maiores do que as escalas de tempo das reações químicas. Assim, o modelo *flamelet* permite tratar separadamente a estrutura química da chama da estrutura do fluxo turbulento.

Este modelo utiliza transformações de coordenadas em relação ao espaço e ao tempo para expressar as equações da conservação da massa das espécies químicas e energia em função da fração de mistura, porque essa consegue descrever adequadamente a estrutura da chama na superfície.

A transformação de coordenadas é aplicada na superfície da chama, na qual assume-se que a camada de consumo de combustível está em condições estequiométricas (ANDREIS, 2011), sendo assim a fração de mistura é considerada estequiométrica  $Z_{st}$ .

As equações *flamelet* são obtidas considerando as transformações a seguir:

$$\frac{\partial}{\partial t} = \frac{\partial \tilde{Z}}{\partial t} \frac{\partial}{\partial \tilde{Z}} + \frac{\partial}{\partial \tau}, \quad (108)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_i} = \frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_i} \frac{\partial}{\partial \tilde{Z}}, \quad (109)$$

e aplicando estas nas equações (108) e (109) tem-se um sistema de equações baseado na fração de mistura.

Aplicando a derivada do produto nos dois primeiros termos da equação (105), tem-se:

$$\bar{\rho} \frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial t} + \tilde{Y}_k \left[ \frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{v}_i) \right] + \bar{\rho} \tilde{v}_i \frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \bar{\rho} D_t \frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial x_i} \right) + \bar{w}_k. \quad (110)$$

Observando que o termo entre colchetes representa a equação da continuidade e aplicando as transformações na equação (110), obtém-se:

$$\bar{\rho} \left( \frac{\partial \tilde{Z}}{\partial t} \frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial \tilde{Z}} + \frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial \tau} \right) + \bar{\rho} \tilde{v}_i \left( \frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_i} \frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial \tilde{Z}} \right) = \frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_i} \frac{\partial}{\partial \tilde{Z}} \left( \bar{\rho} D_t \frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_i} \frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial \tilde{Z}} \right) + \bar{w}_k, \quad (111)$$

$$\begin{aligned} \bar{\rho} \left( \frac{\partial \tilde{Z}}{\partial t} \frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial \tilde{Z}} + \frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial \tau} \right) + \bar{\rho} \tilde{v}_i \left( \frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_i} \frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial \tilde{Z}} \right) = \bar{\rho} D_t \frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_i} \frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_i} \left( \frac{\partial^2 \tilde{Y}_k}{\partial \tilde{Z}^2} \right) + \\ + \frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial \tilde{Z}} \frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_i} \frac{\partial}{\partial \tilde{Z}} \left( \frac{\bar{\rho} D_t \partial \tilde{Z}}{\partial x_i} \right) + \bar{w}_k. \end{aligned} \quad (112)$$

Utilizando a transformação (109) no segundo termo do lado direito da equação (112), este fica:

$$\frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial \tilde{Z}} \frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_i} \frac{\partial}{\partial \tilde{Z}} \left( \frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_i} \right) = \frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial \tilde{Z}} \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \bar{\rho} D_t \frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_i} \right), \quad (113)$$

substituindo a equação (113) na equação (112), tem-se:

$$\bar{\rho} \frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial \tau} + \frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial \tilde{Z}} \left[ \bar{\rho} \frac{\partial \tilde{Z}}{\partial t} + \bar{\rho} \tilde{v}_i \frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \bar{\rho} D_t \frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_i} \right) \right] = \bar{\rho} D_t \frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_i} \frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_i} \left( \frac{\partial^2 \tilde{Y}_k}{\partial \tilde{Z}^2} \right) + \bar{w}_k. \quad (114)$$

O termo entre colchetes é nulo por ser a equação da fração de mistura; portanto a equação da conservação das espécies químicas no sistema de coordenadas da fração de mistura é:

$$\bar{\rho} \frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial \tau} = \bar{\rho} D_t \left( \frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_i} \right)^2 \left( \frac{\partial^2 \tilde{Y}_k}{\partial \tilde{Z}^2} \right) + \bar{w}_k. \quad (115)$$

Os efeitos causados pela difusão e convecção são expressos pela taxa de dissipação escalar definida como:

$$\tilde{\chi} = 2D_t \left( \frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_i} \right)^2. \quad (116)$$

Substituindo a taxa de dissipação escalar em (115), chega-se à:

$$\bar{\rho} \frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial \tau} = \bar{\rho} \frac{\tilde{\chi}}{2} \left( \frac{\partial^2 \tilde{Y}_k}{\partial \tilde{Z}^2} \right) + \bar{w}_k. \quad (117)$$

Para obter a equação da temperatura em função da fração de mistura, basta realizar o mesmo procedimento efetuado anteriormente na equação da conservação das espécies químicas. Assim a equação da temperatura é dada por:

$$\bar{\rho} \frac{\partial \tilde{T}}{\partial \tau} = \bar{\rho} \frac{\tilde{\chi}}{2} \left( \frac{\partial^2 \tilde{T}}{\partial \tilde{Z}^2} \right) + \frac{1}{C_p} \bar{w}'_T. \quad (118)$$

## 2.7 Adimensionalização das Equações Governantes

A maioria dos fenômenos estudados na dinâmica dos fluidos computacional apresenta equações cujos termos envolvem diferentes grandezas. Por isso, um recurso muito comum e utilizado é adimensionalizar tais equações com a finalidade de simplificá-las, deixando cada um de seus termos sem dimensão. Algumas das vantagens de empregar este procedimento é poder analisar um problema físico de maneira mais genérica e relacioná-los com problemas semelhantes; também reduz o número de parâmetros envolvidos no problema, pois de acordo com Çengel e Cimbala (2007) o número de parâmetros em uma equação adimensional é menor do que no espaço original.

A escrita das equações governantes na forma adimensional ajuda na compreensão dos fundamentos dos fenômenos físicos e na identificação de forças dominantes (FOX; MCDONALD; PRITCHARD, 2010), como também, diminuem as diferenças de ordem de magnitude das escalas temporais e espaciais presentes.

A adimensionalização consiste em substituir cada termo da equação por um conjunto de variáveis e constantes com as mesmas dimensões, resultando em uma equação adimensional. Esse procedimento é simples e será feito apenas para a equação da fração de mistura, já que para as demais equações o procedimento é semelhante.

As variáveis adimensionais para a equação da fração de mistura são dadas por,

$$\bar{\rho}^* = \frac{\bar{\rho}}{\rho_0}, \quad \tilde{v}_i^* = \frac{\tilde{v}_i}{v_0}, \quad t^* = \frac{v_0}{L}t, \quad D_t^* = \frac{D_t}{D_0}, \quad x_i^* = \frac{x_i}{L}, \quad (119)$$

onde os subíndices 0 e  $L$  são valores de referência.

Substituindo as variáveis adimensionais na equação (57) obtém-se,

$$\frac{\rho_0 v_0}{L} \frac{\partial(\bar{\rho}^* \tilde{Z})}{\partial t^*} + \frac{\rho_0 v_0}{L} \frac{\partial(\bar{\rho}^* \tilde{v}_i^* \tilde{Z})}{\partial x_i^*} = \frac{\rho_0 D_0}{L^2} \frac{\partial^2(\bar{\rho}^* D_t^* \tilde{Z})}{\partial x_i^* \partial x_i^*}, \quad (120)$$

$$\frac{\rho_0 v_0}{L} \left( \frac{\partial(\bar{\rho}^* \tilde{Z})}{\partial t^*} + \frac{\partial(\bar{\rho}^* \tilde{v}_i^* \tilde{Z})}{\partial x_i^*} \right) = \frac{\rho_0 D_0}{\mu_0} \frac{\mu_0}{L^2} \frac{\partial^2(\bar{\rho}^* D_t^* \tilde{Z})}{\partial x_i^* \partial x_i^*}, \quad (121)$$

$$\frac{\partial(\bar{\rho}^* \tilde{Z})}{\partial t^*} + \frac{\partial(\bar{\rho}^* \tilde{v}_i^* \tilde{Z})}{\partial x_i^*} = \frac{L}{\rho_0 v_0} \left( \frac{\rho_0 D_0}{\mu_0} \frac{\mu_0}{L^2} \frac{\partial^2(\bar{\rho}^* D_t^* \tilde{Z})}{\partial x_i^* \partial x_i^*} \right), \quad (122)$$

$$\frac{\partial(\bar{\rho}^* \tilde{Z})}{\partial t^*} + \frac{\partial(\bar{\rho}^* \tilde{v}_i^* \tilde{Z})}{\partial x_i^*} = \frac{\mu_0}{\rho_0 v_0 L} \left( \frac{\rho_0 D_0}{\mu_0} \frac{\partial^2(\bar{\rho}^* D_t^* \tilde{Z})}{\partial x_i^* \partial x_i^*} \right), \quad (123)$$

$$\frac{\partial(\bar{\rho}^* \tilde{Z})}{\partial t^*} + \frac{\partial(\bar{\rho}^* \tilde{v}_i^* \tilde{Z})}{\partial x_i^*} = \frac{1}{Re} \left( \frac{1}{Sc} \frac{\partial^2(\bar{\rho}^* D_t^* \tilde{Z})}{\partial x_i^* \partial x_i^*} \right). \quad (124)$$

Para simplificar a notação o sobrescrito (\*) foi suprimido. Portanto, a equação da fração de mistura é dada por:

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{Z})}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{v}_i\tilde{Z})}{\partial x_i} = \frac{1}{Re} \left( \frac{1}{Sc} \frac{\partial^2(\bar{\rho}D_t\tilde{Z})}{\partial x_i\partial x_i} \right), \quad (125)$$

onde  $Re$  é o número de *Reynolds* e  $Sc$  o número de *Schmidt*.

Para adimensionalizar as equações (104), (117) e (118) consideram-se as seguintes variáveis adimensionais:

$$\begin{aligned} \bar{\rho}^* &= \frac{\bar{\rho}}{\rho_0}, & \tilde{v}_j^* &= \frac{\tilde{v}_j}{v_0}, & t^* &= \frac{v_0}{L}t, & x_j^* &= \frac{x_j}{L}, & \bar{p}^* &= \frac{\bar{p}}{p_0}, & \nu_t^* &= \frac{\nu_t}{\nu_0}, \\ \tilde{Y}_k^* &= \frac{\tilde{Y}_k}{Y_{F,1}}, & \tau^* &= \frac{\tau}{a}\chi_{st}, & \nu_k^* &= \frac{\nu_k}{\nu_F}, & MW_k^* &= \frac{MW_k}{MW_F}, & Ze &= \frac{E}{RT_b}, \\ a &= 2\Delta\tilde{Z}\tilde{Z}_{st}(1 - Z_{st}), & Q^* &= \frac{Q\tilde{Y}_{F,a}}{c_p MW_F T_a}, \end{aligned} \quad (126)$$

onde  $Ze$  é o número de *Zel'dovich*,  $T_a$  e  $T_b$  a temperatura antes da queima e depois da queima,  $\Delta\tilde{Z}$  a variação da fração de mistura.

Fazendo respectivamente, o mesmo processo anterior obtemos as equações do movimento, conservação de massa das espécies e energia na forma adimensional, representadas como:

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{v}_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{v}_i\tilde{v}_j)}{\partial x_j} = -\frac{1}{(Ma)^2} \frac{\partial\bar{p}}{\partial x_i} + \frac{1}{Re} \frac{\partial\bar{\sigma}_{ij}}{\partial x_j}, \quad (127)$$

$$\frac{\partial\tilde{Y}_k}{\partial\tau} = \frac{a\tilde{\chi}}{2} \frac{\partial^2\tilde{Y}_k}{\partial\tilde{Z}^2} \pm \nu_F Da \tilde{Y}_F \tilde{Y}_O \exp\left(\frac{-Ze}{T}\right), \quad (128)$$

$$\frac{\partial\tilde{T}}{\partial\tau} = \frac{a\tilde{\chi}}{2} \frac{\partial^2\tilde{T}}{\partial\tilde{Z}^2} + \nu_F He Da \tilde{Y}_F \tilde{Y}_O \exp\left(\frac{-Ze}{T}\right), \quad (129)$$

sendo que  $Ma$  é o número de *Mach*,  $Da$  é o número de *Damköhler* e  $He$  taxa de liberação de calor.

### 3 MODELAGEM COMPUTACIONAL

Quando trabalha-se com EDP's é necessário determinar um método adequado para aproximar os termos dessas equações no domínio discretizado, a fim de obter a solução numérica do caso em análise. Na dinâmica dos fluidos computacionais (DFC) os métodos mais recorrentes e empregados são: método de diferenças finitas (MDF), método de volumes finitos (MVF) e o método de elementos finitos (MEF).

Neste trabalho é aplicado o método de diferenças finitas para resolver as equações diferenciais. Este método foi escolhido por não exigir grandes recursos computacionais, por ser de fácil implementação e pelo domínio do caso estudado não ser tão complexo, pois, as técnicas de volumes finitos e elementos finitos são empregadas para domínios mais elaborados.

#### 3.1 Método de Diferenças Finitas

O método de diferenças finitas usa expansões em série de *Taylor* para aproximar as derivadas contidas nas equações diferenciais por aproximações de diferenças finitas e a seguir obter a solução do problema para cada ponto do domínio discretizado (FORTUNA, 2000). Portanto, esse método consiste nas seguintes etapas: discretizar o domínio do problema; substituir as derivadas das equações por diferenças finitas escritas em função dos pontos da malha (conjunto de pontos discretos no domínio), resultando em um sistema de equações algébricas, e após resolver essas equações numericamente.

As equações governantes deste trabalho foram discretizadas utilizando esquemas de diferenças finitas progressivas e centrais de primeira e segunda ordens, dependendo de cada termo presente nas equações. Para as derivadas temporais são utilizadas aproximações por diferenças progressivas de primeira ordem, definidas como:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \frac{f^{n+1} - f^n}{\Delta t} + O(\Delta t). \quad (130)$$

Diferenças centrais são empregadas para os termos das derivadas espaciais de

primeira ordem nas equações, assim:

$$\left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_{i,j,k} = \frac{f_{i+1,j,k} - f_{i-1,j,k}}{2\Delta x} + O(\Delta x)^2, \quad (131)$$

$$\left. \frac{\partial f}{\partial y} \right|_{i,j,k} = \frac{f_{i,j+1,k} - f_{i,j-1,k}}{2\Delta y} + O(\Delta y)^2, \quad (132)$$

$$\left. \frac{\partial f}{\partial z} \right|_{i,j,k} = \frac{f_{i,j,k+1} - f_{i,j,k-1}}{2\Delta z} + O(\Delta z)^2. \quad (133)$$

Para as derivadas espaciais de segunda ordem, aproximações por diferenças centrais de segunda ordem são aplicadas, dadas por:

$$\left. \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right|_{i,j,k} = \frac{f_{i+1,j,k} - 2f_{i,j,k} + f_{i-1,j,k}}{(\Delta x)^2} + O(\Delta x)^2, \quad (134)$$

$$\left. \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} \right|_{i,j,k} = \frac{f_{i,j+1,k} - 2f_{i,j,k} + f_{i,j-1,k}}{(\Delta y)^2} + O(\Delta y)^2, \quad (135)$$

$$\left. \frac{\partial^2 f}{\partial z^2} \right|_{i,j,k} = \frac{f_{i,j,k+1} - 2f_{i,j,k} + f_{i,j,k-1}}{(\Delta z)^2} + O(\Delta z)^2. \quad (136)$$

### 3.2 Descrição e Domínio do Caso em Estudo

Para a simulação numérica da chama difusiva de hidrogênio, considera-se a geometria da câmara de combustão semelhante ao modelo utilizado por *Sandia National Laboratories* (BARLOW, 1996) para realizar testes e experimentos com chamas, na qual diversos tipos de combustíveis já foram testados, gerando resultados e dados que servem de comparação para trabalhos referentes ao mesmo âmbito.

O sistema de combustão é constituído por uma câmara retangular (Figura 1) de dimensões  $H = 1$  e  $L = 11$  no qual, em seu centro, na extremidade inferior, contém dois cilindros concêntricos de raio interno 0,05 e raio externo 0,075. O combustível é ejetado no cilindro de diâmetro menor e no de diâmetro maior tem-se o *pilot*, no qual são posicionadas pequenas chamas com a finalidade de estabilizar a chama do jato. O uso do *pilot* é uma das muitas técnicas existentes para estabilizações de chamas difusivas turbulentas, pois ele ajuda a manter a chama fixada perto do bocal do injetor do combustível, evitando assim que possíveis instabilidades possam acontecer durante o processo de combustão. A corrente de combustível percorre uma distância  $l = 0.5$  até a saída do injetor, onde se encontra com o oxidante que é injetado na parte exterior ao *pilot*, ocorrendo a reação química.

Uma boa solução numérica para o escoamento depende do tipo de malha utilizada. A obtenção de uma malha adequada pode se tornar um problema mais complexo do

que calcular o escoamento do fluido (FORTUNA, 2000). Por isso, neste trabalho é utilizada uma malha não uniforme, formada por elementos retangulares e refinada na região de saída do combustível e em relação ao eixo central da câmara de combustão na direção  $x$ , como mostra a Figura 2.

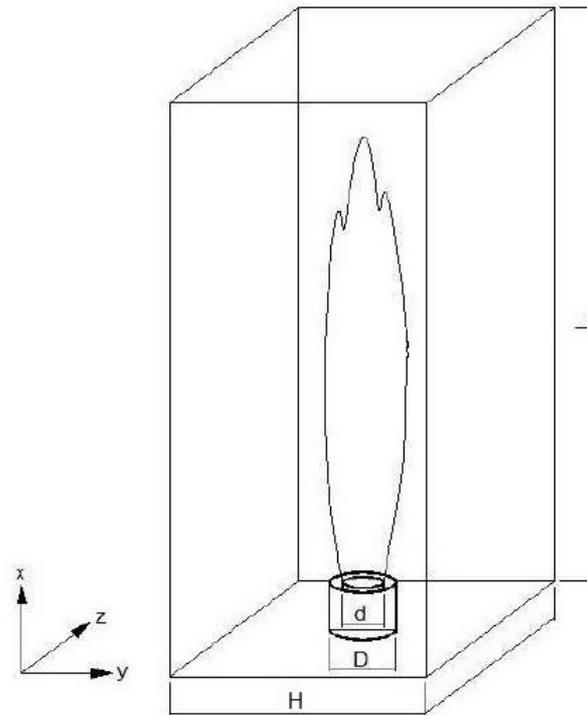


Figura 1: Representação tridimensional da câmara de combustão

Fonte: Vaz (2010, p. 47)

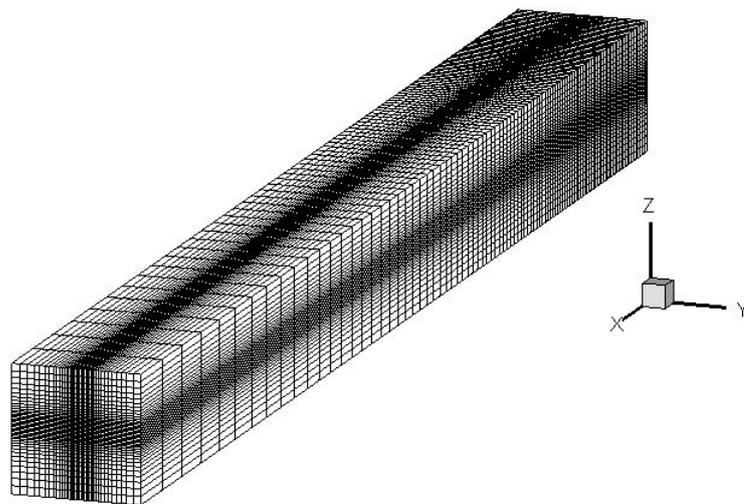


Figura 2: Representação tridimensional da malha utilizada

Fonte: Elaboração do autor

### 3.3 Condições Auxiliares

Para resolver as equações governantes é necessário utilizar condições auxiliares, como condições iniciais e de contorno. As condições iniciais estabelecem os valores das variáveis dependentes em um determinado instante de tempo, geralmente em  $t = 0$ . Já as condições de contorno determinam os valores das variáveis nas fronteiras do domínio e também o fluxo da variável. Por existir diversos tipos de condições de contorno, a escolha adequada dessas é um fator determinante para se obter uma solução numérica adequada (FORTUNA, 2000).

Na entrada do domínio da câmara, são empregadas condição de fronteira *Dirichlet* para as componentes do campo de velocidade, fração mássica, fração de mistura, etc. Na saída da câmara de combustão são usadas condições de *Neumann* nula para as variáveis mencionadas anteriormente. As condições iniciais e de contorno são dadas nas Tabelas 3 e 4 (PEREIRA, 2012).

Para  $t = 0$ , consideram-se as seguintes condições iniciais descritas na Tabela 3:

Tabela 3: Condições iniciais utilizadas na câmara de combustão

Entrada do combustível	Entrada do oxidante	Interior da câmara de combustão
$Y_{H_2}(x, y, z, 0) = 0,067$	$Y_{O_2}(x, y, z, 0) = 0,2329$	$Y_{H_2}(x, y, z, 0) = 0$ $Y_{O_2}(x, y, z, 0) = 0,2329$ $Y_{H_2O}(x, y, z, 0) = 0$
$Z(x, y, z, 0) = 1$	$Z(x, y, z, 0) = 0$	$Z(x, y, z, 0) = 0$
$v_1(x, y, z, 0) = 1,5$	$v_1(x, y, z, 0) = 0,01$	$v_1(x, y, z, 0) = 0$
$v_2(x, y, z, 0) = 0$	$v_2(x, y, z, 0) = 0$	$v_2(x, y, z, 0) = 0$
$v_3(x, y, z, 0) = 0$	$v_3(x, y, z, 0) = 0$	$v_3(x, y, z, 0) = 0$
$p(x, y, z, 0) = 1$	$p(x, y, z, 0) = 1$	$p(x, y, z, 0) = 1$
$T(x, y, z, 0) = 1$	$T(x, y, z, 0) = 0,1$	$T(x, y, z, 0) = 0,1$

Fonte: Elaboração do autor

As condições de contorno dadas nos limites da câmara de combustão são apresentadas na Tabela 4:

Tabela 4: Condições de contorno utilizadas na câmara de combustão

Paredes da câmara de combustão	Saída da câmara de combustão
$\frac{\partial Y_{H_2}}{\partial x}(x, y, z, t) = 0$	$\frac{\partial Y_{H_2}}{\partial x}(x, y, z, t) = 0$
$\frac{\partial Y_{H_2O}}{\partial x}(x, y, z, t) = 0$	$\frac{\partial Y_{H_2O}}{\partial x}(x, y, z, t) = 0$
$\frac{\partial Y_{O_2}}{\partial x}(x, y, z, t) = 0$	$\frac{\partial Y_{O_2}}{\partial x}(x, y, z, t) = 0$
$\frac{\partial Z}{\partial x}(x, y, z, t) = 0$	$\frac{\partial Z}{\partial x}(x, y, z, t) = 0$
$v_1(x, y, z, t) = 0$	$\frac{\partial v_1}{\partial x}(x, y, z, t) = 0$
$v_2(x, y, z, t) = 0$	$\frac{\partial v_2}{\partial x}(x, y, z, t) = 0$
$v_3(x, y, z, t) = 0$	$\frac{\partial v_3}{\partial x}(x, y, z, t) = 0$
$\frac{\partial p}{\partial x}(x, y, z, t) = 0$	$p(x, y, z, t) = 1$
$\frac{\partial T}{\partial x}(x, y, z, t) = 0$	$\frac{\partial T}{\partial x}(x, y, z, t) = 0$

Fonte: Elaboração do autor

## 4 RESULTADOS NUMÉRICOS

Neste capítulo apresentam-se os resultados numéricos obtidos por meio da metodologia apresentada no decorrer deste trabalho. Esses são comparados com os resultados experimentais para uma chama difusiva de hidrogênio/nitrogênio ( $H_2/N_2$ ) disponível no *Sandia National Laboratories*, a fim de validar e analisar o comportamento da solução numérica do problema.

A chama *Sandia* tem forma de jato, é não confinada e composta por uma mistura de 50% de hidrogênio e 50% de nitrogênio. O comprimento da chama, em geral, é dado na forma adimensionalizada, e as distâncias são normalizadas em relação ao diâmetro da saída do jato de combustível  $d$  (VAZ, 2010).

A simulação numérica foi realizada utilizando um código implementado e desenvolvido em linguagem *FORTRAN*. Entre as principais vertentes de linguagens de desenvolvimento adotadas em programas numéricos, o *FORTRAN* é o mais difundido nesse meio, e é uma linguagem conhecida por sua velocidade de execução de códigos numéricos (MALISKA, 2004).

Cabe salientar que todos os resultados numéricos apresentados neste trabalho foram obtidos usando o cluster *NEWTON* do Centro Nacional de Supercomputação (CE-SUP) da Universidade Federal do Rio Grande do Sul (UFRGS). O cluster *NEWTON* opera com o sistema OpenSUSE, versão 42.3, e conta com 6 unidades de processamento, cada uma com 128 GB de RAM e 8 processadores quadcore AMD Opteron 8356, de 2.3 GHz de frequência.

Foram realizadas simulações com malhas tridimensionais de 257.499 e 387.549 pontos, sendo essas refinadas nas direções longitudinais, verticais e transversais. O fator de refinamento utilizado na direção longitudinal ( $x$ ) é 0,08 e para as direções vertical e transversal são usados fatores iguais a 0,9. O fator de refinamento menor em  $x$  é devido ao fato que na região próxima à saída do combustível e no eixo central ocorrem os efeitos principais causados pela reação química, como pode ser visto na Figura 3, onde a cor vermelha representa o combustível, a azul o oxigênio e as cores intermediárias a reação química.

Neste trabalho, considera-se um número de *Reynolds* no valor de  $10^4$  e passo de

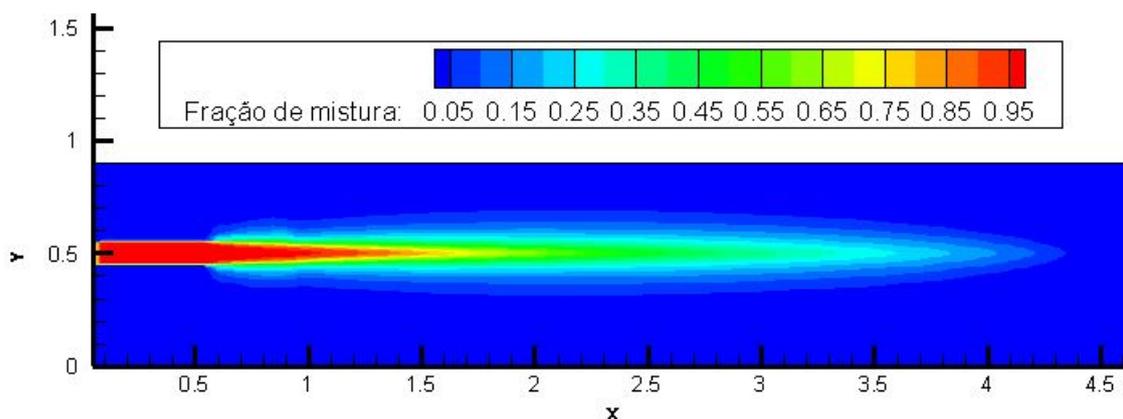


Figura 3: Fração de mistura em relação ao eixo axial

Fonte: Elaboração do autor

tempo  $\Delta t = 10^{-4}$ . As componentes das velocidades são  $v_1 = 1,5$  e  $v_2 = v_3 = 0$ ; esses e os demais valores para as variáveis foram apresentados nas Tabelas 3 e 4.

O início do processo químico ocorre quando o combustível é injetado na câmara, por meio da fração mássica  $Y_{H_2} = 0,067$  e o oxidante por meio da fração mássica  $Y_{O_2} = 0,2329$ . Então, quando o combustível entra em contato com o oxidante no interior da câmara, o processo de combustão começa pela reação química dos elementos presentes na mistura.

A seguir serão apresentados e comparados os resultados para a fração de mistura, a fração mássica do combustível e oxidante, assim como do produto, em relação aos eixos axial e radial.

#### 4.1 Comparação entre a fração de mistura experimental e numérica

Inicialmente a fração de mistura foi testada para as malhas com 257.499 e 387.549 pontos, sendo que a malha mais refinada, ou seja, com maior números de pontos, apresentou melhores resultados, conforme pode ser observado na Figura 4.

Nota-se um decréscimo da fração de mistura em relação ao eixo axial. Isso ocorre porque o combustível mistura-se com oxigênio e à medida que o processo de combustão progride e o combustível vai sendo consumido, diminuindo seu nível na mistura para valores cada vez maiores em  $x$ , quase zerando seu valor para a extremidade da chama.

A malha com 257.499 pontos apresentou uma diferença significativa em todo o seu comportamento, quando comparado com o resultado experimental. Já, com a malha de 387.549 pontos essa diferença foi menor, representando melhor o comportamento da fração de mistura ao longo do eixo  $x$ , sendo que apenas na extremidade da chama

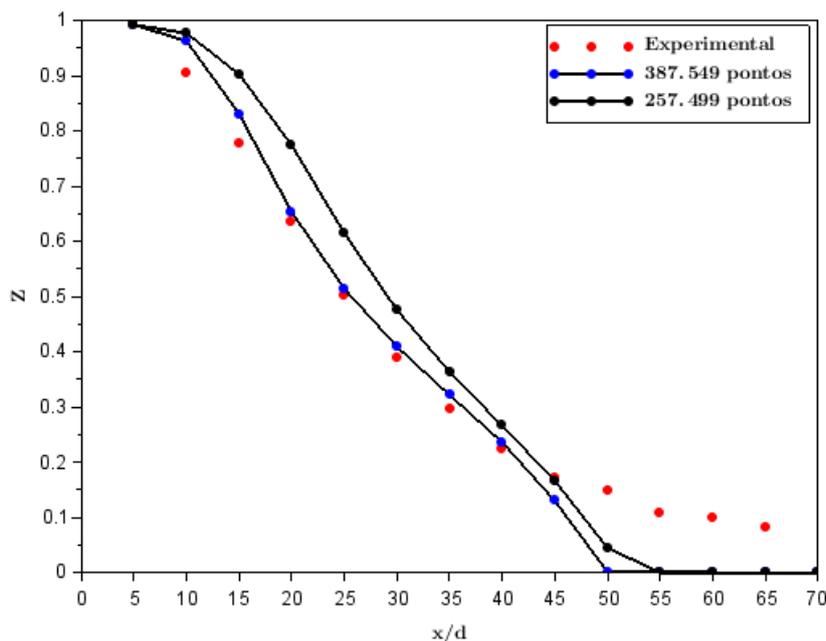


Figura 4: Fração de mistura em relação ao eixo central da câmara de combustão

Fonte: Elaboração do autor

ocorre um decréscimo mais acentuado em relação ao experimental.

Os resultados que seguem são todos dados utilizando a malha de 387.549 pontos, pois esta apresentou resultados mais satisfatórios, quando comparado com os dados experimentais. Simulações utilizando malhas ainda mais refinadas apresentaram comportamentos similares, porém foi necessário muito mais tempo de computação. Desta forma, estas não serão apresentadas neste trabalho.

Na Figura 5, tem-se a fração de mistura na seção radial para  $x/d = 20$ . Os resultados apresentam uma pequena diferença tanto no início e no final da curva. O decréscimo da fração de massa está adequado, pois o nível de combustível tende a cair conforme vai sendo consumido, e quanto maior o valor do raio, menor o volume do combustível.

Para  $x/d = 40$ , a fração de mistura começa com 21% decaindo ao longo da seção radial, conforme mostra a Figura 6, na qual os resultados apresentam maior discrepância entre  $x/d = 1$  e  $x/d = 5$ . O comportamento de decréscimo da solução numérica para a fração de mistura é devido a presença da viscosidade turbulenta, pois esta aumenta em relação ao eixo radial, onde seus efeitos são significativos e o refinamento da malha é menor. Conforme VAZ (2010) nas regiões onde a malha é mais grossa os efeitos da viscosidade turbulenta tendem a ser maiores, gerando um erro maior nesta aproximação.

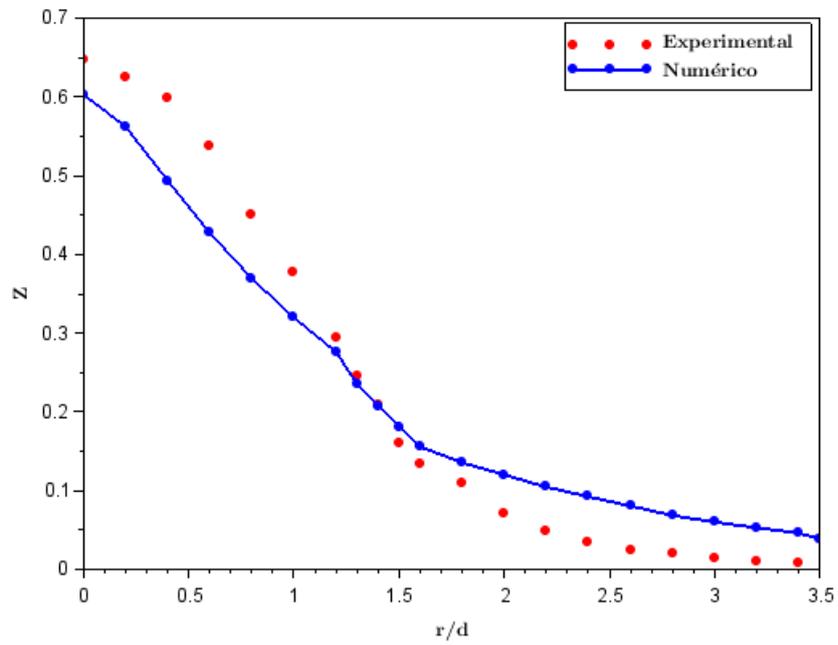


Figura 5: Fração de mistura em  $x/d = 20$

Fonte: Elaboração do autor

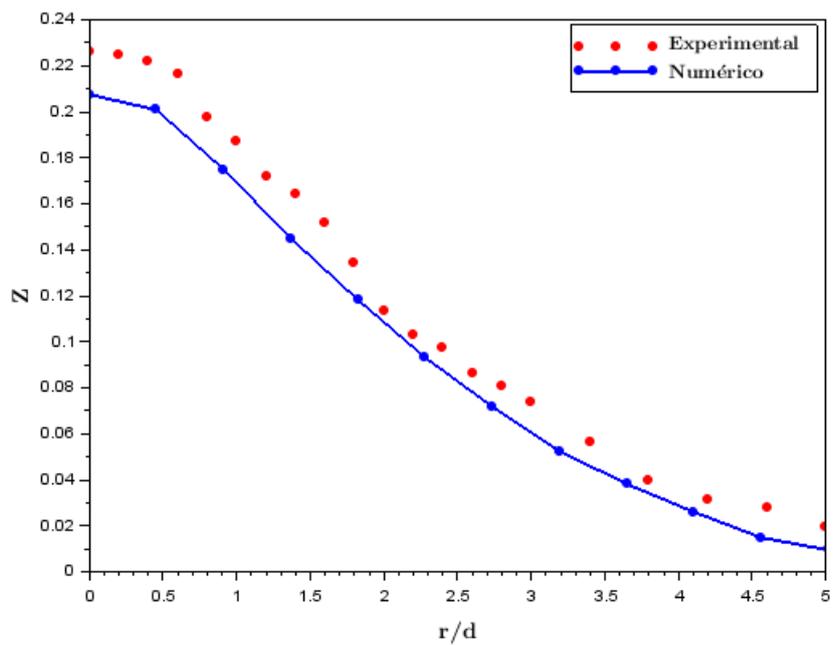


Figura 6: Fração de mistura em  $x/d = 40$

Fonte: Elaboração do autor

## 4.2 Comparação entre as frações mássicas experimentais e numéricas para os reagentes

Conforme esperado, a fração mássica do combustível inicial apresentada no gráfico da Figura 7 é  $Y_{H_2} = 0,067$ . À medida que o combustível vai sendo consumido durante a reação, a fração mássica do combustível vai decrescendo até ser quase que totalmente consumida, ficando apenas uma quantidade ínfima, não sendo suficiente para manter o processo de combustão em que a chama é extinta. É notável que o fluxo do combustível da solução numérica decai mais lentamente do que a solução experimental ao longo do eixo axial; logo o comportamento da fração mássica numérica está adequado com o resultado numérico da fração de mistura.

Já para  $x/d = 20$  a fração mássica da solução numérica é um pouco maior do que a experimental, sendo que seus valores apresentam uma discrepância entre  $r/d = 0$  e  $r/d = 2$ ; a partir deste ponto a diferença entre os resultados começa a diminuir conforme mostra a Figura 8.

Para valores maiores que  $x/d = 40$ , os resultados numéricos e experimentais apresentam diferenças consideráveis e quanto maior for  $x/d$  essa diferença é mais significativa. Na Figura 9 entre  $r/d = 0$  e  $r/d = 2$  o nível da fração mássica experimental é menor em relação ao numérico, concluindo-se que o combustível está sendo consumido nesse intervalo mais lentamente na solução numérica.

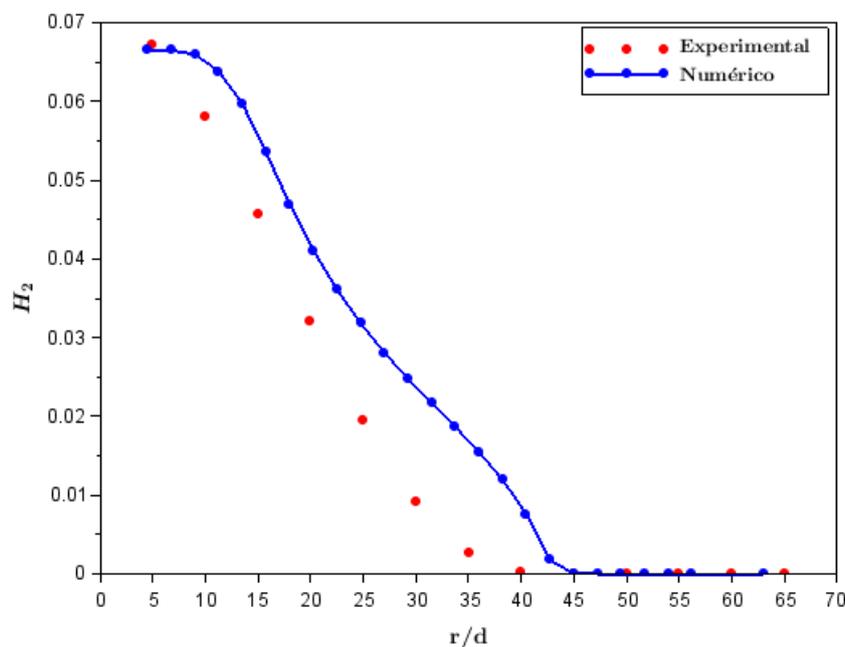


Figura 7: Fração mássica do combustível  $H_2$  ao longo do eixo central da câmara de combustão

Fonte: Elaboração do autor

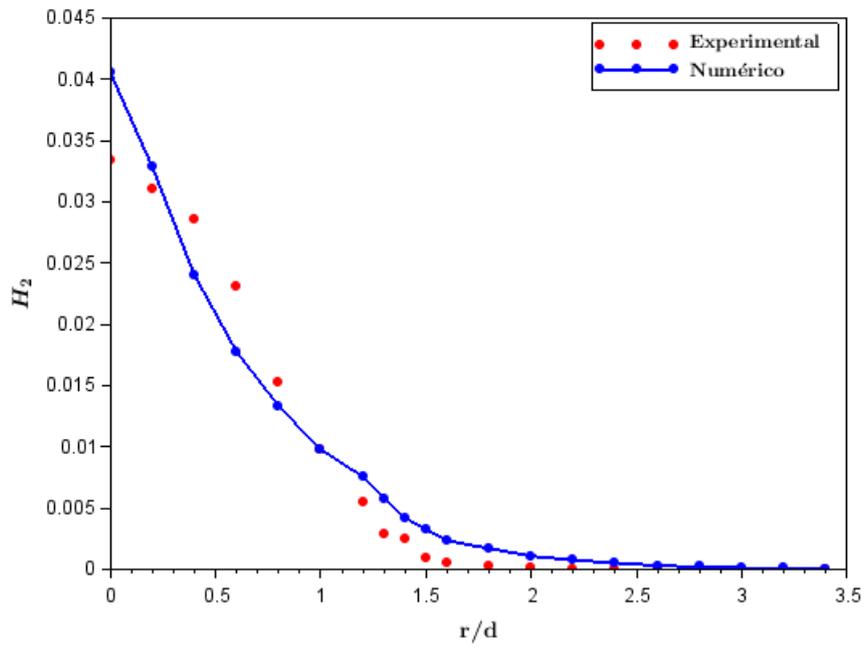


Figura 8: Fração mássica do combustível  $H_2$  em  $x/d = 20$

Fonte: Elaboração do autor

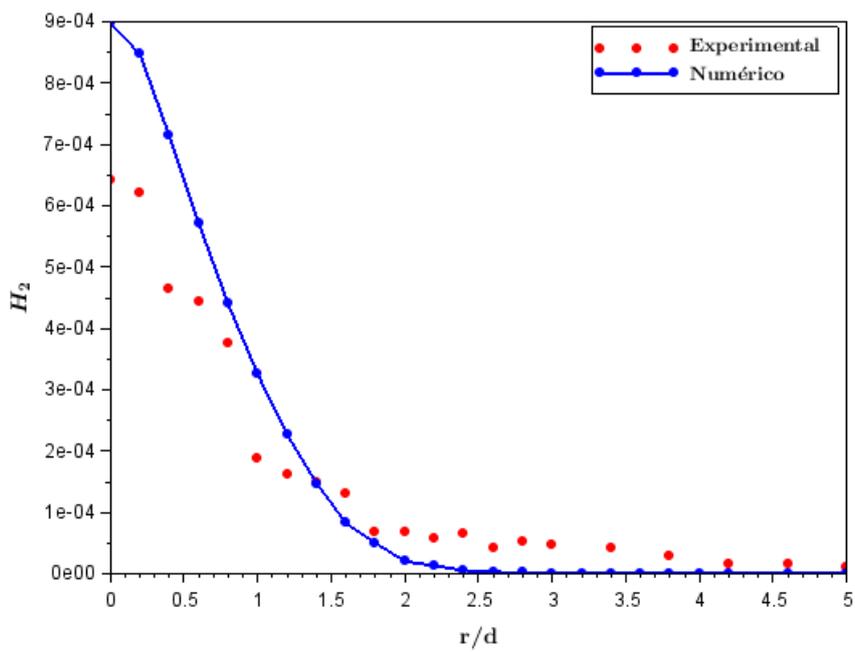


Figura 9: Fração mássica do combustível  $H_2$  em  $x/d = 40$

Fonte: Elaboração do autor

Enquanto o nível de combustível diminui durante a reação, o nível de oxidante tende a aumentar gradualmente para que aconteça a combustão, porque sem oxigênio essa não acontece. A Figura 10 mostra a evolução da fração mássica do oxidante, no qual a solução numérica começa com um nível maior de oxigênio do que a experimental. No final ambas soluções tem a mesma quantidade de fração mássica do oxidante.

Na Figura 11 a diferença entre as soluções é muito grande para a posição  $x/d = 40$ . Nessa posição a chama está em seu estado bem desenvolvido, na qual a presença de combustível já é mínima e a reação está em seu estágio intermediário, conforme mostra a Figura 4.

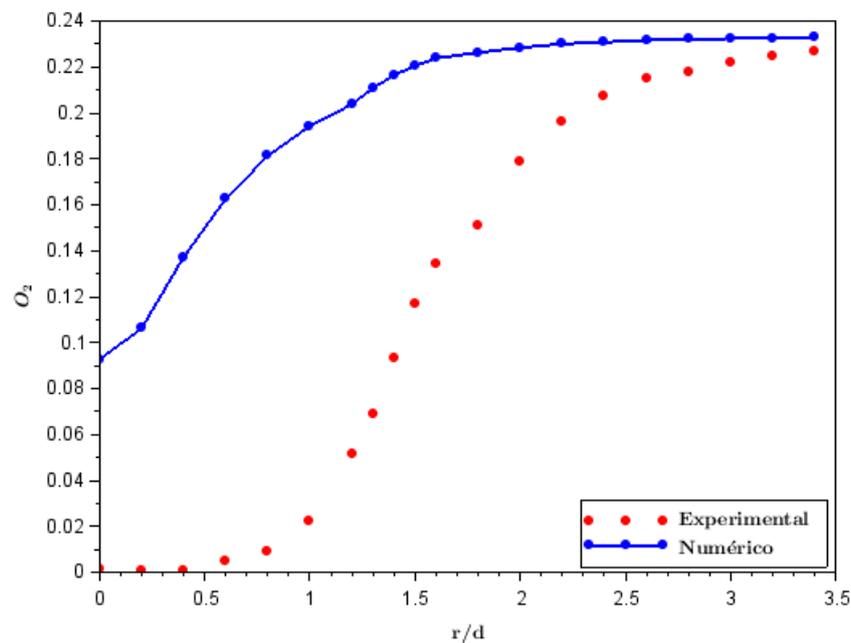


Figura 10: Fração mássica do oxidante  $O_2$  em  $x/d = 20$

Fonte: Elaboração do autor

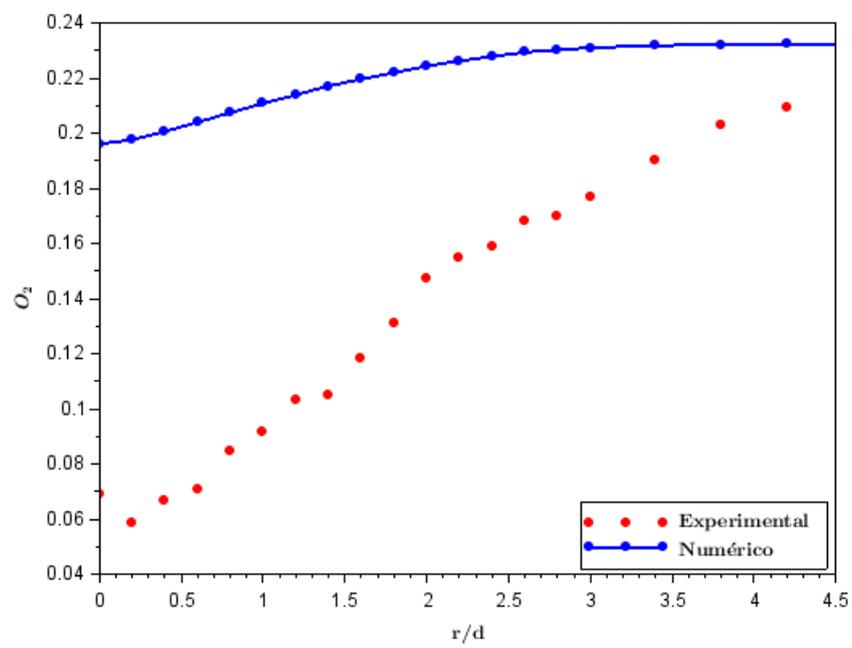


Figura 11: Fração mássica do oxidante  $O_2$  em  $x/d = 40$

Fonte: Elaboração do autor

## 5 CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS

Para realizar a simulação numérica de uma chama difusiva de hidrogênio no interior de uma câmara de combustão, estudou-se as equações básicas necessárias para resolver o escoamento, como as equações de *Navier-Stokes*, juntamente com as equações de fração de mistura, conservação da massa das espécies químicas e energia. O uso dessas equações possibilitaram analisar o escoamento químico e a combustão, no interior da câmara da combustão, para diferentes variáveis como a massa das espécies, o fluxo do combustível, do oxidante, entre outras.

Foram realizadas algumas considerações e hipóteses para as equações e o escoamento, como considerar o número de *Mach* baixo, a pressão constante e ausência de forças da gravidade e radiação. Essas simplificações foram necessárias para diminuir o grau de complexidade do problema, com o intuito de facilitar o processo para a simulação numérica, já que o sistema das equações é rígido devido à presença de diferentes escalas temporais no escoamento.

Devido ao alto grau de turbulência que o escoamento apresenta, durante seu desenvolvimento foram necessários métodos para tratar as flutuações contidas no fluxo, como LES, e também para tratar a parte química da chama, como a técnica *Flamelet*. Precisou-se adimensionalizar as equações para reduzir o número de parâmetros envolvidos no processo da combustão, auxiliar na identificação de forças dominantes e diminuir as diferenças de ordem de magnitude das escalas.

Outro método utilizado foi o de diferenças finitas para discretizar o domínio do problema, a fim de obter a solução numérica. Todas as técnicas utilizadas para modelagem do problema da chama difusiva de hidrogênio contribuíram para obter os resultados com menos custo computacional. Assim essa formulação possibilitou desenvolver uma metodologia numérica capaz de determinar as quantidades como a fração de mistura e mássica dos elementos químicos contidos no processo.

Os resultados numéricos e os experimentais ao serem comparados apresentaram discrepâncias em certas posições da chama, conforme apresentado nas figuras. Estas diferenças podem ser acentuadas devido ao uso de métodos numéricos e técnicas de simplificação para obter a solução do problema proposto. Cabe destacar que o

mecanismo utilizado é um mecanismo reduzido de apenas um passo que representa o processo de reação química do hidrogênio. Sabe-se que quanto mais passos um mecanismo químico tiver, melhor e mais completo será o seu resultado.

Uma proposta futura deste trabalho será estudar mecanismos de hidrogênio com mais passos para verificar o comportamento da solução numérica. A partir de chamas comuns, como a de hidrogênio, é possível assimilar melhor como ocorre o processo de combustão em outros combustíveis, como exemplo o metano, o metanol e o etanol, entre outros.

Portanto, este trabalho tem a pretensão de auxiliar e contribuir para entender melhor como acontece o fenômeno da combustão em chamas difusivas para combustíveis de grande relevância, desde os que apresentam cadeias simples até as mais complexas.

## REFERÊNCIAS

AGRAWAL, A.; PRASAD, A. K. Integral solution for the mean flow profiles of turbulent jets, plumes, and wakes. **Journal of Fluids Engineering**, v.125, p.813–822, 2003.

ALMEIDA KOZEN, P. H. de. **Estudo de um modelo convectivo-difusivo-reativo em combustão baseado no método de elementos finitos**. 2006. 80p. Dissertação (Mestrado em Matemática Aplicada) — Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre/RS.

ANDREIS, G. S. L. **Solução Via LES de Chamas Difusivas de Metano, Metanol e Etanol**. 2011. Tese (Doutorado em Engenharia Química) — Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre/RS.

AZEVEDO, A. N. G. de; AZEVEDO LIMA, B. G. de. Biocombustíveis: desenvolvimento e inserção internacional. **Revista Direito Ambiental e Sociedade**, v.6, n.1, p.77–100, 2016.

BARLOW, R.  $H_2/N_2$  jet flames. **Sandia National Laboratories**, 1996.

BENEMANN, J. Hydrogen Biotechnology: Progress and prospects. **Nature Biotechnology**, v.14, p.1101–1103, 1996.

BOERSMA, B. J.; LELE, S. K. Large eddy simulation of compressible turbulent jets. **CTR-Annual Research Briefs**, p.365–377, 1999.

CALEGARI, P. C. **Simulação computacional de escoamentos reativos com baixo número de Mach aplicando técnicas de refinamento adaptativo de malhas**. 2012. 146p. Tese (Doutorado em Matemática Aplicada) — Universidade de São Paulo, São Paulo/SP.

ÇENGEL, Y. A.; CIMBALA, J. M. **Mecânica dos fluidos: fundamentos e aplicações**. São Paulo: McGraw-Hill, 2007.

CHAMOUSIS, R. Hydrogen: Fuel of the future. **The Scientific Research Society**, 2000.

CHANG, R.; GOLDSBY, K. A. **Química**. 11.ed. Porto Alegre: McGraw-Hill, 2013.

CORRÊA, L. **Simulação de grandes escalas de escoamentos turbulentos com filtragem temporal via volumes finitos**. 2016. 99p. Tese (Doutorado em Ciências de Computação e Matemática Computacional) — Universidade de São Paulo, São Carlos/SP.

DAMASCENA, P. J. V.; GÓES, V. Z. de. **Viabilidade técnica da utilização de hidrogênio produzido “in situ” em motores de combustão interna**. 2013. 69p. Trabalho de Conclusão de Curso — Universidade Federal do Espírito Santo, Vitória/ES.

DAS, D.; VEZIROGLU, T. N. Hydrogen production by biological processes: a survey of literature. **International Journal of Hydrogen Energy**, v.26, p.13–28, 2001.

DE BORTOLI, A. L. Analytical/numerical solution for confined jet diffusion flame (Sandia Flame C). **Latin American Applied Research**, v.39, p.157–163, 2009.

DE BORTOLI, A. L.; ANDREIS, G. S. L. **Introdução à Combustão**. Porto Alegre: Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 2010.

FORTUNA. **Técnicas computacionais para dinâmica dos fluidos: conceitos e aplicações**. São Paulo/SP: Edusp, 2000.

FOX; MCDONALD; PRITCHARD. **Introdução à dinâmica dos fluidos**. 8.ed. LTC, 2010.

GAYDON, A. G.; WOLFHARD, H. G. **Flames: Their Structure, Radiation and Temperature**. 4.ed. Chapman and hall, 1979.

GOKARN, A.; BATTAGLIA, F.; FOX, R. O.; HILL, J. C. Simulations of mixing for a confined co-flowing planar jet. **Computers & Fluids**, v.35, p.1228–1238, 2006.

HOERLLE, C. A. **Estudo numérico de chamas difusivas de  $CH_4$  diluído com  $CO_2$  empregando mecanismos cinéticos globais e a técnica flamelet-generated manifold**. 2015. 120p. Dissertação (Mestrado em Engenharia Mecânica) — Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre/RS.

KLEIN, M.; SADIKI, A.; JANICKA, J. Investigation of the influence of the Reynolds number on a plane jet using direct numerical simulation. **Journal of Heat and Fluid Flow**, v.24, p.785–794, 2003.

KONNOV, A. Implementation of the NCN pathway of prompt-NO formation in the detailed reaction mechanism. **Combustion and Flame**, v.156, p.2093–2105, 2009.

KUO, K. K. **Principles of Combustion**. 2.ed. USA: John Wiley and Sons, 2005.

LACAVA, P. T. **Elementos de combustão**. São José dos Campos: Instituto Tecnológico de Aeronáutica, 2014. Departamento de Propulsão.

LAW, C. K. **Combustion Physics**. USA: Cambridge University Press, 2006.

LIÑAN, A. The asymptotic structure of counterflow diffusion flames for large activation energies. **Acta Astronautica**, v.1, p.1007–1039, 1974.

LU, T.; LAW, C. A criterion based on computational singular perturbation for the identification of quasi steady state species: A reduced mechanism for methane oxidation with NO chemistry. **Combustion and Flame**, v.154, p.761–774, 2008.

MALISKA, C. R. **Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional**. 2.ed. Rio de Janeiro/RJ: LTC, 2004.

MARINOV, N. M.; WESTBROOK, C. K.; PITZ, W. J. Detailed and Global Chemical Kinetics Model for Hydrogen. **Lawrence Livermore National Laboratory**, p.1–32, 1995.

OLIVEIRA, A. C. R. de; FERNANDA, N. G. S.; MOREIRA, M. A.; SILVA, R. M. da. O uso do hidrogênio como fonte energética. In: ENEGEP, 2011, Belo Horizonte/MG. **Anais...** XXXI Encontro Nacional de Engenharia de Produção, 2011.

OLIVEIRA, J. E. S.; LIMA, A. L. F. S.; SILVA, F. J.; GUIMARÃES, G.; NETO, A. S. Análise comparativa entre diferentes metodologias de modelagem de turbulência: URANS, DES e LES. In: SIMPÓSIO DO PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA, 14., 2014, Uberlândia-MG. **Anais...** 14° POSMEC, 2014.

PEREIRA, F. N. **Desenvolvimento de soluções analítico/numéricas para chamas difusivas turbulentas de hidrogênio**. 2012. 70p. Dissertação (Mestrado em Matemática Aplicada) — Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre/RS.

PEREIRA, R. L. **Simulação de Grandes Escalas de Escoamentos Turbulentos Usando Modelagem Dinâmica**. 2006. 163p. Dissertação (Mestrado em Engenharia Mecânica) — Universidade Estadual Paulista, Ilha Solteira.

PETERS, N. Laminar Flamelet Concepts in Turbulent Combustion. **Twenty-First Symposium on Combustion**, p.1250–1251, 1986.

PETERS, N. **Fifteen Lectures on Laminar and Turbulent Combustion**. Ercoftac Summer School, 1992.

PETERS, N. **Turbulent Combustion**. Cambridge University Press, 2004.

PETERS, N.; GÖTTGENS, J. Scaling of buoyant turbulent jet diffusion flames. **Combustion and Flame**, v.85, p.26–214, 1991.

PITSCH, H. Large-eddy simulation of turbulent combustion. **Annu. Rev. Fluid Mech.**, v.38, p.453–482, 2006.

POINSOT, T.; VEYNANTE, D. **Theoretical and Numerical Combustion**. R. T. Edwards, Inc., 2001.

POPE, S. B. **Turbulent Flows**. Cambridge University Press, 2000.

RAWAT, R.; PITSCH, H.; RIPOLL, J. P. Large eddy simulation of pool fires with detailed chemistry using an unsteady flamelet model. **Proceedings of Summer Program**, p.357–367, 2002.

RODRIGUES, T. E. **O hidrogênio como combustível**. 2008. Dissertação (Mestrado Integrado em Engenharia Mecânica) — Faculdade de Engenharia da Universidade do Porto.

SANTOS, F. M. S. M. dos; SANTOS, F. A. C. M. dos. O Combustível “Hidrogênio”. **Revista Educação, Ciência e Tecnologia**, n.31, p.252–270, 2005.

SCHIESTEL, R. **Modeling and Simulation of Turbulent Flows**. John Wiley & Sons, Inc, 2008.

SILVA, I. A. da. Hidrogênio: Combustível do Futuro. **Ensaio e Ciência: Ciências Biológicas, Agrárias e da Saúde**, v.20, n.2, p.122–126, 2016.

SOUZA, J. F. A. de; OLIVEIRA, L. R. de; AZEVEDO, J. L. de; SOARES, I. D.; MATA, M. M. Uma revisão sobre a turbulência e sua modelagem. **Revista Brasileira de Geofísica**, v.29, p.21–41, 2011.

SOUZA, P. R. C. **Investigação aerocústica de jatos subsônicos submetidos a escoamento cruzado**. 2015. 121p. Dissertação (Mestrado em Engenharia Mecânica) — Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia/MG.

URNS, S. R. **Introdução à combustão**. 3.ed. Porto Alegre/RS: McGraw Hill, 2013.

VAZ, F. A. **Desenvolvimento de Soluções analíticas e Numéricas para Chamas Difusivas**. 2010. 71p. Dissertação (Mestrado em Matemática Aplicada) — Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre/RS.

VAZ, F. A. **Modelagem e Simulação de Chamas Difusivas Turbulentas de Etanol**. 2013. 120p. Tese (Doutorado em Matemática Aplicada) — Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre/RS.

WARNATZ, J.; MASS, U.; DIBBLE, R. W. **Combustion: Physical and Chemical Fundamentals, Modeling and Simulation, Experiments, Pollutant Formation**. 4.ed. Springer, 2006.

WESTBROOK, C. K. Applying chemical kinetics to natural-gas combustion problems. **Lawrence Livermore National Laboratory**, 1985.

ZHIYIN, Y. Large-eddy simulation: Past, present and the future. **Journal of Aeronautics**, v.28, p.11–24, 2015.