

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS

FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA

ÁREA CONCENTRAÇÃO

DESENVOLVIMENTO DE PROCESSOS QUÍMICOS

*MÉTODO DOS VOLUMES FINITOS APLICADO À
MODELAGEM MATEMÁTICA E SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL
DE UM FORNO AQUECIDO POR JATO DE CHAMA
COM ESCOAMENTO EM VÓRTICE*

*Tese de Doutorado apresentada à Faculdade de Engenharia Química
como parte dos requisitos exigidos para a obtenção do título de Doutor em Engenharia Química*

TAKEO JONAS FUDIHARA

ORIENTADOR: MILTON MORI

CAMPINAS – SÃO PAULO

17 de Novembro de 2000

UNICAMP

BIBLIOTECA CENTRAL

SEÇÃO CIRCULANTE



2000.01.084

ii

UNIDADE	BE		
N.º CHAMADA:	UNICAMP		
	F951m		
V.	Ex.		
TOMBO BC/	43793		
PROC.	16-392101		
C	<input type="checkbox"/>	D	<input checked="" type="checkbox"/>
PREC.	R\$ 11,00		
DATA	14/02/01		
N.º CPD			



CM-00153260-B

FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA
BIBLIOTECA DA ÁREA DE ENGENHARIA - BAE - UNICAMP

F951m Fudihara, Takeo Jonas
Método dos volumes finitos aplicado à modelagem matemática e simulação computacional de um forno aquecido por jato de chama com escoamento em vórtice / Takeo Jonas Fudihara.--Campinas, SP: [s.n.], 2000.

Orientador: Milton Mori.
Tese (doutorado) - Universidade Estadual de Campinas, Faculdade de Engenharia Química.

1. Fornos. 2. Combustão. 3. Dinâmica dos fluidos – Modelos matemáticos. 4. Simulação (Computadores). 5. Escoamento turbulento. I. Mori, Milton. II. Universidade Estadual de Campinas. Faculdade de Engenharia Química. III. Título.

Tese de Doutorado defendida por Takeo Jonas Fudihara e aprovada em
17 de novembro de 2000 pela banca examinadora constituída pelos doutores:



Prof. Dr. - Milton Mori- Orientador



Prof. Dr. Reinaldo Giudici



Prof. Dr. Roberto de Campos Giordano




Prof.Dr. Waldir Pedro Martignoni



Prof. Dr. Reginaldo Guirardello

Este exemplar corresponde à versão final da Tese de Doutorado em Engenharia Química.



Orientador

Meus sinceros agradecimentos
à Fapesp, Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo (processo n° 96/05188-0)
pelo suporte financeiro,
à Unicamp, Universidade Estadual de Campinas pela acolhida,
ao orientador Milton Mori e aos colegas do laboratório de modelagem e simulação de processos
químicos pelo companheirismo,
e a todos aqueles que contribuíram, direta ou indiretamente, na realização deste trabalho.

RESUMO

Este trabalho de tese teve o propósito de buscar uma compreensão complementar das intrincadas inter-relações entre os complexos fenômenos de transferência de massa, momento e energia, que se desenvolvem em fornos com jatos de escoamento em vórtice, através da modelagem matemática e simulação computacional, em abordagens bidimensionais e tridimensionais. Analisa-se também a extensão dos efeitos do projeto geométrico, assim como, dos vários modelos matemáticos dentre os quais os modelos de turbulência e de combustão, sobre as características dos escoamentos simulados.

O forno cilíndrico é formado por uma câmara de combustão e um maçarico, sendo aquecido pelo contato direto de um jato de chama. O maçarico está posicionado no centro da parede circular em uma das extremidades da câmara de combustão. Este compõe-se de dois percursos incomunicáveis por onde os reagentes são injetados na câmara; o ar de combustão entra tangencialmente através da área anular, e o combustível através de seu duto interno.

O código fluido-dinâmico computacional CFX - versão 4.2, foi utilizado para a obtenção das soluções das equações de transporte, o qual emprega o método dos Volumes Finitos com variáveis co-localizadas resolvendo o sistema em coordenadas generalizadas. As malhas numéricas foram construídas através da técnica dos multi-blocos. Desta forma, as principais características destes fornos foram reproduzidas nesta investigação computacional.

ABSTRACT

This thesis had the purpose of reaching a complementary knowledge of the intricate inter-relations between the complex phenomena of mass, momentum and energy transfers, which develop in furnaces with vortex flows, by mathematical modelling and computational simulation, in two and three-dimensional approaches. Furthermore, the effects of the burner design and of the various mathematical models, such as the turbulence models and the combustion models on the characteristics of the simulated flows, were analysed.

The cylindrical furnace is formed by a combustion chamber and a burner, heated by the direct contact with a flame jet. The burner is positioned in the centre of the circular wall in the edge of the furnace chamber. It is composed by two incommunicable paths where the reactants are injected into the chamber; the combustion air enters tangentially by the annular area and the fuel by its internal duct.

The computational fluid-dynamics code CFX - 4.2 version, was used to obtain the solution of the transport equations, which employs the Finite Volume method with non-staggered variables solving the system in general curvilinear co-ordinates. The grids was constructed by the multi-block technique. Thus, the principal characteristics of these furnaces were reproduced in this computational investigation.

SUMÁRIO

LISTA DE FIGURAS	xvi
LISTA DE TABELAS	xviii
NOMENCLATURA	xix
1. INTRODUÇÃO	1
2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	5
2.1 SIMULAÇÃO DE FORNOS	5
2.2. MÉTODOS DOS VOLUMES FINITOS	10
2.2.1. Geração da Grade	10
2.2.2. Integração Numérica e Linearização	12
2.2.2.1. Termo Transiente	13
2.2.2.2. Termo Convectivo	14
2.2.2.2.1. Esquema das Diferenças Centrais	15
2.2.2.2.2. Esquema Upwind	15
2.2.2.2.3. Esquema Híbrido	16
2.2.2.3. Termo Difusivo	17
2.2.2.4. Termo Fonte	18
2.2.2.5. Equações Linearizadas	18
2.2.2.5.1. Relaxação	20
2.2.3. Solução do Sistema de Equações	21
2.2.4. Acoplamento Pressão-Velocidade	21
2.2.4.1. Arranjo Desencontrado	23
2.2.4.2. Arranjo Co-Localizado	26
3. DESENVOLVIMENTO DAS ANÁLISES NUMÉRICAS	29
3.1. EQUAÇÕES DE TRANSPORTE	29
3.1.1. Equação da Continuidade	30
3.1.2. Equação da Quantidade de Movimento	30
3.1.3. Equação da Energia	30
3.1.3.1 Transferência de Calor por Radiação Térmica	31
3.1.3.1.1. Aquecimento e Resfriamento nas Paredes	33
3.1.4. Modelos de Turbulência	34
3.1.4.1. Hipótese da Viscosidade Turbulenta	34

3.1.4.1.1. Modelo $k-\epsilon$	35
3.1.4.1.2. Modelo RNG $k-\epsilon$	36
3.1.4.1.3. Hipótese da Difusividade Turbulenta	37
3.1.4.1.4. Funções de Parede	39
3.1.4.2. Modelo dos Tensores de Reynolds na Forma Diferencial	40
3.1.5. Modelos de Combustão	42
3.1.5.1. Modelo de Combustão Mixed-is-Burnt	43
3.1.5.1.1. Modelo PDF para Reação Rápida Simplificada	45
3.1.5.2. Modelo de Combustão Eddy Break-up	46
3.1.5.2.1. Modelo de Fuligem de Magnussen	47
3.2. PRÉ-PROCESSAMENTO	49
3.2.1. Elaboração das Figuras Geométricas	51
3.2.1.1. Esquema Tridimensional do Forno	52
3.2.1.1.1. Gradeamento dos Blocos	54
3.2.1.2. Esquema Bidimensional do Forno	58
3.2.1.2.1. Sem Refratário e quatro metros de Comprimento	58
3.2.1.2.2. Com Refratário e seis metros de Comprimento	60
3.3. PROCESSAMENTO	60
3.3.1. Arquivo de Comando	61
3.3.1.1. Parâmetros para o Método dos Volumes Finitos	62
3.3.1.2. Condições de Contorno	64
3.3.1.2.1. Esquema Tridimensional do Forno	65
3.3.1.2.2. Esquema Bidimensional do Forno	65
3.3.1.2.2.1. Sem refratário e 4 metros de comprimento	65
3.3.1.2.2.2. Com refratário e 6 metros de comprimento	66
4. RESULTADOS E DISCUSSÕES	67
4.1. ESQUEMA TRIDIMENSIONAL	69
4.2. ESQUEMA BIDIMENSIONAL	101
4.2.1. Comprimento de Quatro metros	101
4.2.1.1. Modelo de Turbulência $k-\epsilon$	103
4.2.1.1.1. Modelo de Combustão Mixed-is-Burnt	103
4.2.1.1.1.1. Perda de Calor pelas Paredes	117
4.2.1.1.1.1.1 Cálculos Radiativos	119
4.2.1.1.1.2. Resíduo de Massa	125
4.2.1.1.2. Modelo de Combustão Eddy Break-up	127
4.2.1.1.2.1. Modelo de Fuligem de Magnussen	127

4.2.1.2. Modelo de Turbulência RNG k- ϵ	129
4.2.1.2.1. Coeficiente de Absortividade do Gás	133
4.2.1.2.2. Coeficiente de Emissividade das Paredes	134
4.2.1.3. Modelo de Turbulência dos Tensores Diferenciais	135
4.2.1.4. Comparação entre os modelos k- ϵ e RNG k- ϵ	139
4.2.2. Comprimento de Seis metros	141
4.2.2.1. Simulação Com o Método das Seções x CFX	149
4.3. BIDIMENSIONAL X TRIDIMENSIONAL	151
4.4. INCERTEZAS NAS CORROBORAÇÕES EXPERIMENTAIS	153
5. CONCLUSÕES E SUGESTÕES	155
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	159

LISTA DE FIGURAS

<i>Figura 2.1: Malha de Discretização Estruturada para o Método dos Volumes Finitos.....</i>	<i>12</i>
<i>Figura 2.2 : Malha de Discretização no plano xy.....</i>	<i>24</i>
<i>Figura 3.1: Dimensões do Forno.....</i>	<i>51</i>
<i>Figura 3.2 : Blocos de construção da câmara.....</i>	<i>52</i>
<i>Figura 3.3 : Representação esquemática da entrada do queimador.....</i>	<i>53</i>
<i>Figura 3.4 : Malha tridimensional da câmara.....</i>	<i>54</i>
<i>Figura 3.5 : Malha tridimensional do forno.....</i>	<i>55</i>
<i>Figura 3.6 : Malha tridimensional do queimador.....</i>	<i>55</i>
<i>Figura 3.7 : Desenho tridimensional do forno.....</i>	<i>56</i>
<i>Figura 3.8 : Desenho do queimador com as quatro entradas tangenciais.....</i>	<i>57</i>
<i>Figura 3.9 : Região de entrada bidimensional.....</i>	<i>58</i>
<i>Figura 3.10 : Blocos de construção da malha bidimensional.....</i>	<i>59</i>
<i>Figura 3.11 : Malha bidimensional do forno.....</i>	<i>59</i>
<i>Figura 3.12 : Blocos de construção da malha bidimensional.</i>	<i>60</i>
<i>Figura 3.13 : Malha bidimensional do forno).....</i>	<i>60</i>
<i>Figura 4.1 : Mapa de Velocidade Axial (I) (m/s).</i>	<i>71</i>
<i>Figura 4.2 : Topografia de Velocidade Axial (I).....</i>	<i>73</i>
<i>Figura 4.3 : Mapa de Velocidade Axial (II) (m/s).</i>	<i>75</i>
<i>Figura 4.4 : Topografia de Velocidade Axial (II) (m/s).</i>	<i>77</i>
<i>Figura 4.5 : Iso-Superfície de Velocidade Axial a -1,5 m/s.....</i>	<i>79</i>
<i>Figura 4.6 : Mapa de Velocidade Radial (m/s).....</i>	<i>81</i>
<i>Figura 4.7 : Topografia de Fração Mássica de Combustível.....</i>	<i>83</i>
<i>Figura 4.8 : Mapa de Fração Mássica de Combustível.</i>	<i>85</i>
<i>Figura 4.9 : Mapa de Fração Mássica de Oxidante.</i>	<i>87</i>
<i>Figura 4.10 : Mapa de Temperatura (K).....</i>	<i>89</i>
<i>Figura 4.11 : Topografia de Temperatura.</i>	<i>91</i>
<i>Figura 4.12 : Mapa de Pressão (Pa).....</i>	<i>93</i>
<i>Figura 4.13 : Mapa de Pressão (Pa).....</i>	<i>95</i>
<i>Figura 4.14 : Perfil Axial de Pressão.....</i>	<i>97</i>
<i>Figura 4.15 : Linhas de Corrente.....</i>	<i>98</i>
<i>Figura 4.16 : Vetores Velocidade na Saída do Maçarico.</i>	<i>99</i>
<i>Figura 4.17 : Vetores Velocidade a 1m da Parede Circular.....</i>	<i>100</i>
<i>Figura 4.18 : Mapa de Velocidade Axial (I) (m/s) – Modelo k-ε.</i>	<i>103</i>
<i>Figura 4.19 : Mapa de Velocidade Axial (II) (m/s) – Modelo k-ε.</i>	<i>103</i>
<i>Figura 4.20 : Mapa de Velocidade Radial (I) (m/s) – Modelo k-ε.</i>	<i>105</i>

<i>Figura 4.21 : Mapa de Velocidade Radial (II) (m/s) – Modelo k-ε</i>	105
<i>Figura 4.22 : Mapa de Fração Mássica de Combustível – Modelo k-ε</i>	107
<i>Figura 4.23 : Mapa de Fração Mássica de Oxidante – Modelo k-ε</i>	107
<i>Figura 4.24 : Mapa de Fração Mássica de Produtos – Modelo k-ε</i>	109
<i>Figura 4.25 : Densidade.(kg/m³) – Modelo k-ε</i>	109
<i>Figura 4.26 : Mapa de Temperatura (K) – Modelo k-ε</i>	111
<i>Figura 4.27 : Mapa de Pressão (Pa) – Modelo k-ε</i>	113
<i>Figura 4.28 : Linhas de Corrente – Modelo k-ε</i>	115
<i>Figura 4.29 : Mapa de Velocidade Axial (m/s) – Modelo k-ε</i>	117
<i>Figura 4.30 : Mapa de Temperatura (K) – Modelo k-ε</i>	117
<i>Figura 4.31 : Mapa de Velocidade Axial (m/s) – Modelo k-ε</i>	119
<i>Figura 4.32 : Mapa de Fração Mássica de Combustível – Modelo k-ε</i>	119
<i>Figura 4.33 : Mapa de Fração Mássica de Oxidante – Modelo k-ε</i>	121
<i>Figura 4.34 : Mapa de Fração Mássica de Produtos – Modelo k-ε</i>	121
<i>Figura 4.35 : Mapa de Temperatura (K) – Modelo k-ε</i>	123
<i>Figura 4.36 : Perfil Radial de Temperatura a 1m do Maçarico</i>	125
<i>Figura 4.37 : Perfil Radial de Velocidade Axial a 1 m do Maçarico</i>	125
<i>Figura 4.38 : Concentração de Fuligem (kg/kg) – Modelo k-ε</i>	127
<i>Figura 4.39 : Mapa de Velocidade Axial (m/s) – Modelo RNG k-ε</i>	129
<i>Figura 4.40 : Mapa de Velocidade Radial (m/s) – Modelo RNG k-ε</i>	129
<i>Figura 4.41 : Mapa de Fração Mássica de Combustível – Modelo RNG k-ε</i>	131
<i>Figura 4.42 : Mapa de Temperatura (K) – Modelo RNG k-ε</i>	131
<i>Figura 4.43 : Perfil de Temperatura na Análise Paramétrica da Absortividade do Gás</i>	133
<i>Figura 4.44 : Perfil de Pressão na Análise Paramétrica da Absortividade do Gás</i>	133
<i>Figura 4.45 : Perfil de Temperatura na Análise Paramétrica da Emissividade das Paredes</i>	134
<i>Figura 4.46 : Perfil de Pressão na Análise Paramétrica da Emissividade das Paredes</i>	134
<i>Figura 4.47 : Mapa de Velocidade Axial (m/s) – Modelo dos Tensores de Reynolds</i>	135
<i>Figura 4.48 : Mapa de Velocidade Radial (m/s) – Modelo dos Tensores de Reynolds</i>	135
<i>Figura 4.49 : Mapa de Fração Mássica de Combustível – Modelo dos Tensores de Reynolds</i>	137
<i>Figura 4.50 : Mapa de Temperatura (K) – Modelo dos Tensores de Reynolds</i>	137
<i>Figura 4.51 : Perfil Radial de Temperatura</i>	139
<i>Figura 4.52 : Perfil Radial de Velocidade Axial</i>	139
<i>Figura 4.53 : Campo de Velocidades Axiais (m/s) – Modelo k-ε</i>	143
<i>Figura 4.54 : Campo de Velocidades Radiais (m/s) – Modelo k-ε</i>	143
<i>Figura 4.55 : Fração Mássica de Combustível – Modelo k-ε</i>	145
<i>Figura 4.56 : Fração Mássica de Oxidante – Modelo k-ε</i>	145
<i>Figura 4.57 : Campo de Temperatura (K) – Modelo k-ε</i>	147
<i>Figura 4.58 : Linhas de Corrente – Modelo k-ε</i>	147

Figura 4.59 : Simulação com o método das seções (pontos conectados por linhas) e simulação através do software CFX (pontos sem conexão). 150

LISTA DE TABELAS

Tabela 3.1: Composição em função da fração de mistura. 44

Tabela 3.2: Função densidade de probabilidade. 46

Tabela 3.3: Dimensões da entrada do queimador.....53

Tabela 3.4: Exemplos de variáveis das equações de conservação atribuídas à equação genérica63

NOMENCLATURA

c	calor específico, $J/kg.K$;
f	fração de mistura;
g	aceleração da gravidade, m/s^2 ;
h	entalpia estática, J/kg ;
k	energia cinética turbulenta, m^2/s^2 ;
t	tempo, s ;
\vec{v}	vetor velocidade, m/s ;
B	força de campo (gravitacional, rotacional, resistência porosa), N/m^3 ;
D	número de Damköhler;
H	entalpia global, J/kg ;
P	pressão, N/m^2 ;
Q	fonte de calor por reação, $J/m^3.s$;
S	termo fonte;
T	temperatura, K ;
\mathcal{P}	número de Peclet;

Letras Gregas

β	coeficiente de expansão volumétrica, K^{-1} ;
δ	tensor unitário;
ε	taxa de dissipação de k , m^2/s^3 ;
ϕ	variável genérica;
φ	fração mássica;
κ	constante de von Karman;
λ	condutividade térmica, $W/m.K$;
ν	número equivalente de Prandtl;
μ	viscosidade molecular, $kg/m.s$;
ρ	massa específica, kg/m^3 ;

τ	tensor tensão;
ξ	viscosidade do <i>bulk</i> , $kg/m.s$;
ϑ	variância da fração de mistura;
Γ	coeficiente difusivo;

Constantes

C_{μ}	0,09;
$C_{1k-\epsilon}$	1,44;
$C_{2k-\epsilon}$	1,92;
C_{1RNG}	1,42;
C_{2RNG}	1,68;
C_{3RNG}	0,0;
C_s	0,22;
C_{1s}	1,8;
C_{2s}	0,6;
C_{3s}	0,5;
$C_{\vartheta 1}$	2,22;
$C_{\vartheta 2}$	2,00;
β_{RNG}	0,015;
η_0	4,38;
κ	constante de Von Karman (0,4187);
ν_k	1,00;
ν_{ϵ}	1,3;
ν_{kRNG}	0,7179;
$\nu_{\epsilon RNG}$	0,7179;
σ	constante de Stefan-Boltzmann ($5,670 \cdot 10^{-8} \text{ W/m}^2\text{K}^4$);

Subscrito

T turbulento;

Sobrescrito

T transposta;

1. INTRODUÇÃO

A ambição de encontrar expressões matemáticas que possam reproduzir os mais diversos fenômenos naturais parece ter despertado com o estabelecimento das primeiras noções de cálculo, e quando percebeu-se que os fenômenos da natureza eram regidos por leis possíveis de serem representadas por funções matemáticas. Assim, sucessivas propostas nas mais diversas áreas foram surgindo na tentativa de se descrever matematicamente a natureza. Dentro da ciência que passou a denominar-se mecânica dos fluidos, diversos fenômenos foram sendo reconhecidos tais como a condução, convecção, difusão entre outros. Os mesmos foram correlacionados a propriedades médias como a condutividade, a viscosidade ou a difusividade. Uma vez estabelecidos estes parâmetros intrínsecos aos fluidos em geral, as substâncias poderiam ser entendidas não somente através de suas propriedades químicas individuais, mas também através de suas propriedades físicas comuns, possibilitando o emprego de modelos matemáticos mais genéricos.

Este trabalho tem por objetivo o estudo numérico fluido-dinâmico de um forno aquecido por jato de chama gerado pela queima de combustível fóssil, e com escoamento em vórtice, através de modelagem e simulação computacional utilizando o código CFX – versão 4.2, o qual emprega o método dos Volumes Finitos em coordenadas generalizadas, com construção das malhas numéricas através da técnica dos multi-blocos. Estes fornos são largamente empregados em processos industriais. Dentre as suas várias aplicações incluem-se secagem, calcinação, conversões químicas, incineração, etc. A literatura sobre estes equipamentos era ainda bastante escassa até algumas décadas atrás, talvez devido à dificuldade de coleta de medidas experimentais em virtude das elevadas temperaturas de processo; ou também à dificuldade de uma classificação e padronização dos fornos em modelos distintos, talvez devido à grande variedade dos projetos. Por outro lado, a utilização de medidas intrusivas como os tubos de Pitot, além de inviáveis na maioria dos casos são questionáveis numa análise rigorosa, pois deixam sempre margens a erros provocados pela interferência da própria presença física destes sensores. Isto em regiões de severos gradientes poderia inviabilizar qualquer leitura. Geralmente a velocidade de entrada dos reagentes no maçarico é muito elevada chegando a se aproximar da velocidade sônica. Em seguida ocorre uma subta expansão dos gases na câmara, o que gera um escoamento complexo e de difícil aferição. Tudo

isto ocorrendo a temperaturas extremamente elevadas, geralmente acima do ponto de fusão dos metais em geral. Desta forma, dados fluido-dinâmicos coletados nestas regiões são escassos para um forno em funcionamento, e os mais comumente encontrados são os de temperatura, feitas externamente nas paredes, mais amenas devido à presença do revestimento refratário.

Os fornos constituem-se basicamente de duas partes principais: o maçarico e a câmara de combustão. A freqüente simplicidade do projeto da câmara de combustão contrasta com a complexidade funcional e variedade dos tipos de maçaricos a ela acoplados. Ignição, tempo de residência, erosão do refratário, emissão de gases poluentes, estabilidade da chama, são questões associadas à sua operação. O maçarico é o elemento essencial na avaliação funcional dos fornos, determinando a distribuição e pré-mistura entre o combustível e o ar de combustão; e também estabelecendo as principais características aerodinâmicas através do direcionamento e estruturação do jato de chama. Os reagentes pressurizados em seu interior, são lançados a altas velocidades no interior da câmara entrando em combustão. Dentre os vários tipos, uma classe distinta é o objeto de estudo deste trabalho, ou seja, aqueles que geram fluxos em vórtice. Chamas em vórtice são bastante difundidas em fornos onde o sistema requer um alto nível de turbulência e uma intensa capacidade de mistura. Desta forma o componente angular da velocidade provoca um escoamento em vórtice. Em conseqüência, gradientes adversos de pressão são produzidos e, quando a velocidade de giro é suficientemente elevada, surge uma região de reversão de fluxo no espaço central da câmara ao longo do eixo axial. Além disso, a reação de combustão intensifica a complexidade do escoamento turbulento assim como dos seus principais fenômenos. Neste caso de jato de chama confinado numa câmara onde não há fluido ambiente disponível devido ao isolamento imposto pelas paredes, surgem como conseqüência diversas circulações dos gases nas proximidades destas paredes. Estas circulações tornam-se importantes na estabilidade e na extensão da chama.

A simulação tridimensional simultânea entre o maçarico e a câmara, por outro lado, é extremamente complicada, principalmente devido à diferença de dimensão entre ambos e à complexidade geométrica do maçarico, onde este por ser muito menor, exige uma malha muito mais fina que a requerida pela câmara. Mas uma vez que ambos estejam conectados e as malhas de ambos sejam coincidentes, requer-se um refinamento também da malha da câmara na região que estende-se a partir da junção. Requer-se também um refinamento da malha nas regiões de escoamento complexo como as de reversão e circulação. Ao mesmo tempo, a complexidade

geométrica dos maçaricos necessita de um grande número de blocos e células para a construção de sua malha.

Com a adição dos modelos de combustão à malha tridimensional o tempo de processamento passou a ser fator limitante nas análises subsequentes, principalmente devido ao número elevado de volumes de controle e às limitações a nível do processamento computacional. Assim, optou-se pela continuidade das análises, como a introdução dos cálculos radiativos e o estudo dos modelos de turbulência, num modelo bidimensional partindo-se dos ajustes das condições de entrada através dos resultados obtidos pela malha tridimensional.

2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

2.1 SIMULAÇÃO DE FORNOS

As primeiras tentativas de predição matemática do comportamento dos fornos ou incineradores, apesar da simplicidade inicial, já reconheciam a preponderância da ação do maçarico sobre o comportamento do sistema fluido-dinâmico. Ricou & Spalding⁶¹ (1961) desenvolveram correlações empíricas para a taxa de entrada de ar secundário num jato de ar em espaço aberto. Esta entrada lateral de ar ocorreria como consequência do balanceamento das forças existentes entre o jato e o fluido ambiente, sendo seu fluxo uma função da distância em relação ao maçarico, da diferença entre as densidades dos fluidos e da vazão do jato. Thring & Newby desenvolveram correlações empíricas para jatos confinados no interior de uma câmara cilíndrica (Beér & Chigier³, 1972), enfocando as circulações que se desenvolvem devido à parede, apresentando uma concordância razoável com os dados experimentais para a razão de circulação, entretanto, necessitando do conhecimento do ângulo de abertura do jato que caracteriza o bico ejetor. Contudo este modelo derivou-se de casos específicos de entrada livre de ar secundário, ou seja, sem a existência das restrições de fluxo impostas pela parede de uma câmara. Posteriormente Craya & Curtet através de um procedimento analítico mais rigoroso, a partir das equações de continuidade de fluxo e da quantidade de movimento, também apresentaram resultados de boa concordância com os dados experimentais para a razão de circulação.

Os tipos de maçaricos disponíveis são bastante variados, com os trabalhos experimentais ocupando-se geralmente com jato de chama formado a partir de um maçarico específico. Outra prática comum é a utilização de um conjunto de maçaricos para uma mesma câmara, agrupados ou distribuídos. Por outro lado, atualmente ainda é prática comum no caso das simulações a partir de modelos mais rigorosos desconsiderar o maçarico, sendo o perfil de entrada estimado através de valores medidos ou de aproximações que sugerem uniformidade. Mas como será discutido adiante, a análise isolada da câmara de combustão de seu maçarico é uma aproximação insatisfatória e a correta definição das condições de entrada do escoamento

revelam-se fundamentais em qualquer estudo fluido-dinâmico. Além disso grande parte dos fornos necessitam que uma carga de processo seja transportada através de seu interior, de forma contínua ou semi-contínua, podendo esta estar na forma sólida, líquida ou pastosa. E a inclusão destes dispositivos de transporte podem vir a alterar suas propriedades aerodinâmicas significativamente. Uma descrição geral dos recentes avanços na área de simulação em fornos foi publicada por Correa & Shyy¹⁰ (1987).

A combustão apresenta uma taxa de reação extremamente elevada. Se por um lado isto impossibilita a modelagem cinética devido à instabilidade numérica que provoca, por outro possibilita simplificações consistentes pela escolha da taxa de mistura entre os reagentes como fator limitante da reação, a qual considera-se instantânea. Neste modelo de combustão dominada pela difusão, ou seja, governada pela fração de mistura média-temporal, o combustível e o oxidante não podem coexistir no mesmo local ao mesmo tempo, contudo, a sua fração mássica média pode (Lixing⁴⁴, 1993). Diversos trabalhos utilizando esta suposição já foram publicados para fornos. Khalil³⁷ (1981) usou este modelo para a combustão governada pela fração de mistura entre os reagentes e Kumar & Tamaru⁴⁰ (1997) utilizaram um mecanismo de reação de 25 passos, onde os valores médios foram obtidos da teoria estatística da turbulência cuja implementação foi apresentada em detalhes por Pope⁵⁸ (1985). Luo et al.⁴⁵ (1991), Barreiros et al.² (1993) e Coimbra et al.⁹ (1994) utilizaram modelo lagrangiano para a queima de partículas, de carvão no primeiro e terceiro caso e de óleo no segundo, com a utilização da fração de mistura. Coimbra et al.⁹ (1994) utilizou o método de Runge-Kutta para as partículas. May⁴⁸ (1994) utilizou uma expressão para a taxa de vaporização das gotas de combustível no cálculo da taxa de reação do combustível. Anand et al.¹ (1997) também utilizando a teoria estatística da turbulência apresentaram resultados com boa concordância com os dados experimentais.

A combustão em fornos é essencialmente um fenômeno turbulento. Por outro lado a simulação completa dos inúmeros e caóticos turbilhões que se desenvolvem num escoamento turbulento não apresenta ainda soluções práticas. Diversos modelos de turbulência simplificados passaram a ser propostos, mas como observado por Launder & Spalding⁴² (1974) um modelo de turbulência deve ser extensivamente aplicável utilizando o menor número possível de constantes empíricas. Os modelos mais difundidos dentro da engenharia até o presente são aqueles derivados da decomposição de Reynolds. Considera-se neste caso que uma variável genérica ϕ seja resultante da soma entre um valor médio e um valor flutuante:

$$\phi = \bar{\phi}(t) + \phi' \quad (2.1)$$

onde no método *Reynolds averaging* a média temporal é definida por:

$$\bar{\phi}(t) = \frac{1}{2\Delta t} \int_{t-\Delta t}^{t+\Delta t} \phi(t) dt \quad (2.2)$$

A aplicação desta média sobre as equações de balanço resultam no surgimento dos tensores e fluxos de Reynolds. Estes por sua vez foram modelados partindo-se da hipótese da viscosidade turbulenta, da qual originaram-se os populares modelos de duas equações $k-\epsilon$. Serag-Eldin & Spalding⁶⁴ (1981), Khalil³⁷ (1981), Barreiros et al.² (1993) e Choi & Baek⁷ (1996), realizaram simulações com modelo de turbulência $k-\epsilon$, sem combustão e com combustão para o primeiro e segundo caso respectivamente, onde os resultados foram preditos com precisão razoável e, para o terceiro, usando modelo de combustão lagrangiano e cálculos radiativos apresentaram boa aproximação, apesar do perfil ajustado para a entrada das gotículas de combustível. Entretanto Honnery & Kent³² (1989) através de medidas experimentais em um forno retangular vertical com escoamento em vórtice destacam pequenas diferenças obtidas na simulação, principalmente nas regiões centrais devido ao modelo $k-\epsilon$ ser isotrópico. Estes ajustaram os perfis próximos à parede através da alteração da constante de von Karman dentro da função de parede. Nas proximidades das paredes, a condição de contorno para a turbulência não recai exatamente sobre esta, devido à presença de uma sub-camada adjacente onde o escoamento aproxima-se do laminar conforme discutido por Launder & Spalding⁴², sendo o método da função de parede extensivamente utilizado.

Kumar & Tamaru⁴⁰ (1997) simularam um forno usando um outro método para o cálculo das médias denominado *Favre averaging* (Chen et al., 1991):

$$\tilde{\phi}(t) = \frac{1}{\bar{\rho}} \frac{1}{2\Delta t} \int_{t-\Delta t}^{t+\Delta t} \rho(t)\phi(t) dt \quad (2.3)$$

O modelo de turbulência RNG k - ϵ foi desenvolvido por Yakhot & Orszag⁷⁶ (1986). Morvan et al.⁴⁹ (1998) afirmam que este modelo apresenta vantagens em relação ao modelo k - ϵ , tais como a melhor previsão de escoamentos turbulentos vorticiais e escoamentos em regiões de fraca turbulência.

Os benefícios oferecidos pelos jatos vorticiais já são conhecidos à bastante tempo, tais como a intensa eficiência de mistura, circulação dos produtos aquecidos e de espécies químicas ativas, e elevada estabilidade da chama. Beér & Chigier³ (1972) citam três métodos de geração de vórtice: entrada tangencial através de um duto cilíndrico; tubos rotativos que transferem seu movimento ao fluido passando através dele; e o uso de hélices na direção axial do escoamento. É conhecido também que o aumento na velocidade de giro melhora a mistura e a vaporização dos combustíveis líquidos. O fator de giro, definido como o quociente entre o momento angular e o momento axial vezes o raio do bocal, serve de parâmetro para a avaliação da intensidade do giro³. A reversão de fluxo é um fenômeno observado sempre que são utilizadas entradas com elevado fator de giro. Vu & Gouldin⁷³ (1981), Khalil³⁷ (1981), Costa et al.¹¹ (1991) e Kenbar et al.³⁶ (1995) realizaram medidas experimentais observando o fenômeno da reversão central de fluxo. Serag-Eldin & Spalding⁶⁴ (1981) compararam resultados experimentais e de simulação em um forno com escoamento em vórtice. Vu & Gouldin⁷³ observaram instabilidades fluido-dinâmicas causadas por oscilações no escoamento em vórtice. Beér & Chigier (1972)³ citam que o fluxo reverso atua na estabilidade da chama o que foi mais recentemente observado experimentalmente por Barreiros et al.² (1993), o qual também realizou medidas experimentais registrando que a produção de NO_x reduziu-se de aproximadamente 355 a 95 ppm com um aumento do fator de giro de 0,6 a 1,3.

As elevadas temperaturas que se verificam no interior dos fornos implica em alta taxa de transferência de calor por radiação térmica, a qual é proporcional à quarta potência da temperatura. A aproximação de superfície cinzenta (emissividade equivalente à absortividade) torna-se razoável quando a radiação emitida e a incidente ficam confinadas num mesmo intervalo de comprimento de onda e a emissividade espectral é relativamente constante neste intervalo. Outra aproximação usual é a atribuição de superfície difusa, onde a intensidade da radiação refletida ou emitida é uniformemente redistribuída seja qual for a natureza ou a direção da radiação incidente. Barreiros et al.² (1993) calcularam as trocas radiativas através da integração da equação da intensidade de radiação para ângulos sólidos discretos onde o modelo

two-grey-plus-clear-gas foi usado para calcular o coeficiente de absorção do gás. May⁴⁸ (1994) calculou as transferências radiativas através do modelo *six-flux* onde medidas em escala piloto também foram necessárias. Coimbra et al.⁹ (1994) utilizaram o modelo *discrete transfer* através da abordagem *two-grey-plus-clear-gas*. Choi & Baek⁷ (1996) utilizaram o método *weighted sum of gray gas model*, considerando os efeitos do momento de dipolo de gases como CO₂, CO, H₂O, NH₃ e hidrocarbonetos que absorvem e emitem radiação somente em determinados comprimentos de onda, sendo que esta seletividade varia com a temperatura, pressão e forma do gás (Hottel & Sarofim³³, 1967 e Sparrow & Cess⁶⁹, 1970).

2.2. MÉTODOS DOS VOLUMES FINITOS

As complexas formulações de Navier-Stokes aplicadas para a hipótese de um meio contínuo, apresentadas inicialmente por Navier em 1822 (Bird et al.¹, 1960), constituíram-se no ponto de partida do desenvolvimento e aperfeiçoamento de diversas técnicas de solução aplicadas à engenharia. Paralelamente às analíticas, as técnicas numéricas obtiveram um impulso extraordinário com o aumento de desempenho do processamento computacional, tanto a nível de hardware como de software. Os métodos numéricos das diferenças finitas e, mais recentemente o dos volumes finitos, o qual está sendo empregado neste trabalho, adaptaram-se facilmente aos princípios lógicos do tratamento de dados computacional. Ambos os métodos compreendem alguns procedimentos básicos comuns e que serão discutidos para o método dos volumes finitos em malha estruturada: geração da grade, integração numérica e obtenção das equações linearizadas, e solução do sistema de equações resultante – os quais já foram explorados extensivamente na literatura (Maliska⁴⁶, 1995 e Patankar⁵⁴, 1980) e que serão abordados aqui apenas brevemente.

2.2.1. Geração da Grade

Aplicando-se a série de Taylor à solução de uma equação, observa-se que esta solução é obtida sobre pontos discretos, os quais representam uma posição no espaço ou um instante no tempo e estão distribuídos no interior do domínio de cálculo. Quando estes pontos são conectados entre si através das linhas de operação, o conjunto apresenta-se como se fosse uma grade, de onde provém a denominação. Esta mesma percepção foi estendida a outros métodos, entre os quais o dos volumes finitos tratado aqui. Uma malha estruturada está representada parcialmente na Figura 2.1 por uma célula central e suas células adjacentes.

No arranjo co-localizado, ao contrário do desencontrado, os centros dos volumes utilizados pelas diferentes equações de balanço são coincidentes. Este arranjo apareceu como

uma questão polêmica. Alguns autores como Patankar, defensores do arranjo desencontrado, opunham-se a este tipo de tratamento devido aos inconvenientes como o *chequeboard* ou à interpolação da pressão através apenas dos valores dos volumes adjacentes sem passar pelo volume central (Patankar & Spalding⁵⁵, 1972 e Patankar⁵⁴, 1980). Contudo uma desvantagem do arranjo desencontrado está em sua implementação muito mais dispendiosa em termos de programação, principalmente em se tratando de malhas tridimensionais. Devido a este fato o arranjo co-localizado passou a ser considerado uma opção mais atraente (Maliska⁴⁶, 1995).

Duas posições de aplicação das condições de contorno às células da fronteira são normalmente aplicadas: coincidindo com as faces ou coincidindo com os centros dessas células. Entretanto, quando se faz com que a condição de contorno incida sobre o ponto central, parte do volume da célula fica fora do domínio de cálculo, o que traz vários inconvenientes no fechamento dos balanços de conservação. No segundo caso, quando se faz a fronteira incidir sobre a face externa da célula de fronteira, um balanço específico necessita ser feito para a porção da célula que vai desta face ao ponto central. Outra maneira mais simples para este segundo caso, e que também respeita os princípios de conservação, é a técnica dos volumes fictícios, a qual consiste em adicionar um volume em posição adjacente a cada volume de fronteira do lado externo ao domínio de cálculo e cuja interface entre ambos recaia sobre as condições de contorno. Isto permite um balanço consistente para os volumes de fronteira, sendo o volume externo denominado de fictício devido à sua existência ser justificada apenas para efeito de cálculo, sendo este o procedimento utilizado pelo software *CFX*.

No sistema de coordenadas generalizadas o domínio matemático do espaço físico irregular em coordenadas cartesianas é transformado num domínio matemático de espaço computacional regular em coordenadas curvilíneas e as integrações do método dos volumes finitos são feitas nesse novo sistema. Esta transformação torna-se vantajosa para formas complexas, já que as equações são discretizadas num espaço transformado regular, onde as malhas apresentam a vantagem de poderem ser igualmente espaçadas, ortogonais e com um comprimento unitário para todas as células.

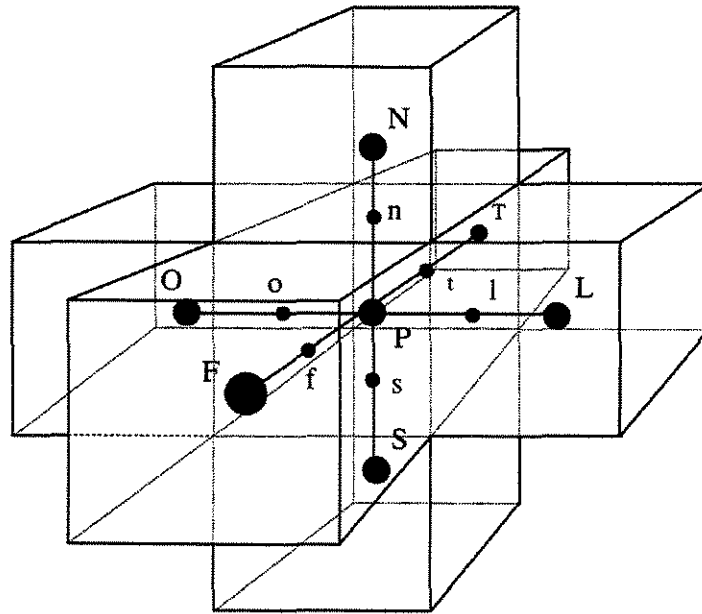


Figura 2.1: Malha de Discretização Estruturada para o Método dos Volumes Finitos.

2.2.2. Integração Numérica e Linearização

Considere-se a equação genérica para as equações de transporte:

$$\frac{\partial \rho \phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \bar{v} \phi) = \nabla \cdot (\Gamma_{\phi} \nabla \phi) + S_{\phi} \quad (2.4)$$

onde ϕ representa uma variável dependente generalizada, t é o tempo, ρ é a densidade, \bar{v} é o vetor velocidade, Γ_{ϕ} o coeficiente difusivo e S_{ϕ} o termo fonte. Aplicando a lei de Gauss para os divergentes e integrando a equação anterior no volume de controle \mathbb{V} de área superficial \mathbb{A} de normal \bar{n} :

$$\int \frac{\partial \rho \phi}{\partial t} dV + \int \rho \phi \bar{v} \cdot \bar{n} dA = \int \Gamma_{\phi} \nabla \phi \cdot \bar{n} dA + \int S_{\phi} dV \quad (2.5)$$

Conforme a Figura 2.1, observa-se que a célula com centro em P possui seis pontos de interface designados pelas letras minúsculas (l, o, n, s, f e t) e seis volumes adjacentes cujos pontos centrais estão representados pelas letras maiúsculas (L, O, N, S, F e T). As malhas regulares tornam-se especialmente vantajosas neste caso pois estes pontos cardiais podem ter um valor constante para os respectivos eixos em coordenadas cartesianas (x, y, z). Assim, por exemplo, os pontos l, o, L e O apresentam o mesmo valor de x , os pontos n, s, N e S apresentam o mesmo y e, os pontos f, t, F e T o mesmo z , simplificando o processo de integração. Ainda aproveitando esta uniformidade com os eixos coordenados, assume-se que o símbolo \oplus corresponda à posição de interface l (ou n ou f) e \ominus à posição oposta o (ou s ou t) respectivamente; assim como o símbolo \odot corresponda à posição do centro L (ou N ou F) e \ominus à posição oposta O (ou S ou T) respectivamente. Nas discussões que se seguem é importante manter em mente a existência desta reciprocidade entre os pares de mesma direção (\oplus e \ominus) e (\odot e \ominus) sempre que os mesmos apareçam juntos.

2.2.2.1. Termo Transiente

Integrando-se numericamente o termo transiente num intervalo de tempo Δt , aplicando a formulação totalmente implícita e, através da aproximação *Backward Euler*, resulta:

$$\int \frac{\partial \rho \phi}{\partial t} dV = (\rho^n f_l \phi_P^n - \rho^{n-1} f_2 \phi_P^{n-1} - \rho^{n-2} f_3 \phi_P^{n-2}) \mathbf{V} \quad (2.6)$$

onde os coeficientes f_1 , f_2 e f_3 valem respectivamente $(\Delta t)^{-1}$, $(\Delta t)^{-1}$ e 0 para formulação de primeira ordem; e $\frac{2\Delta t + \Delta t_0}{\Delta t(\Delta t + \Delta t_0)}$, $\frac{\Delta t + \Delta t_0}{\Delta t\Delta t_0}$ e $-\frac{\Delta t}{\Delta t_0(\Delta t + \Delta t_0)}$ para a formulação de segunda ordem ou quadrática. O sobrescrito n está associado ao instante de tempo entre os passos de tempo, ϕ_P é o valor de ϕ no ponto central P e Δt_0 é o passo de tempo da iteração anterior. (Guia do Usuário do CFX, 1997)²⁸. Por comodidade ϕ_P^n será representado apenas por ϕ_P .

Outra aproximação é o método de *Crank-Nicolson*, onde a variável utilizada ϕ_P^* corresponde a um valor médio entre ϕ_P^n e ϕ_P^{n-1} .

2.2.2.2. Termo Convectivo

Variáveis correlacionadas aos pontos sobre as interfaces surgem durante o processo de discretização do termo convectivo para a equação do momento. Integrando-se este termo, obtém-se:

$$\begin{aligned} \int \rho \phi \vec{v} \cdot \vec{n} dA &= \sum_P^3 (F_{\oplus} A_{\oplus} \phi_{\oplus} - F_{\ominus} A_{\ominus} \phi_{\ominus}) \\ &= \sum_P^3 (C_{\oplus} \phi_{\oplus} - C_{\ominus} \phi_{\ominus}) \end{aligned} \quad (2.7)$$

onde o somatório refere-se às três direções coordenadas, F é o fluxo convectivo ($\rho \mathbf{v}$) e C é o produto do fluxo convectivo pela sua área normal A . O subscrito abaixo do somatório indica que a integração está sendo realizada no volume centrado em P .

Para que possam ser geradas as equações linearizadas pelo agrupamento dos termos comuns, as variáveis com endereço nas interfaces \oplus e \ominus devem ser aproximadas pelos valores

dos centros, o que é feito através do esquema de interpolação. Sabe-se que estes esquemas são determinantes na precisão da solução. Entretanto, esquemas muito elaborados tendem a ser menos robustos e mais lentos. Correa & Shyy¹⁰ (1987) constataram que a precisão também muda se o problema for tratado como transiente ou como estado estacionário. O método de interpolação *Rhie-Chow* (Rhie & Chow⁶⁰, 1983; Guia do Usuário do CFX²⁸, 1997) visa a amenizar os inconvenientes citados por Patankar para o arranjo co-localizado. De qualquer forma este é um tema que deve ser tratado com cuidado pois geralmente interfere nos resultados.

2.2.2.2.1. Esquema das Diferenças Centrais

Neste esquema a variável da interface é substituída pela média das variáveis dos pontos centrais dos volumes adjacentes:

$$\phi_{\oplus} = \frac{\phi_P + \phi_{\ominus}}{2} \quad (2.8)$$

$$\phi_{\ominus} = \frac{\phi_P + \phi_{\oplus}}{2} \quad (2.9)$$

Entretanto, este método tem uma aplicação limitada, pois na maior parte dos problemas não satisfaz o critério de convergência numérico de Scarborough, tendo seu limite de validade confinado a escoamento de baixos números de Reynolds (Patankar⁵⁴, 1980).

2.2.2.2.2. Esquema Upwind

Neste esquema as variáveis nas interfaces simplesmente adotam o valor de velocidade do ponto central de um dos volumes adjacentes. Entretanto, sendo a interface comum à duas células, surge a questão da escolha da célula que fornecerá o seu valor central de velocidade: $\phi_{\oplus} = \phi_P$ ou $\phi_{\oplus} = \phi_{\ominus}$? Da mesma forma: $\phi_{\leftarrow} = \phi_{\ominus}$ ou $\phi_{\leftarrow} = \phi_P$? Esta opção de escolha na realidade constituiu-se na saída encontrada para se corrigir a deficiência numérica para o critério de convergência. Assim, a célula escolhida para fornecer seu valor central será aquela que estiver a montante em relação à direção do componente do vetor velocidade do fluxo convectivo em questão. Através de um artifício matemático (Patankar⁵⁴, 1980), pode-se escrever:

$$F_{\oplus}\phi_{\oplus} = \phi_P \left[[F_{\oplus}, 0] \right] - \phi_{\ominus} \left[[-F_{\oplus}, 0] \right] \quad (2.10)$$

$$F_{\leftarrow}\phi_{\leftarrow} = \phi_{\ominus} \left[[F_{\leftarrow}, 0] \right] - \phi_P \left[[-F_{\leftarrow}, 0] \right] \quad (2.11)$$

onde o operador $\left[\left[\right] \right]$ escolhe o maior dentre os valores de seus termos. Isto garante que o coeficiente da equação linearizada mantenha-se sempre positivo satisfazendo um dos critérios de convergência. Por outro lado, já são bastante conhecidos os efeitos de difusão numérica ocasionados por este esquema.

2.2.2.2.3. Esquema Híbrido

O esquema híbrido utiliza três aproximações diferentes para as variáveis de interface conforme o valor do número de Peclet (\mathcal{P}). Para $-2 \leq \mathcal{P} \leq +2$ a aproximação é idêntica ao

esquema das *diferenças centrais*, sendo que fora deste intervalo o esquema se reduz ao *upwind* mas com a anulação dos termos difusivos. O número de Peclet na interface é definido por:

$$\mathcal{P}_{\oplus} = \frac{F_{\oplus}}{\Gamma_{\oplus} / \delta_{\oplus}} \quad \text{e} \quad \mathcal{P}_{\ominus} = \frac{F_{\ominus}}{\Gamma_{\ominus} / \delta_{\ominus}} \quad (2.12)$$

onde δ_{\oplus} é a distância do ponto central P ao ponto central do volume adjacente \odot . De forma idêntica δ_{\ominus} é a distância do ponto central P ao ponto central do volume adjacente \ominus .

2.2.2.3. Termo Difusivo

A integração do termo difusivo resulta em:

$$\begin{aligned} \int \Gamma_{\phi} \nabla \phi \cdot \bar{n} d\mathbf{A} &= \sum_P^3 \left[\frac{\Gamma_{\oplus} \mathbf{A}_{\oplus}}{\delta_{\oplus}} (\phi_{\odot} - \phi_P) - \frac{\Gamma_{\ominus} \mathbf{A}_{\ominus}}{\delta_{\ominus}} (\phi_P - \phi_{\ominus}) \right] \\ &= \sum_P^3 \left[\mathbb{D}_{\oplus} (\phi_{\odot} - \phi_P) - \mathbb{D}_{\ominus} (\phi_P - \phi_{\ominus}) \right] \end{aligned} \quad (2.13)$$

onde Γ representa a difusividade e \mathbb{D} equivale a $\Gamma \mathbf{A} / \delta$.

2.2.2.4. Termo Fonte

A integral do termo fonte é expressa por:

$$\int S_\phi dV = S_u \nabla + S_p \nabla \phi_p \quad (2.14)$$

Tomando-se o exemplo citado por Maliska⁴⁷ (1995), seja S_ϕ representada pela função $(3-7\phi_p)$, uma das opções possíveis para a integração do termo fonte é fazendo:

$$\int (3-7\phi_p) dV = (3+9\phi_p^*) \nabla - 2 \nabla \phi_p \quad (2.15)$$

onde S_u passa a valer $(3+9\phi_p^*)$ e S_p a -2 e ϕ_p^* é a estimativa da iteração ou passo de tempo anteriores de ϕ_p . Percebe-se portanto a possibilidade de números ilimitados de combinações possíveis. Entretanto, esta linearização do termo fonte deve ser feita de forma a que o coeficiente S_p tenha um elevado valor negativo para reduzir a possibilidade de divergência numérica e garantir a dominância da diagonal da matriz. Em contrapartida, isto gera por sua vez um elevado valor para o coeficiente S_u o que diminui a velocidade de convergência. Além disso, não existe ainda nenhum critério para a escolha da combinação ótima entre estes coeficientes. Por outro lado, para o modelo de turbulência $k-\epsilon$, tanto para a equação de k quanto para a de ϵ uma das opções é colocar todo o termo S_ϕ em S_u , pois tratam-se neste caso de variáveis físicas (Guia do Usuário do CFX, 1997)²⁸.

2.2.2.5. Equações Linearizadas

A próxima etapa consiste no agrupamento das variáveis semelhantes definindo-se os coeficientes das equações linearizadas “a”. Aplicando a aproximação *Backward Euler* para o termo transiente, tem-se para cada volume uma equação representativa de cada uma das equações de balanço:

$$a_p \phi_p = \sum_P^3 \left(a_{\ominus} \phi_{\ominus} + a_{\omin�} \phi_{\omin�} \right) + S_u \mathbf{V} + \frac{\rho_p^{n-1} \phi_p^{n-1} \mathbf{V}}{\Delta t} \quad (2.16)$$

onde

$$a_p = \sum_P^3 \left(a_{\ominus} + a_{\omin�} \right) - S_p \mathbf{V} + \frac{\rho_p \mathbf{V}}{\Delta t} + \sum_{\oplus}^3 \left(\mathbf{C}_{\oplus} - \mathbf{C}_{\omin�} \right) \quad (2.17)$$

e no estado estacionário o somatório dos coeficiente convectivos $\sum_{\oplus}^3 \left(\mathbf{C}_{\oplus} - \mathbf{C}_{\omin�} \right)$ tende a zero para a solução convergida. Através de um artifício matemático pode-se generalizar a aplicação dos esquemas de interpolação. Desta forma, os coeficientes das variáveis laterais podem ser ajustados através das funções $f(\mathcal{P}_{\oplus})$ e $f(\mathcal{P}_{\omin�})$ (Patankar⁵⁴, 1980). Assim:

$$a_{\ominus} = \mathbb{D}_{\oplus} f(\mathcal{P}_{\oplus}) + \left[-\mathbf{C}_{\oplus}, 0 \right] \quad (2.18)$$

$$a_{\omin�} = \mathbb{D}_{\omin�} f(\mathcal{P}_{\omin�}) + \left[\mathbf{C}_{\omin�}, 0 \right] \quad (2.19)$$

onde para o esquema das *diferenças centrais*, estas funções equivalem a:

$$f(\mathcal{P}_{\oplus}) = 1 - \frac{|\mathcal{P}_{\oplus}|}{2} \quad \text{e} \quad f(\mathcal{P}_{\omin�}) = 1 - \frac{|\mathcal{P}_{\omin�}|}{2} \quad (2.20)$$

para o *upwind* a:

$$f(\mathcal{P}_\ominus) = 1 \text{ e } f(\mathcal{P}_\ominus) = 1 \quad (2.21)$$

e para o *híbrido* a:

$$f(\mathcal{P}_\ominus) = \left\| 0, 1 - \frac{|\mathcal{P}_\ominus|}{2} \right\| \text{ e } f(\mathcal{P}_\ominus) = \left\| 0, 1 - \frac{|\mathcal{P}_\ominus|}{2} \right\| \quad (2.22)$$

2.2.2.5.1. Relaxação

Patankar⁵⁴ (1980) sugere dois métodos de relaxação da equação 2.16:

$$\frac{a_P}{\alpha} \phi_P = \sum_P^3 \left(a_{\ominus} \phi_{\ominus} + a_{\ominus} \phi_{\ominus} \right) + S_u \mathbf{V} + \frac{\rho_P^{n-1} \phi_P^{n-1} \mathbf{V}}{\Delta t} + \frac{(1-\alpha)}{\alpha} \phi_P^* \quad (2.23)$$

ou

$$(a_P + \alpha) \phi_P = \sum_P^3 \left(a_{\ominus} \phi_{\ominus} + a_{\ominus} \phi_{\ominus} \right) + S_u \mathbf{V} + \frac{\rho_P^{n-1} \phi_P^{n-1} \mathbf{V}}{\Delta t} + \alpha \phi_P^* \quad (2.24)$$

onde α é o coeficiente de relaxação e ϕ_P^* é o valor obtido na iteração anterior. A aplicação da Equação 2.16 a todos os volumes do domínio de cálculo tem como resultado um sistema de equações linearizadas com n equações e n incógnitas ϕ_P . Quando utilizam-se volumes fictícios na fronteira, novas expressões para ϕ_P devem ser determinadas para estes volumes, conforme

esteja-se tratando de um valor prescrito ou um fluxo prescrito nesta fronteira (Maliska⁴⁶, 1995). Neste caso novas equações e novas incógnitas são acrescentadas ao sistema. As Equações 2.23 e 2.24 são preferíveis no caso em que um método iterativo de solução esteja sendo utilizado. Nestes casos, a convergência pode ser acelerada ou retardada para evitar a divergência ou as oscilações. Na primeira formulação a relaxação gira em torno da unidade e na segunda em torno do zero, valores em que têm seus efeitos anulados. Uma outra alternativa para a relaxação das equações é conhecida como falso transiente, sendo o tratamento semelhante ao transiente real, contudo, os valores utilizados para ϕ são os valores mais recentes e, o passo de tempo pode ser escolhido arbitrariamente.

2.2.3. Solução do Sistema de Equações

A solução do sistema de equações constitui-se na etapa mais dispendiosa em termos de processamento computacional, principalmente em se tratando de escoamentos complexos com o envolvimento de grande número de fenômenos físicos. Na presente versão do CFX o método de solução é iterativo, ou seja, através da minimização dos erros de aproximação e aplicação da relaxação conforme a equação 2.23. O sistema de equações pode ser resolvido por métodos iterativos tais como o *line solver*, *stone*, *block stone* ou *AMG* cuja escolha é feita de acordo com as características de convergência (Guia do Usuário do CFX, 1997)²⁸.

2.2.4. Acoplamento Pressão-Velocidade

Quando a equação de interesse for a equação do momento, surge a questão da determinação do campo de pressão ou uma expressão que o represente, o qual faz parte do termo fonte desta equação. Sendo os balanços feitos num volume de controle, a utilização da

equação da continuidade representando a conservação de massa surge naturalmente como esta opção. Os campos de pressão que irão definir as velocidades nas interfaces deverão satisfazer a esta conservação de massa, que integrada:

$$\int \frac{\partial \rho}{\partial t} dV + \int \rho \bar{v} \cdot \bar{n} dA = 0 \quad (2.25)$$

resulta:

$$\frac{(\rho_P - \rho_P^{n-1})V}{\Delta t} + \sum_P^3 (\rho_{\oplus} v_{\oplus} A_{\oplus} - \rho_{\ominus} v_{\ominus} A_{\ominus}) = 0 \quad (2.26)$$

Assim, as velocidades v_{\oplus} e v_{\ominus} nesta equação deverão ser substituídas por uma expressão para os campos de pressão. Nos métodos iterativos, o avanço no cálculo da pressão é dado por:

$$P = P^* + P' \quad (2.27)$$

onde P^* é a estimativa do campo de pressão e P' é a sua correção. Os campos de pressão, calculados através do algoritmo do acoplamento pressão-velocidade, não são obtidos em relação a um referencial fixado explicitamente. A pressão absoluta vai sendo atualizada de acordo com a equação da correção da pressão a qual utiliza uma condição de contorno específica. Esta por sua vez irá definindo os gradientes de pressão os quais são os valores de interesse.

Novamente recorrendo-se à Figura 2.1, verifica-se que os volumes adjacentes ao volume com centro em P são em número de seis numa malha tridimensional, três dos quais fazem interface em \oplus e três em \ominus . Cada um destes volumes adjacentes tem mais uma

interface na direção oposta a \oplus e $\overset{\leftarrow}{\oplus}$, os quais serão designadas por $\oplus\oplus$ e $\overset{\leftarrow}{\oplus}\overset{\leftarrow}{\oplus}$ respectivamente. Da mesma forma, os centros dos segundos volumes serão designados por $\odot\odot$ e $\overset{\leftarrow}{\odot}\overset{\leftarrow}{\odot}$ respectivamente. Por exemplo, na Figura 2.2 a posição *II* refere-se à interface $\oplus\oplus$ em relação ao volume centrado em *P* a qual fica entre o volume adjacente com centro em *P1* e o seu volume adjacente com centro em *L1*.

2.2.4.1. Arranjo Desencontrado

No arranjo desencontrado a mesma fórmula para o avanço da pressão é válido para os campos de velocidade na interface:

$$v_{\oplus} = v_{\oplus}^* + v'_{\oplus} \quad (2.28)$$

$$v_{\overset{\leftarrow}{\oplus}} = v_{\overset{\leftarrow}{\oplus}}^* + v'_{\overset{\leftarrow}{\oplus}} \quad (2.29)$$

onde v_{\oplus}^* e $v_{\overset{\leftarrow}{\oplus}}^*$ são as estimativas dos campos de velocidade e v'_{\oplus} e $v'_{\overset{\leftarrow}{\oplus}}$ são as correções destes campos. Patankar⁵⁴ (1980) descreve os procedimentos do algoritmo SIMPLE para o arranjo desencontrado. Fazendo ϕ equivalente à velocidade na Equação 2.16, obtém-se a equação do momento, quando pode ser imaginado que, ao invés do ponto *P* como o ponto central, um novo volume seja gerado com centro num de seus pontos de interface \oplus ou $\overset{\leftarrow}{\oplus}$. Desta forma, o ponto que é central para o primeiro volume, passa a ser de interface para o segundo, sendo esta a essência do arranjo desencontrado.

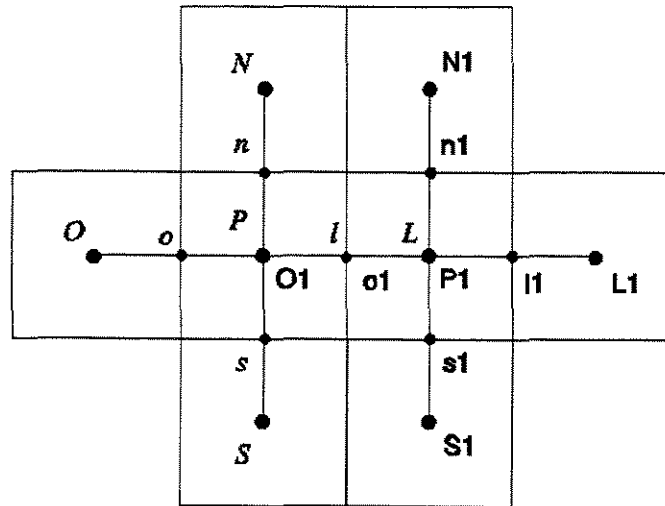


Figura 2.2.: Malha de Discretização no plano xy .

Patankar⁵⁴ (1980) sugeriu após manipulações da equação do momento para v'_{\ominus} e v'_{\leftarrow} , que os campos de velocidade podem ser obtidos por:

$$v_{\ominus} = v_{\ominus}^* + \frac{(P'_{\circ} - P'_p) \Delta_{\ominus}}{a_{\ominus}} \quad (2.30)$$

$$v_{\leftarrow} = v_{\leftarrow}^* + \frac{(P'_{\leftarrow} - P'_p) \Delta_{\leftarrow}}{a_{\leftarrow}} \quad (2.31)$$

onde as variáveis de pressão foram extraídas do termo fonte da equação do momento, e os coeficientes valem:

$$a_{\ominus} = \sum_{P_{\ominus}}^3 (a_{\leftarrow} + a_{\ominus\ominus}) - \ominus S_p V_{\ominus} + \frac{\rho_{\ominus} V_{\ominus}}{\Delta t} \quad (2.32)$$

$$a_{\oplus}^{\leftarrow} = \sum_{P_{\oplus}}^3 \left(a_{\oplus} + a_{\oplus}^{\leftarrow} \right) - \leftarrow S_P \mathbf{V} + \frac{\rho_{\oplus}^{\leftarrow} \mathbf{V}_{\oplus}^{\leftarrow}}{\Delta t} \quad (2.33)$$

onde os subscritos P_{\oplus} e P_{\oplus}^{\leftarrow} sob os somatórios indicam que os balanços foram feitos para um volume deslocado onde o seu centro está na interface do volume centrado em P . Substituindo estes campos de velocidade na equação da continuidade 2.26, obtém-se a equação para a correção de pressão:

$$b_p P_p^i = \sum_P^3 \left(b_{\circ} P_{\circ}^i + b_{\circ}^{\leftarrow} P_{\circ}^i \right) + b_u \quad (2.34)$$

sendo

$$b_p = \sum_{\circ}^3 \left(b_{\circ} + b_{\circ}^{\leftarrow} \right) \quad (2.35)$$

$$b_{\circ} = \rho_{\oplus} \frac{\mathbf{A}_{\oplus}}{a_{\oplus}} \mathbf{A}_{\oplus} \quad (2.36)$$

$$b_{\circ}^{\leftarrow} = \rho_{\oplus}^{\leftarrow} \frac{\mathbf{A}_{\oplus}^{\leftarrow}}{a_{\oplus}^{\leftarrow}} \mathbf{A}_{\oplus}^{\leftarrow} \quad (2.37)$$

$$b_u = \frac{(\rho_P^{n-1} - \rho_P) \mathbf{V}}{\Delta t} + \sum_{\oplus}^3 \left(\rho_{\oplus} v_{\oplus}^* \mathbf{A}_{\oplus} - \rho_{\oplus}^{\leftarrow} v_{\oplus}^* \mathbf{A}_{\oplus}^{\leftarrow} \right) \quad (2.38)$$

Obtidos os campos de pressão através da Equação 2.27, novas estimativas para os campos de velocidade podem ser obtidas.

2.2.4.2. Arranjo Co-Localizado

O algoritmo *SIMPLEC* é uma modificação do precedente e segundo Van Doormal & Raithby⁷² (1984) apresenta melhores características de estabilidade. No arranjo co-localizado não surgem velocidades explícitas para as interfaces necessitando-se, portanto, que sejam realizadas interpolações com os valores dos centros dos volumes. Maliska⁴⁶ (1995) sugere as seguintes interpolações para a obtenção das velocidades na interface com arranjo co-localizado.:

$$v_{\oplus} = \frac{a_{\oplus}}{a_p + {}_{\ominus}a_p} \quad (2.39)$$

$$v_{\ominus} = \frac{a_{\ominus}}{a_p + {}_{\oplus}a_p} \quad (2.40)$$

onde a_p equivale à Equação 2.17 e ${}_{\ominus}a_p$ e ${}_{\oplus}a_p$ equivalem à mesma Equação 2.17, mas obtidos quando os balanços são realizados dentro dos volumes de centro em \ominus e \oplus . Neste caso os coeficientes da interface são aproximados por:

$$\begin{aligned} a_{\oplus} = & \sum_P^3 \left(a_{\ominus} v_{\ominus} + a_{\oplus} v_{\oplus} \right) + \sum_{\ominus}^3 \left(a_{\ominus} v_{\ominus} + a_{\oplus} v_{\oplus} \right) + {}^{-P}S_P \mathbf{V}_P + {}^{-P}S_{\ominus} \mathbf{V}_{\ominus} \\ & + \frac{\rho_P \mathbf{V}_P}{\Delta t} + \frac{\rho_{\ominus} \mathbf{V}_{\ominus}}{\Delta t} - 2(P_{\ominus} - P_P) \mathbf{A}_{\oplus} \end{aligned} \quad (2.41)$$

$$\begin{aligned}
 a_{\oplus} = & \sum_P^3 \left(a_{\ominus} v_{\ominus} + a_{\ominus} v_{\ominus} \right) + \sum_{\ominus}^3 \left(a_{\ominus} v_{\ominus} + a_{\ominus} v_{\ominus} \right) + {}^{-P}S_P \nabla_P + {}^{-P}S_{\ominus} \nabla_{\ominus} \\
 & + \frac{\rho_P \nabla_P}{\Delta t} + \frac{\rho_{\ominus} \nabla_{\ominus}}{\Delta t} - 2 \left(P_P - P_{\ominus} \right) \mathbf{A}_{\oplus}
 \end{aligned}
 \tag{2.42}$$

onde ${}^{-P}S$ representa o termo fonte sem a variável de pressão que lhe foi extraída. Observa-se que os símbolos \ominus e $\overset{\leftarrow}{\ominus}$ abaixo dos somatórios representam neste caso que os balanços foram feitos nos volume adjacentes, e que portanto seus coeficientes a referem-se a estes balanços.

3. DESENVOLVIMENTO DAS ANÁLISES NUMÉRICAS

O software CFX foi inicialmente utilizado na versão 4.1, sendo em seguida substituído pela versão 4.2. Está dividido em três ambientes distintos: pré-processador, processador e pós-processador, com cada um desempenhando funções específicas. No pré-processador, representado pelo módulo *Meshbuild*, gera-se o arquivo com as informações geométricas da malha. Este arquivo é utilizado na sequência pelo ambiente do processador, representado pelo módulo *Solver*, onde também são definidos quais os modelos de interesse, a escolha dos algoritmos que irão compor os métodos numéricos, sendo que novos modelos e equações constitutivas podem ser introduzidas através de subrotinas em linguagem de programação Fortran. Também em conjunto com o ambiente do processador pode operar o módulo *Radiation*. Encerrado o processamento, quando o critério de convergência for satisfeito, os resultados são observados no ambiente do pós-processador composto pelo módulo *View* (Guia do Usuário do CFX, 1997).

3.1. EQUAÇÕES DE TRANSPORTE

Devido ao fenômeno da turbulência ser inerente aos processos abordados a seguir, a sua modelagem já será inserida nas equações de balanço como resultado da aplicação do método da decomposição de Reynolds e obtenção da média temporal pelo método *Reynolds averaging*, ou pelo método *Favre averaging* no caso do modelo de turbulência diferencial dos tensores de Reynolds. Aplicando-se as propriedades da média nas equações de balanço, num intervalo de tempo Δt suficientemente grande, tal que o valor médio da flutuação instantânea $\overline{\phi'}$ seja nulo, mas suficientemente pequeno para que as variações sejam captadas no transcorrer do tempo, resultam as equações básicas que descrevem o modelo, e que correspondem às equações da conservação de massa, momento e energia. Assim, a barra indicando a média ficará implícita para todas as variáveis primitivas:

3.1.1. Equação da Continuidade

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \bar{v}) = 0 \quad (3.1)$$

3.1.2. Equação da Quantidade de Movimento

$$\frac{\partial \rho \bar{v}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \bar{v} \bar{v}) = -\nabla P + \nabla \cdot (\nu - \rho \overline{v'v'}) + B \quad (3.2)$$

sendo:

$$\nu = \left(\xi - \frac{2}{3} \mu \right) \nabla \cdot \bar{v} \delta + \mu (\nabla \bar{v} + (\nabla \bar{v})^T) \quad (3.3)$$

3.1.3. Equação da Energia

$$\frac{\partial \rho H}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \bar{v} H + \rho \overline{v'h'}) - \frac{\lambda}{c_p} \nabla H = \frac{DP}{Dt} + \nabla \cdot \left(\mu (\nabla \bar{v} + (\nabla \bar{v})^T - \nabla \cdot \bar{v} \delta) \bar{v} \right) + Q \quad (3.4)$$

onde $\rho \overline{v'v'}$ é conhecido como tensor de Reynolds, \bar{v} é o vetor velocidade, μ é a viscosidade molecular, ρ é a massa específica, t é o tempo, P é a pressão, T é a temperatura, B é a força

de campo (gravitacional, rotacional, resistência porosa), H é a entalpia global, h é a entalpia estática, Q é a fonte de calor por reação, λ é a condutividade térmica, c é o calor específico, ξ é a viscosidade do *bulk*, δ é o tensor unitário e o superescrito T representa a transposta do tensor. O desenvolvimento detalhado da aplicação das médias temporais pode ser encontrado em Garde (1994).

3.1.3.1 Transferência de Calor por Radiação Térmica

A energia liberada pela queima do combustível transfere-se entre as paredes e o gás por radiação térmica, convecção e condução. Em temperaturas elevadas o fenômeno da radiação térmica é dominante, variando com a quarta potência da temperatura. Pela facilidade de cálculo, os gases e as superfícies normalmente são considerados cinzentos, ou seja, o coeficiente de absorção fica independente da frequência $\alpha(\gamma, T) \equiv \alpha(T)$ onde γ é o comprimento de onda.

O modelo da radiação necessita ser preparado, o que é feito a partir do mesmo arquivo geométrico desenvolvido pelo módulo *Meshbuild*. Neste, são definidas subdivisões em seções, as quais incorporam um conjunto de volumes de controle V_{ijk} pertencentes à malha. Este modelo radiativo é necessário para a simulação feita de forma conjunta entre os módulos *Solver* e *Radiation*, cujos processamentos realizam-se de forma alternada. As propriedades radiativas são consideradas constantes para cada uma destas seções.

Dentro do ambiente do processador, um número pré-definido de iterações é executado antes da chamada do módulo *Radiation*. As emissões radiativas do volume de controle V_{ijk} são obtidas por:

$$C_{ijk} = 4\sigma T_{ijk}^4 \eta_{ijk} V_{ijk} \quad (3.5)$$

onde η_{ijk} é o coeficiente de absorção/emissão e σ é a constante de Stefan-Boltzmann. Devido à simplicidade, os cálculos estão sendo realizados considerando-se gases cinzentos (sendo possível o modelamento de até 31 bandas espectrais dentro de um limite de 10^{-10} a 10^{10}).

Os cálculos de transferência radiativa de calor são processos computacionais dispendiosos, assim é conveniente o módulo *Radiation* seja acionado somente após um número adequado de iterações. As transferências radiativas foram calculadas pelo algoritmo *Discrete Transfer*. Os cálculos radiativos são efetuados pelo rastreamento dos fótons através das seções. A equação da transferência para um meio com absorção e dispersão é dada por

$$\frac{dI}{dl} = -(K_a + K_s) I + K_a I_B + \frac{K_s}{4\pi} \int_{4\pi} I_\Omega \Theta d\Omega \quad (3.6)$$

onde I é a intensidade da radiação emitida por unidade de área por unidade de tempo e por unidade de ângulo sólido na direção l , I_Ω corresponde à emissão proveniente da direção do ângulo sólido Ω , I_B representa a emissão espontânea de I na direção l , K_a é o coeficiente de absorção, K_s é o coeficiente de dispersão e Θ é a função de dispersão. O primeiro termo à direita da igualdade representa as perdas por absorção e dispersão. O termo $(K_a + K_s)$ é conhecido como coeficiente de extinção. O segundo termo representa os ganhos por emissão, e o terceiro representa os ganhos por dispersão proveniente da direção de Ω e que vai em direção de l . A solução deste balanço pode ser obtida pelo algoritmo *Discrete Transfer* ou *Monte Carlo*, obtendo-se os valores do aquecimento radiativo volumétrico (H_z) e do aquecimento radiativo da superfície (H_s) que devem ser adicionados ao balanço de energia.

Através das trocas radiativas totais:

$$C_z = 4\sigma\eta_z \sum_{ijk \in z} T_{ijk}^4 V_{ijk} \quad (3.7)$$

é calculada a temperatura da seção:

$$T_z = \left(\sum_{ijk \in z} \frac{T_{ijk}^4 V_{ijk}}{V_z} \right)^{1/4} \quad (3.8)$$

a qual é usada pelo módulo *Radiation* para calcular o aquecimento radiativo para cada seção (H_z). O *Solver* junta o aquecimento radiativo com o resfriamento para cada volume de controle:

$$H_{ijk}^{(n)} = u_r \left(a_z H_z - \frac{C_{ijk}}{V_{ijk}} \right) + (1 - u_r) H_{ijk}^{(n-1)}, \quad (3.9)$$

onde $a_z = V_z / \sum_{ijk \in z} V_{ijk}$, u_r é o fator de relaxação, que pode ser utilizado para uma melhor estabilidade numérica, e o subscrito n equivale à ordem de chamada do módulo *Radiation*.

3.1.3.1.1. Aquecimento e Resfriamento nas Paredes

Nas paredes configuram-se diversas possibilidades: quando os fluxos condutivo e convectivo predominam, o procedimento utilizado é idêntico àquele dos balanços nos volumes. Quando o fluxo radiativo é maior que o fluxo convectivo, o algoritmo torna-se instável. Neste caso o fluxo radiativo necessário para uma superfície s é calculado por

$$f_s = \frac{1}{A_s} \sum_{w \in s} f_w A_w, \quad (3.10)$$

onde A_s e A_w são as áreas, e f_w é o fluxo radiativo para a parede w calculado no *Solver*.

Obtém-se a temperatura da superfície s por

$$T_s = \left(\frac{1}{\sigma \epsilon_s} \left(A_s a_s H_s^{(n-1)} - A_s f_s^{(n)} \right) \right)^{1/4} \quad (3.11)$$

calculada com os valores anteriores de H_s , e transferida para o módulo *Radiation* que calculará o novo valor de H_s . Uma nova temperatura para s é então obtida

$$T_s^{(n)} = u_r \left(\frac{1}{\sigma \epsilon_s} \left(A_s a_s H_s^{(n)} - A_s f_s^{(n)} \right) \right)^{1/4} + (1 - u_r) T_s^{(n-1)}, \quad (3.12)$$

sendo que $H_s^{(0)} = 0$, $a_s = \sum_{w \in s} \frac{A_w}{A_s}$, u_r é o fator de relaxação, σ é a constante de Stefan, ϵ_s é a emissividade da superfície e H_s é o fluxo de aquecimento. Por outro lado, caso um valor constante de temperatura na parede tenha sido definido, esta temperatura é passada ao módulo *Radiation* que retorna com o fluxo de calor.

3.1.4. Modelos de Turbulência

Os tensores de Reynolds $\overline{\rho \mathbf{v} \mathbf{v}}$ precisam ser modelados de alguma maneira. Dois grandes grupos (hipótese da viscosidade turbulenta e o modelo dos tensores de Reynolds) podem ser utilizados (Garde, 1994; Lixing, 1993; Guia do Usuário do CFX, 1997).

3.1.4.1. Hipótese da Viscosidade Turbulenta

Os tensores de Reynolds são calculados por:

$$-\overline{\rho \bar{v}' \bar{v}'} = -\frac{2}{3} \rho k \delta - \frac{2}{3} \mu_T \nabla \cdot \bar{v} \delta + \mu_T (\nabla \bar{v} + (\nabla \bar{v})^T) \quad (3.13)$$

A equação do momento fica:

$$\frac{\partial \rho \bar{v}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \bar{v} \bar{v}) = -\nabla P + \nabla \cdot (\mu_{ef} (\nabla \bar{v} + (\nabla \bar{v})^T)) + B \quad (3.14)$$

sendo:

$$\mu_{ef} = \mu_T + \mu \quad (3.15)$$

onde k é a energia cinética turbulenta e os subscritos T e ef referem-se a turbulento e efetivo, respectivamente.

3.1.4.1.1. Modelo k - ϵ

A viscosidade turbulenta é calculada por:

$$\mu_T = C_{\mu} \rho \frac{k^2}{\epsilon} \quad (3.16)$$

Uma equação adicional para k e uma para ϵ devem ser resolvidas:

$$\frac{\partial \rho k}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \bar{v} k) - \nabla \cdot \left(\left(\mu + \frac{\mu_T}{\nu_k} \right) \nabla k \right) = \Pi + \Psi - \rho \varepsilon \quad (3.17)$$

$$\frac{\partial \rho \varepsilon}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \bar{v} \varepsilon) - \nabla \cdot \left(\left(\mu + \frac{\mu_T}{\nu_\varepsilon} \right) \nabla \varepsilon \right) = \frac{\varepsilon}{k} (C_{1k\varepsilon} \Pi - C_{2k\varepsilon} \rho \varepsilon) \quad (3.18)$$

3.1.4.1.2. Modelo RNG k-ε

Neste, a viscosidade turbulenta é calculada da mesma forma que no modelo anterior (Yakhot & Orszag, 1986; Guia do Usuário do CFX, 1997):

$$\mu_T = C_\mu \rho \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (3.19)$$

sendo as variáveis k e ε obtidas pelas equações:

$$\frac{\partial \rho k}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \bar{v} k) - \nabla \cdot \left(\left(\mu + \frac{\mu_T}{\nu_{kRNG}} \right) \nabla k \right) = \Pi + \Psi - \rho \varepsilon \quad (3.20)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho \varepsilon}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \bar{v} \varepsilon) - \nabla \cdot \left(\left(\mu + \frac{\mu_T}{\nu_{\varepsilon RNG}} \right) \nabla \varepsilon \right) = \\ (C_{1RNG} - C_\eta) \frac{\varepsilon}{k} (\Pi + C_{3RNG} \max(\Psi, 0)) - C_{2RNG} \rho \frac{\varepsilon^2}{k} \end{aligned} \quad (3.21)$$

sendo:

$$C_\eta = \frac{\eta \left(I - \frac{\eta}{\eta_0} \right)}{I + \beta_{RNG} \eta^3} \quad (3.22)$$

$$\eta = \left(\frac{\Pi_s}{\mu_T} \right)^{0.5} \frac{k}{\varepsilon} \quad (3.23)$$

$$\Pi = \Pi_s - \frac{2}{3} \nabla \cdot \bar{v} (\mu_{ef} \nabla \cdot \bar{v} + \rho k) \quad (3.24)$$

$$\Pi_s = \mu_{ef} \nabla \bar{v} \cdot (\nabla \bar{v} + (\nabla \bar{v})^T) \quad (3.25)$$

$$\Psi = \frac{\mu_{ef}}{\nu_T} \beta \bar{g} \cdot \nabla T \quad (3.26)$$

onde ε é a taxa de dissipação de k , ν é o número equivalente de Prandtl, β é o coeficiente de expansão volumétrica, C_μ , $C_{1k\varepsilon}$, $C_{2k\varepsilon}$, $C_{3k\varepsilon}$, C_{1RNG} , C_{2RNG} , C_{3RNG} , ν_k , ν_ε , ν_{kRNG} , $\nu_{\varepsilon RNG}$, β_{RNG} e η_0 são constantes dos modelos. O modelo *RNG* k - ε é uma variação do modelo k - ε para número de Reynolds elevado e escoamento em vórtice.

3.1.4.1.3. Hipótese da Difusividade Turbulenta

De forma análoga à hipótese da viscosidade turbulenta, têm-se a hipótese da difusividade turbulenta:

$$-\rho \overline{v' \phi'} = \Gamma_T \nabla \phi \quad (3.27)$$

A equação da energia fica:

$$\frac{\partial \rho H}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \bar{v} H - \Gamma_{ef} \nabla H) = \frac{DP}{Dt} + \nabla \cdot \left(\mu \left(\nabla \bar{v} + (\nabla \bar{v})^T - \nabla \cdot \bar{v} \delta \right) \bar{v} \right) + Q \quad (3.28)$$

onde:

$$\Gamma_{ef} = \Gamma + \Gamma_T = \frac{\lambda}{c_p} + \frac{\mu_T}{\nu_H} \quad (3.29)$$

$$H = h(T, P) + \frac{1}{2} \bar{v}^2 + k \quad (3.30)$$

$$k = \frac{1}{2} \overline{v'^2} \quad (3.31)$$

$$Q = - \sum_j^{n1} R_j \Delta H_j \quad (3.32)$$

$$\Delta H_j(T) = \sum_i^{n2} n_{ij} H_{fi}(T) \quad (3.33)$$

onde, para vazões fracamente compressíveis e incompressíveis, a contribuição da energia cinética sobre a entalpia global H é desprezível em relação ao termo de energia interna h .

3.1.4.1.4. Funções de Parede

Devido à velocidade nula na parede, estabelece-se uma região de gradientes elevados próximo à superfície, sendo que em sua adjacência existe uma camada laminar onde os modelos de turbulência deixam de ser válidos. A tentativa de se modelar esta camada exigiria um refinamento inviável da malha. Uma condição artificial conhecida como função de parede é então aplicada nesta região. Neste caso, de acordo com o princípio da lei de parede, nesta região assume-se que a tensão de cisalhamento seja constante, e a velocidade apresenta um perfil logarítmico. O vetor velocidade na adjacência da parede pode ser dividido em um componente normal:

$$\bar{v}_{normal} = (\bar{v} \cdot \bar{n}) \bar{n} \quad (3.34)$$

e um componente paralelo:

$$\bar{v}_{paralela} = \bar{v} - (\bar{v} \cdot \bar{n}) \bar{n} \quad (3.35)$$

Considerando-se que o componente normal seja nulo, que a parede possivelmente mova-se na direção normal a \bar{n} com velocidade \bar{v}_{parede} , e que a velocidade paralela seja uma função linear do tensor de cisalhamento:

$$\bar{v}_{paralela} \equiv \bar{v}_{parede} - \frac{\tau}{T_M} \quad (3.36)$$

onde para $y^+ \leq y_0^+$, T_M é função linear de y :

$$T_M = \frac{\mu}{y} \quad (3.37)$$

e para $y^+ \geq y_0^+$, T_M é função logarítmica de y :

$$T_M = \frac{\sqrt{\rho|\tau|} \kappa}{\ln \left(E \frac{\sqrt{\rho|\tau|} y}{\mu} \right)} \quad (3.38)$$

sendo

$$y^+ = \frac{\sqrt{|\tau| \rho} y}{\mu} \quad (3.39)$$

$$|\tau| = C_\mu^{1/2} \rho k \quad (3.40)$$

onde τ é o tensor de cisalhamento, κ é a constante de von Karman, E é o parâmetro de rugosidade determinado empiricamente, y_0^+ e C_μ são constantes associadas com o modelo de turbulência, k é a energia cinética de turbulência e y é a distância da parede. A equação de k é resolvida para os volumes de controle em contato com a parede, obtendo-se a seguir $|\tau|$ e os componentes de velocidade.

3.1.4.2. Modelo dos Tensores de Reynolds na Forma Diferencial

Neste modelo a hipótese da viscosidade turbulenta não é utilizada e equações individuais para cada componente do tensor de Reynolds são resolvidas. O método *Reynolds averaging* é utilizado no caso incompressível e o método *Favre averaging* no caso compressível. As equações do momento, resultantes da hipótese da viscosidade turbulenta e do modelo dos tensores de Reynolds, diferem ligeiramente entre si, onde neste último não existe o termo de contribuição da turbulência (Guia do Usuário do CFX, 1997).

$$\frac{\partial \rho \overline{\vec{v}'\vec{v}'}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \overline{\vec{v}'\vec{v}'\vec{v}'}) - \nabla \cdot \left(\rho \frac{C_s}{v_{DS}} \frac{k}{\varepsilon} \overline{\vec{v}'\vec{v}'} (\nabla \overline{\vec{v}'\vec{v}'})^T \right) = \Pi_1 + \Psi_1 + \Phi_1 - \frac{2}{3} \rho \varepsilon \delta \quad (3.41)$$

$$\Pi_1 = -\rho \left(\overline{\vec{v}'\vec{v}'} (\nabla \vec{v})^T + (\nabla \vec{v}) \overline{\vec{v}'\vec{v}'} \right) - \rho \omega \overline{\vec{v}'\vec{v}'} \quad (3.42)$$

$$\Phi_1 = -\rho C_{1s} \frac{\varepsilon}{k} \left(\overline{\vec{v}'\vec{v}'} - \frac{2}{3} k \delta \right) - C_{2s} \left(\Pi_1 - \frac{2}{3} \Pi_2 \delta \right) - C_{3s} \left(\Psi_1 - \frac{2}{3} \Psi_2 \delta \right) \quad (3.43)$$

$$\Pi_2 = \frac{1}{2} tr(\Pi_1) = -\rho \overline{\vec{v}'\vec{v}'} \cdot \nabla \vec{v} \quad (3.44)$$

$$\Psi_2 = \frac{1}{2} tr(\Psi_1) = \begin{cases} -\rho \beta \vec{g} \cdot \overline{\vec{v}'h'} + \rho \alpha \vec{g} \cdot \overline{\vec{v}'s} & \text{para fluido incompressível} \\ -a_h \rho \overline{\vec{v}'h'} \cdot \nabla P - a_s \rho \overline{\vec{v}'s} \nabla P & \text{para fluido compressível} \end{cases} \quad (3.45)$$

$$k = \frac{1}{2} \overline{\vec{v}'^2} \quad (3.46)$$

para uma vazão incompressível:

$$\Psi_1 = -\rho\beta\left(\bar{g}\bar{v}h + (\bar{g}\bar{v}h)^T\right) - \rho\alpha\left(\bar{g}\bar{v}s + (\bar{g}\bar{v}h)^T\right) \quad (3.47)$$

e para uma vazão compressível:

$$\frac{I}{\rho} = a_h H_s + a_s S + b \quad (3.48)$$

$$\Psi_1 = -a_h\left(\rho\bar{v}'h'(\nabla P)^T + \rho\bar{v}h^T\nabla P\right) - a_s\left(\rho\bar{v}'s(\nabla P)^T + \rho\bar{v}s^T\nabla P\right) \quad (3.49)$$

onde C_s , C_{1s} , C_{2s} e C_{3s} são constantes do modelo.

A equação de transporte para ε deve ser resolvida novamente:

$$\frac{\partial \rho \varepsilon}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \bar{v} \varepsilon) - \nabla \cdot \left(\rho \frac{C_s}{v_\varepsilon} \frac{k}{\varepsilon} \bar{v}' \bar{v}' \nabla \varepsilon \right) = C_1 \frac{\varepsilon}{\kappa} (p + C_3 \max(\Psi_2, 0)) - C_2 \rho \frac{\varepsilon^2}{k} \quad (3.50)$$

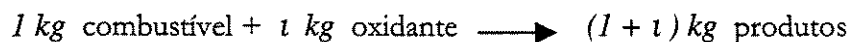
3.1.5. Modelos de Combustão

O fenômeno da combustão caracteriza-se pela velocidade de reação extremamente elevada. Esta propriedade inviabiliza o emprego da equação cinética da reação, mas por outro lado possibilita a simplificação dos modelos assumindo-se que as reações sejam instantâneas, ou seja, governadas apenas pela taxa de mistura entre os reagentes. Pressupõe-se que o combustível e o oxidante não possam coexistir num mesmo ponto. O combustível e o oxidante quando presentes simultaneamente sofrem uma reação instantânea, combinando-se em proporções estequiométricas, e formando os produtos. Assim, o reagente que estiver em

excesso estequiométrico permanecerá misturado aos produtos. Os dois modelos de combustão utilizados para comparação estão apresentados a seguir.

3.1.5.1. Modelo de Combustão Mixed-is-Burnt

Se considerarmos uma reação de passo único com somente dois reagentes, o combustível e o oxidante na relação estequiométrica, representada por (Guia do Usuário do CFX, 1997; Lixing,1993):



onde i é a massa de oxidante reagida. Definindo-se χ para uma mistura não necessariamente na relação estequiométrica como:

$$\chi = \varphi_c - \frac{\varphi_o}{i} \quad (3.51)$$

onde φ é a fração mássica e os subscritos C , O e P referem-se ao combustível, ao oxidante e ao produto da reação respectivamente. Os dois extremos que podem ocorrer para χ são quando existe apenas a presença de combustível:

$$\chi = 1 = \chi_c \quad (3.52)$$

ou apenas a presença de oxidante:

$$\chi = -\frac{1}{i} = \chi_o \quad (3.53)$$

A fração de mistura é definida como:

$$f = \frac{\chi - \chi_o}{\chi_c - \chi_o} \quad (3.54)$$

Desta forma f é usada para descrever a relação mássica entre os dois reagentes (conforme a Tabela 3.1):

Tabela 3.1: Composição em função da fração de mistura.

f	Composição
1	100% combustível
$1/(1+i)$	Relação estequiométrica (f_E)
0	100% oxidante

O f média-temporal é obtido por uma equação de transporte conservativa:

$$\frac{\partial \rho \bar{f}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \bar{v} \bar{f}) - \nabla \cdot \left(\left(\frac{\mu_T}{v_T} + \frac{\mu}{v_L} \right) \nabla \bar{f} \right) = 0 \quad (3.55)$$

e as frações mássicas são obtidas em função de $p_{(f)}$:

$$\bar{\varphi}_C = \int_0^1 \max \left[\frac{f - f_E}{1 - f_E}, 0 \right] p_{(f)} df \quad (3.56)$$

$$\bar{\varphi}_O = \int_0^1 \max \left[1 - \frac{f}{f_E}, 0 \right] p_{(f)} df \quad (3.57)$$

$$\bar{\varphi}_P = 1 - \bar{\varphi}_C - \bar{\varphi}_O \quad (3.58)$$

$$\bar{f}_+ = \bar{f} + \alpha \quad \bar{f}_- = \bar{f} - \alpha \quad (3.59)$$

onde $p_{(f)}$ é a função densidade de probabilidade. No caso desta função probabilidade ser a duplo delta ou a beta, a equação de transporte para a variância da fração de mistura (ϑ) é resolvida:

$$\frac{\partial \rho \vartheta}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \bar{v} \vartheta) - \nabla \cdot \left(\left(\frac{\mu_T}{\nu_T} + \frac{\mu}{\nu_L} \right) \nabla \vartheta \right) = C_{\vartheta 1} \mu_T (\nabla \bar{f})^2 - C_{\vartheta 2} \rho \frac{\varepsilon}{k} \vartheta \quad (3.60)$$

onde $C_{\vartheta 1}$ e $C_{\vartheta 2}$ são constantes do modelo.

3.1.5.1.1. Modelo PDF para Reação Rápida Simplificada

Assume que o combustível e o oxidante não podem coexistir instantaneamente no mesmo local, mas seu valor médio pode coexistir no mesmo local numa região finita de reação (Guia do Usuário do CFX, 1997; Lixing, 1993). Assim a probabilidade de uma variável ϕ pertencer a uma região é igual à integral de PDF naquela região (Pope, 1985). As funções densidade de probabilidade utilizadas pelo CFX estão representadas na Tabela 3.2.

Tabela 3.2: Função densidade de probabilidade.

Modelo	$P_{(f)}$
Delta único	$P_{(f)} = \Delta(f - \bar{f})$
Duplo delta	$P_{(f)} = A \Delta(f - (\bar{f} + \alpha)) + B \Delta(f - (\bar{f} - \alpha))$
Beta	$P_{(f)} = C f^{(a-1)} (1-f)^{(b-1)}$

Sendo que A, B, α, a e b são obtidos em função de \bar{f} e ϑ .

3.1.5.2. Modelo de Combustão Eddy Break-up

Resolve equações explícitas para $\bar{\Phi}_C$ instantâneo:

$$\frac{\partial \rho \bar{\Phi}_C}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \bar{v} \bar{\Phi}_C) - \nabla \cdot \left(\left(\frac{\mu_T}{\nu_T} + \frac{\mu}{\nu_L} \right) \nabla \bar{\Phi}_C \right) = -\rho \frac{\varepsilon}{k} C_R C_A M_{\text{lim}} \quad (3.61)$$

$$C_R = \begin{cases} 23,6 \left(\frac{\mu \varepsilon}{\rho k^2} \right)^{1/4} & \text{modelo de mistura viscosa} \\ 4,0 & \text{modelo de mistura colisional} \end{cases} \quad (3.62)$$

$$C_A = \begin{cases} 1,0 & \text{taxa infinita} \\ 1,0 \quad D \geq D_{ie} & \text{taxa finita} \\ 0,0 \quad D < D_{ie} & \text{taxa finita} \end{cases} \quad (3.63)$$

$$M_{\text{lim}} = \begin{cases} \min \left(\bar{\Phi}_C, \frac{\bar{\Phi}_O}{i} \right) & \text{sem termo produto} \\ \min \left(\bar{\Phi}_C, \frac{\bar{\Phi}_O}{i}, B \frac{\bar{\Phi}_P}{(1+i)} \right) & \text{com termo produto} \end{cases} \quad (3.64)$$

$$D \equiv \frac{t_e}{t_{CH}}, \quad t_e \equiv \frac{k}{\varepsilon} \quad \text{e} \quad t_{CH} = K_{CH} e^{T_{at}/T} (\rho \bar{\varphi}_c)^a (\rho \bar{\varphi}_o)^b \quad (3.65)$$

$$\bar{\varphi}_o = 1 - \bar{\varphi}_c - \frac{\bar{f} - \bar{\varphi}_c}{f_E} \quad \text{e} \quad \bar{\varphi}_p = 1 - \bar{\varphi}_c - \bar{\varphi}_o \quad (3.66)$$

onde D é o número de Damköhler, D_{ie} é o valor de D para a ignição e extinção (igual a 10^{-3}), B é a constante da taxa de mistura dos produtos (igual a $1,0$), t_{CH} é o tempo de indução química, K_{CH} é a constante da taxa e T_{at} é a temperatura de ativação.

3.1.5.2.1. Modelo de Fuligem de Magnussen

Constitui uma extensão do modelo *Eddy Break-up*. A presença de fuligem pode representar um aumento considerável na transferência de calor radiativo. A taxa de formação dos núcleos ativos é dado por:

$$\frac{\partial \rho \zeta}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \bar{v} \zeta) - \nabla \cdot \left(\left(\frac{\mu_T}{v_T} + \frac{\mu}{v_L} \right) \nabla \zeta \right) = \zeta_o + (f - g) \zeta - g_o \zeta N \quad (3.67)$$

$$\frac{\partial \rho N}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \bar{v} N) - \nabla \cdot \left(\left(\frac{\mu_T}{v_T} + \frac{\mu}{v_L} \right) \nabla N \right) = (a - bN) \zeta \quad (3.68)$$

$$\zeta_o = C \varphi_{carb} C_{cb} e^{\frac{E}{RT}} \quad (3.69)$$

onde ζ é a concentração dos núcleos ativos (mol/kg), N é a concentração das partículas de fuligem (kg/kg), ζ_0 é a taxa de formação espontânea dos núcleos, Φ_{carb} é a fração mássica de carbono no combustível e C_{cb} é a concentração média do combustível. a (10^5) e b ($8 \cdot 10^{-14}$) são constantes do modelo. $(f - g)(10^2)$, g_0 (10^{-15}), C ($13,5 \cdot 10^{36}$) e $\frac{E}{R}$ ($9 \cdot 10^4$) são constantes para o caso de chamas de acetileno (usadas com sucesso também para outros combustíveis). O valor de C corresponde a uma partícula de fuligem de diâmetro de $178,5 \cdot 10^{-10}$ m.

3.2. PRÉ-PROCESSAMENTO

Diversos modos para a construção de figuras em geral podem ser escolhidos dentro do módulo *Meshbuild* segundo metodologias particulares. Contudo, um bloco é a unidade básica de construção, sendo que os tamanhos, formatos e quantidade das células são definidos posteriormente, através da subdivisão de suas arestas e geração da malha. Cada bloco constitui um espaço hexaédrico formado por um conjunto de células inter-conectadas e orientadas por um sistema de coordenadas comum. Esta orientação em comum é utilizada internamente para a numeração e controle das células.

Dentro do módulo *Meshbuild* pode-se visualizar a distribuição espacial dos objetos. Após a distribuição inicial dos pontos no espaço, os demais objetos: retas, curvas, faces, blocos e grupos - podem ser elaborados por procedimentos característicos a cada um. Estes são numerados sequencialmente e também nomeados. Denomina-se grupo a um conjunto de objetos selecionados. Os grupos podem ser movidos, copiados, deformados, rotacionados, projetados e também sofrer extrusão. Assim, um bloco pode ser construído através da seleção sequencial dos oito pontos que irão compor os seus vértices, ou automaticamente através da extrusão dos objetos de uma face numa determinada direção. Uma particularidade da primeira opção é que, quando uma linha curva for traçada entre os dois pontos que irão compor o vértice de um bloco, esta linha automaticamente servirá de guia para a formação desta aresta.

Tanto uma célula quanto um bloco pode compor um espaço hexaédrico irregular, fato que pode ser aproveitado para uma reprodução mais aproximada de objetos irregulares. Cada célula ou volume de controle compondo um espaço hexaédrico constitui uma unidade básica para efeito de cálculo. Entretanto, em muitos casos ocorrem deformações excessivas das células, o que torna desaconselhável a representação através de um único bloco. Nestes casos existe a opção de uma outra técnica denominada de multi-blocos. Esta consiste na interconexão entre dois blocos através de uma de suas faces. Desta forma, um bloco pode ser conectado com até outros seis blocos, o que permite uma grande variedade de construções e, utilizando células mais regulares e de melhores características de ortogonalidade. Normalmente os blocos são conectados uns aos outros de maneira que, todas as áreas das células de interface em um dos blocos tenham as mesmas áreas correspondentes nas células do bloco adjacente. Somente no caso de interfaces deslizantes, uma área de interface de uma célula em um dos blocos pode

conectar-se a frações de duas ou mais áreas das células do bloco adjacente. Contudo este procedimento não é recomendado devido aos erros de aproximação gerados.

Quando a face de um bloco não é utilizada na conexão a um outro bloco, e nenhuma condição de contorno se explicita para ela, é então automaticamente definida como parede. Na interface entre dois blocos existe a continuidade de todos os fluxos. Entretanto uma condição de paredes bilaterais (*thin surface*) pode ser definida para as faces onde o fluxo de massa e momento não ocorra, como foi o caso da parede do duto interno do maçarico. Nos modelos bidimensionais os planos de periodicidade, para representação da continuidade dos fluxos na direção angular, são inseridos através do arquivo de comando.

Convém fazer uma distinção entre conexão lógica e conexão física entre os objetos. Ressalta-se que a conexão física entre os mesmos não implica necessariamente em sua conexão lógica e que, para efeito de cálculo, necessita-se que o façam dos dois modos. Existem casos em que a conexão lógica é feita automaticamente, como o que ocorre quando dois pontos são selecionados na formação de um vértice comum a duas faces. De forma semelhante, na extrusão de uma face pertencente a um outro bloco, o novo bloco ficará automaticamente conectado de modo lógico. Entretanto, o mesmo não ocorre quando um novo é construído a partir dos pontos dos vértices de um outro bloco.

3.2.1. Elaboração das Figuras Geométricas

O forno em estudo é composto de um maçarico e uma câmara de combustão de formatos cilíndricos. Este modelo geométrico fundamentou-se no projeto desenvolvido na dissertação de mestrado (Fudihara, 1995), contudo, diferindo no comprimento da câmara, desta vez com 4,0 m ao invés de 12,0 m como no trabalho anterior. Uma das extremidades da câmara é fechada por uma parede circular de 2,5 m de diâmetro. O maçarico é conectado no centro desta parede. Na extremidade oposta, a câmara é parcialmente fechada por uma parede anular, por onde os gases da combustão saem por uma abertura de 2,0 m de diâmetro (Figura 3.1). O maçarico é formado por dois dutos concêntricos de 0,25 m e 0,1 m de diâmetro, com comprimento de 0,7 m.

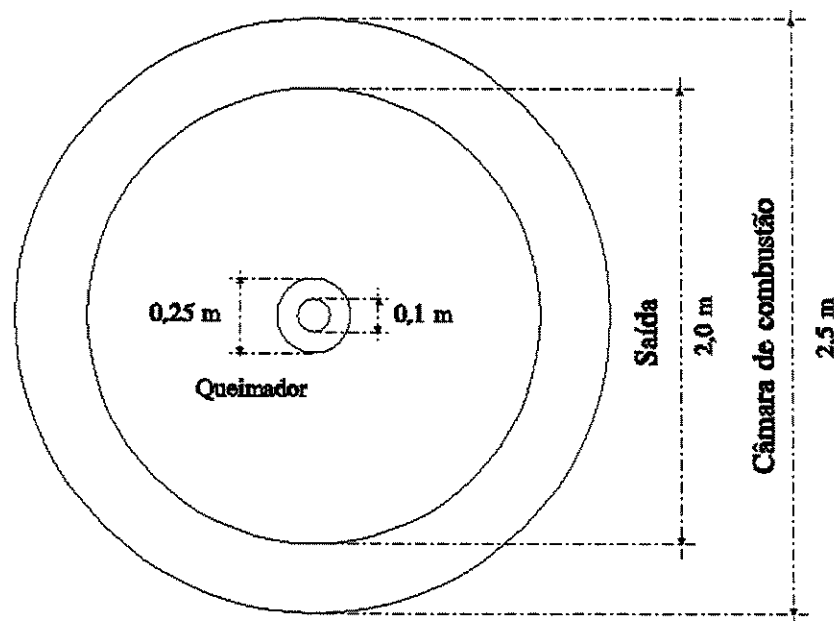


Figura 3.1: Dimensões do Forno.

3.2.1.1. Esquema Tridimensional do Forno

A técnica mais utilizada para a construção dos blocos, devido à sua grande versatilidade e simplicidade, foi o da extrusão das faces associada à técnica dos multi-blocos. Portanto, a distribuição dos pontos principais fez-se num único plano com coordenada $z=0$. Para isso foi escolhida a seção transversal da câmara onde se encontra a junção com o maçarico. Uma visualização de todos os pontos necessários foi feita preliminarmente, para que todas as faces já ficassem conectadas entre si de forma lógica, reduzindo bastante os esforços. A partir da construção das faces nesta seção, foram formadas por extrusão a câmara do forno com 4 m de comprimento e, no sentido oposto, o maçarico com 0,7 m de comprimento. O maçarico em estudo é formado por dois dutos concêntricos e os blocos cujas faces fossem compor estas superfícies cilíndricas deveriam estar previstos. Uma vez que todas as faces produzidas apresentavam vértices comuns, resultou que os blocos construídos a partir delas já estariam conectados de forma lógica. A disposição inicial de todas as faces dos blocos pode ser observada na Figura 3.2. Também de início objetivou-se um arranjo que garantisse células com melhores características de ortogonalidade. Quatro pequenos blocos centrais foram dispostos no centro do duto interno.

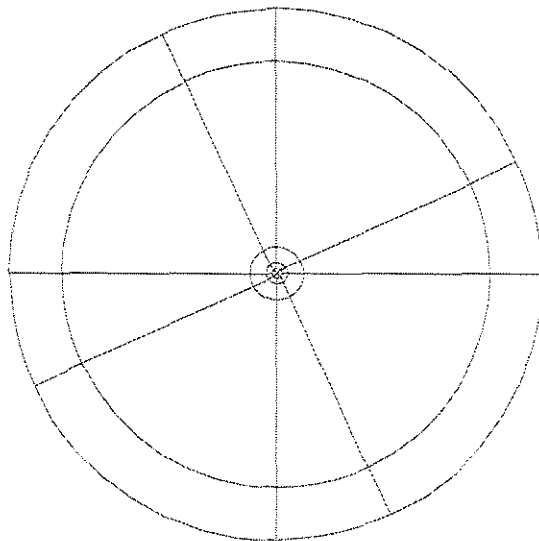


Figura 3.2: Blocos de construção da câmara.

Após a elaboração da câmara de combustão e do maçarico, procedeu-se à inserção das quatro entradas tangenciais para o ar de combustão sobre o duto externo do maçarico. Estas seriam responsáveis pela formação do escoamento giratório. A técnica da projeção, onde a face de um bloco é inserida em um grupo e projetada sobre uma superfície preexistente, ficou inviabilizada pois um gradeamento mínimo, que se executa automaticamente, impôs um refinamento excessivo da malha. Portanto optou-se pela construção destes quatro blocos diretamente dos pontos de seus vértices. Entretanto, dos oito vértices de cada bloco, metade já deveriam pertencer aos blocos formadores do maçarico. Este fato exigiu que, no planejamento antecipado das faces antes da extrusão inicial, ficasse prevista a formação desses blocos cujas faces satisfizessem as dimensões requeridas pelos condutos. Os quatro condutos de entrada de ar foram dispostos alternadamente, com cada um ocupando um dos quadrantes do duto, de maneira que o ar entrasse tangencialmente (Figura 3.3 e Tabela 3.3). Cada um destes foi formado por um bloco. Como já descrito, neste caso a junção inicial seria apenas física e cada um dos blocos foi posteriormente conectado de forma lógica.

A subdivisão do maçarico em dois dutos, anular e concêntrico, foi feita através da seleção das interfaces e aplicação da condição de paredes bilaterais (*thin surface*), isolando os percursos entre os mesmos. Restaria por fim selecionar e nomear os caminhos de entrada e saída para utilização no arquivo de comando.

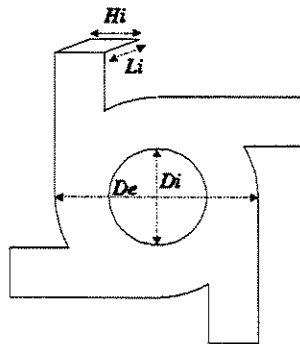


Figura 3.3: Representação esquemática da entrada do queimador.

Tabela 3.3: Dimensões da entrada do queimador.

Queimador	De	0,25 m
	Di	0,10 m
	Hi	0,065 m
	Li	0,10 m

3.2.1.1.1. Gradeamento dos Blocos

O passo subsequente no desenvolvimento do arquivo geométrico constitui-se no gradeamento dos blocos, quando as características das células são definidas. A Figura 3.4 mostra um corte da grade da câmara em $z=0$ e a Figura 3.5 um corte longitudinal passando pelo eixo central. A Figura 3.6 mostra um corte frontal da grade do maçarico próximo à entrada, passando pelas quatro entradas tangenciais. Nas Figura 3.7 e Figura 3.8 têm-se uma visão tridimensional da malha. O gradeamento resultou em 59.008 células.

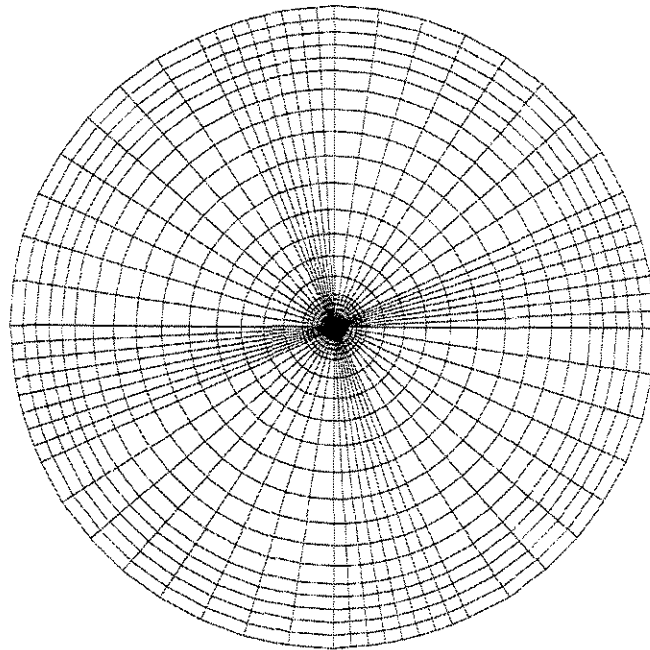


Figura 3.4: Malha tridimensional da câmara.

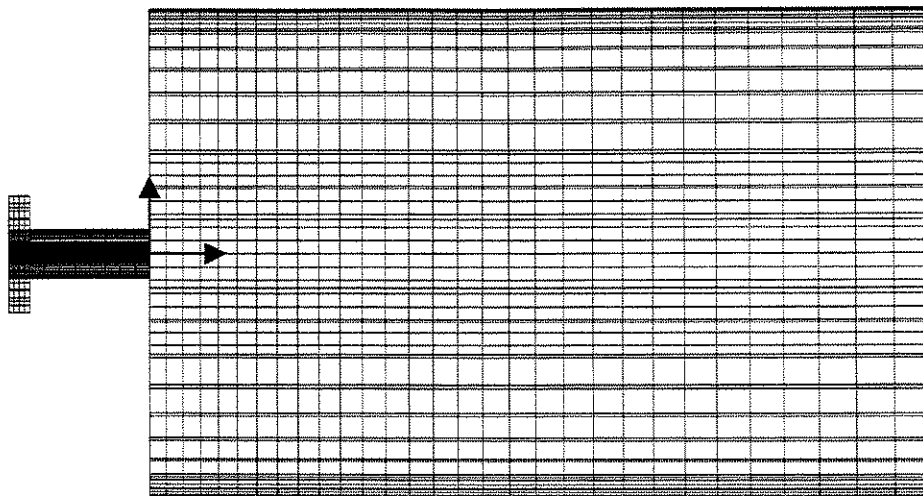


Figura 3.5: Malha tridimensional do forno.

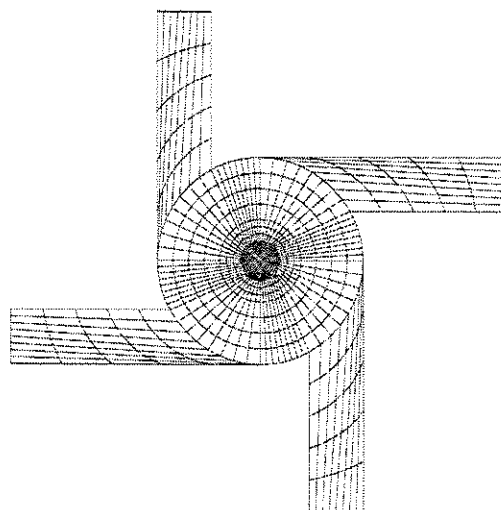


Figura 3.6: Malha tridimensional do queimador.

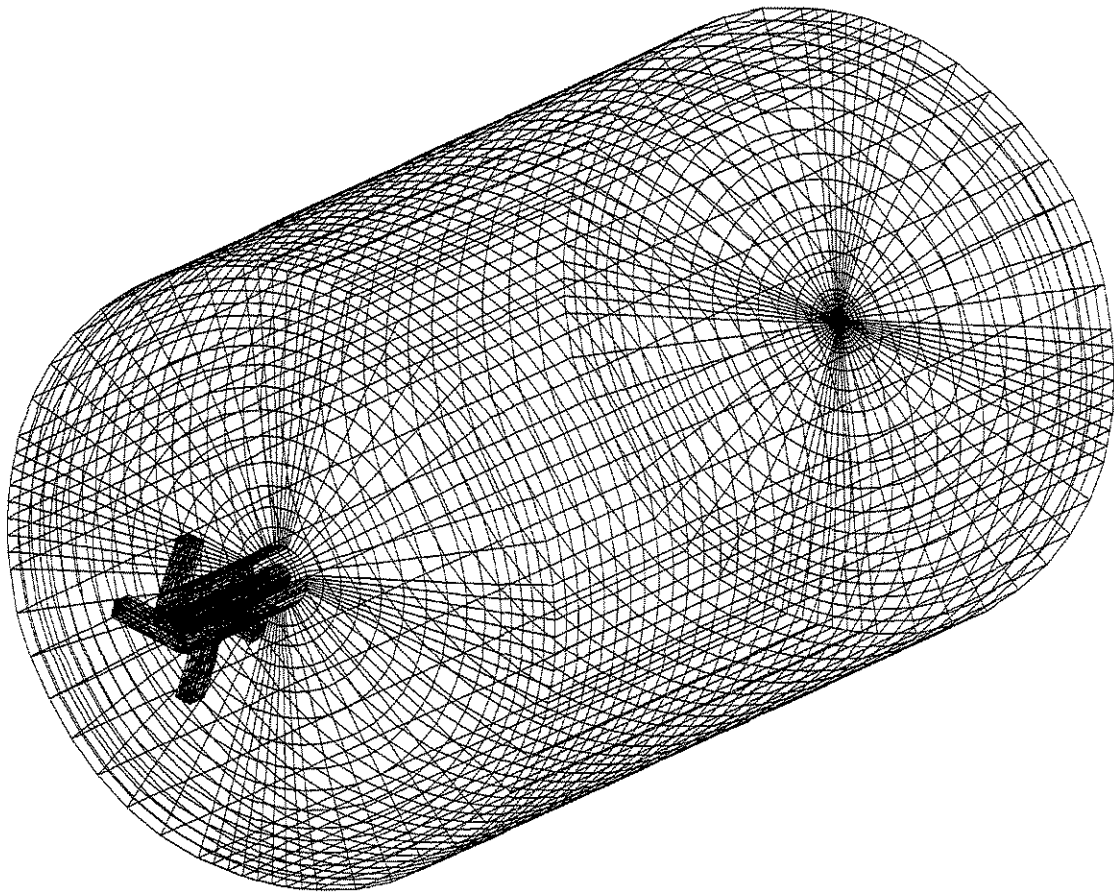


Figura 3.7: Desenho tridimensional do forno.

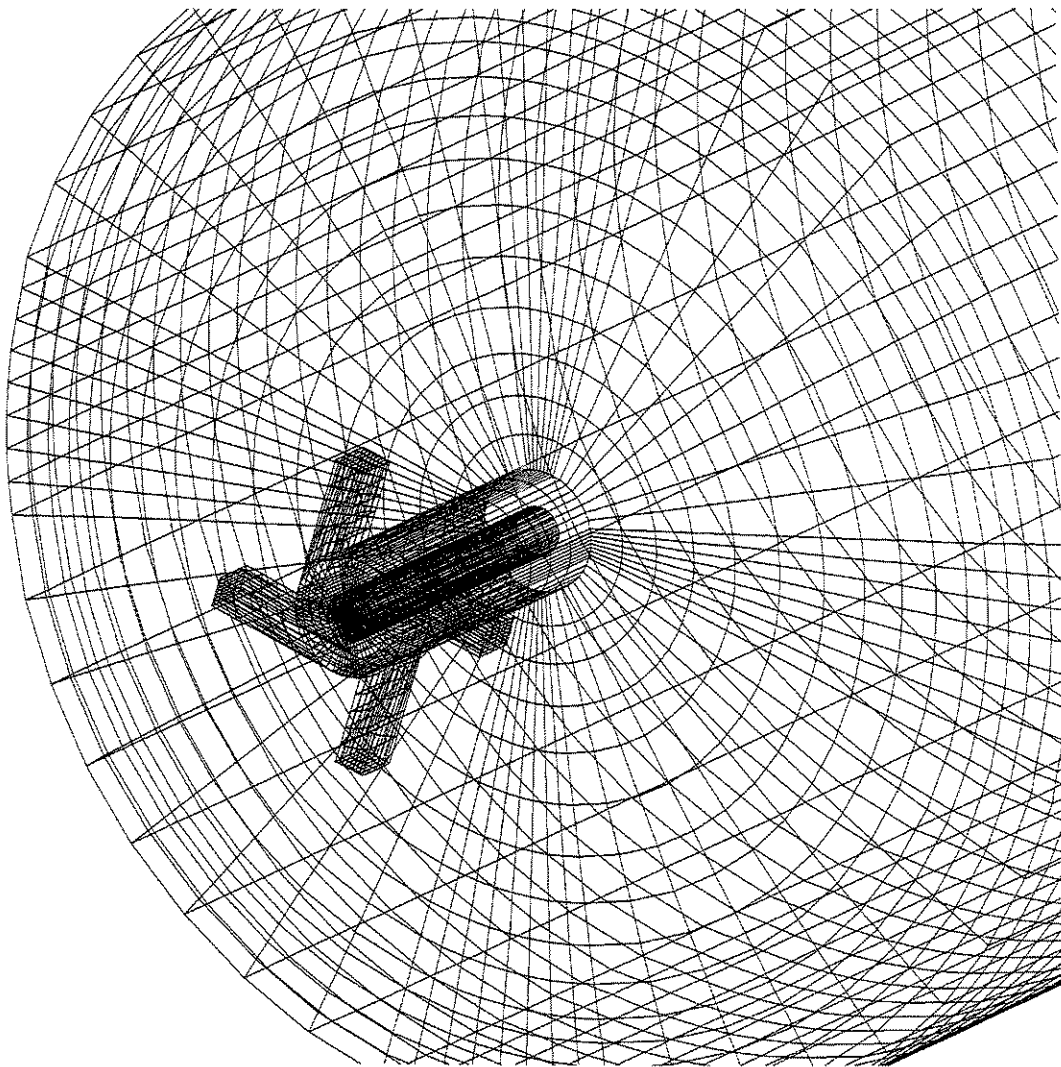


Figura 3.8: Desenho do queimador com as quatro entradas tangenciais.

3.2.1.2. Esquema Bidimensional do Forno

O procedimento para a construção do modelo geométrico bidimensional através do módulo *Meshbuild* também utiliza a técnica dos multi-blocos. Contudo os blocos são dispostos apenas no plano xy , ou xr considerando o sistema de coordenadas cilíndricas. O eixo de simetria deve passar necessariamente por $y=0$ e não se faz nenhum gradeamento na direção z . Planos de periodicidade devem ser definidos para todas as faces xy , sendo duas por bloco (comandos *low k* e *high k*). Neste caso, apesar de não existirem gradientes de velocidade angular na direção θ , este componente de velocidade continua sendo calculado, apresentando gradientes nas direções radial e axial. Por isto, este modelo é tratado como tridimensional dentro do arquivo de comando do CFX.

Nos casos bidimensionais fica obrigatoriamente subentendido que toda a área da circunferência (área hachurada na Figura 3.9) seja considerada como entrada, onde lhe são prescritos os componentes tangencial e radial de velocidade. A radial está associada com a vazão de entrada e a tangencial com a intensidade do giro.

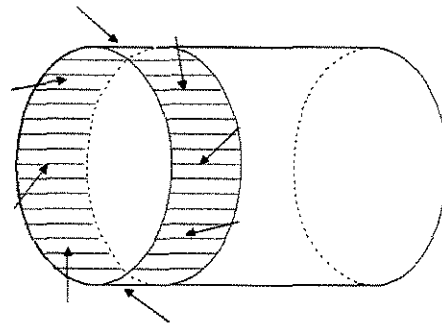


Figura 3.9: Região de entrada bidimensional.

3.2.1.2.1. Sem Refratário e quatro metros de Comprimento

Este esquema geométrico foi construído em correspondência com as dimensões do modelo tridimensional. O raio e o comprimento da câmara são de 1,25 e 4 m respectivamente. A entrada de ar do maçarico (conforme a Figura 3.9) equivale a um anel de 0,25 m de raio e 0,05 m de largura. Um outro duto, de 0,05 m de raio, foi construído para a entrada do combustível. A disposição dos blocos pode ser observada na Figura 3.10. A Figura 3.11 representa um gradeamento com 3.055 células.

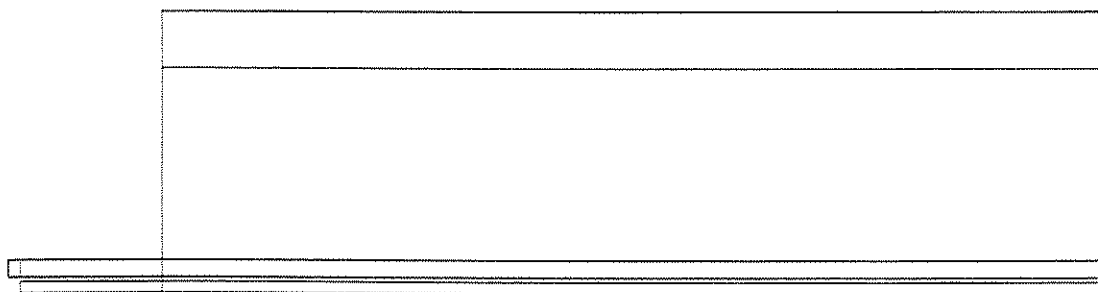


Figura 3.10: Blocos de construção da malha bidimensional.

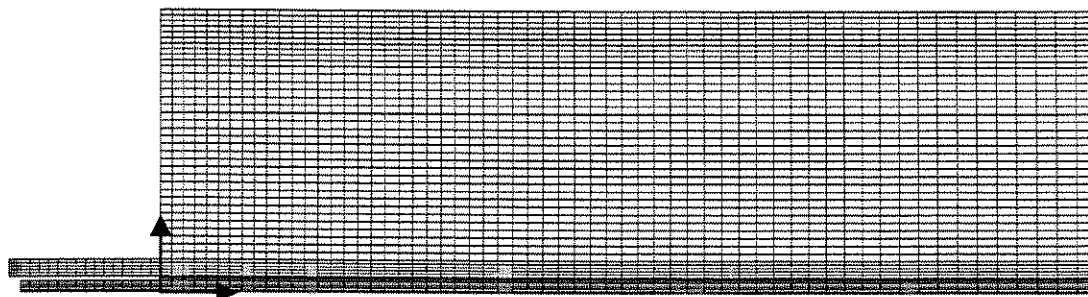


Figura 3.11: Malha bidimensional do forno.

3.2.1.2.2. Com Refratário e seis metros de Comprimento

Este projeto geométrico é uma complemento do anterior e, devido à maior simplicidade da malha bidimensional, um refratário de 0,25 m de espessura pôde ser introduzido para uma representação mais consistente da perda de calor para o ambiente externo. Isto foi feito por meio de blocos especialmente inseridos para esta finalidade e definidos como sólidos condutores, circundando a superfície externa da câmara. Além disso o comprimento foi estendido para 6 metros. A Figura 3.12 mostra a disposição dos blocos. O gradeamento neste caso resultou em 3.141 células conforme a Figura 3.13.

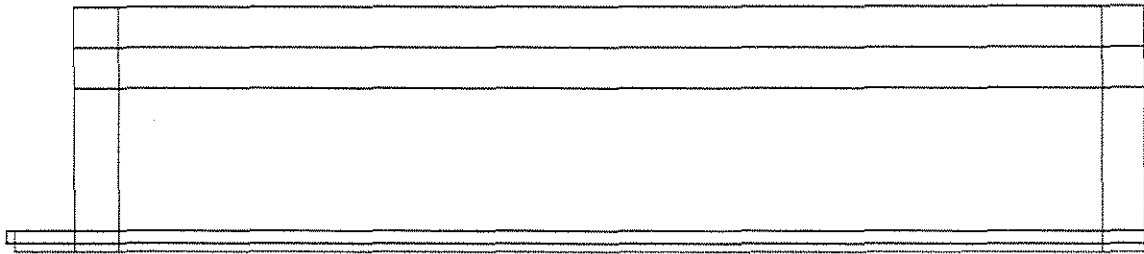


Figura 3.12: Blocos de construção da malha bidimensional.

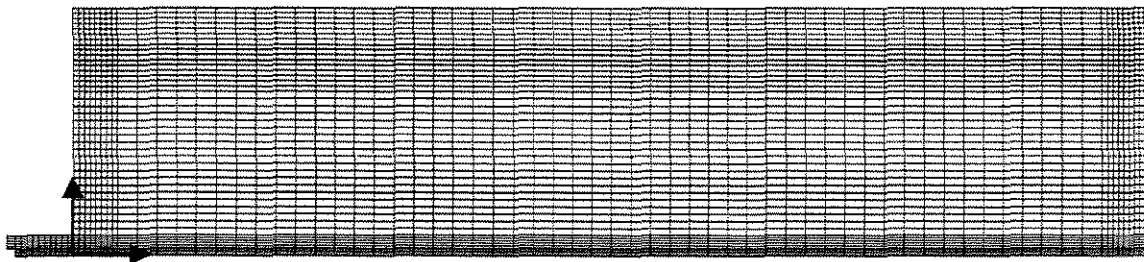


Figura 3.13: Malha bidimensional do forno.

3.3. PROCESSAMENTO

3.3.1. Arquivo de Comando

O CFX utiliza comandos e palavras-chave próprios, os quais são ordenados e gravados em um arquivo específico, que pode ser escrito em um editor convencional ou interativamente através da opção *Setup* dentro do módulo *Solver*. Este arquivo encarrega-se, entre outras coisas, da prescrição do tipo do problema, do sistema de coordenadas, das condições de contorno, dos algoritmos de solução e seus parâmetros, além dos parâmetros dos modelos.

As condições de contorno do problema são aplicadas para todas as equações de transporte: momento, energia, modelos de turbulência e combustão. No caso de haver transferência de calor radiativo, valores de emissividade e rugosidade especular da superfície são definidos para as paredes, assim como a emissividade do gás.

A cada interrupção do processamento, mesmo que não tenha sido satisfeito o critério de convergência, é gerado um arquivo de resultados, o qual pode ser utilizado para a reinício do mesmo problema. Ressalta-se que isso somente é possível com a utilização do mesmo arquivo geométrico sem alteração do gradeamento.

Todas as simulações foram realizadas com o modelo duplo delta para a função densidade de probabilidade. O esquema tridimensional foi simulado com o modelo de turbulência RNG $k-\epsilon$ e o modelo de combustão *mixed-is-burnt*. O esquema bidimensional de 6 m de comprimento foi simulado com o modelo de turbulência $k-\epsilon$ e o modelo de combustão *mixed-is-burnt*. O esquema bidimensional de 4 m de comprimento foi simulado utilizando, além dos modelos anteriores, o modelo de turbulência RNG $k-\epsilon$ e dos tensores de Reynolds na forma diferencial, o modelo de combustão *eddy break-up* com mistura viscosa, sem termo produto e taxa infinita e os cálculos de transferência de calor por radiação térmica.

3.3.1.1. Parâmetros para o Método dos Volumes Finitos

As equações são resolvidas através da técnica dos Volumes Finitos em malha estruturada e coordenadas generalizadas coincidente com a fronteira. As variáveis dependentes generalizadas ϕ , os termos difusivos Γ_ϕ e os termos fontes S_ϕ representadas na equação genérica:

$$\frac{\partial \rho \phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \bar{v} \phi) = \nabla \cdot (\Gamma_\phi \nabla \phi) + S_\phi \quad (3.70)$$

estão apresentadas na Tabela 3.4 para as equações de balanço correspondentes.

Cada um dos termos da equação acima (transiente, difusivo, convectivo e fonte) são discretizados pelo método dos volumes finitos com arranjo co-localizado. Os esquemas de interpolação utilizados foram o *upwind* e o *híbrido*, escolhidos de acordo com a convergência. O acoplamento pressão-velocidade escolhido foi o SIMPLEC. A técnica da relaxação foi aplicada para cada uma das equações de transporte, cujos coeficientes de relaxação foram ajustados de forma a se ter uma convergência a mais rápida e estável possível. Entretanto, não existe até o presente nenhum critério para esta escolha. Os métodos de solução do sistema de equações utilizados foram os métodos iterativos *line solver*, *stone*, *block stone*, *AMG*, cuja escolha foi feita de acordo com as características de convergência.

O critério de interrupção na execução do programa ficou, de acordo com a conveniência, entre o número máximo de iterações, a tolerância do valor residual de massa ou o máximo tempo de CPU. Na saída foi definida a condição *mass flow boundaries* para todos os casos, onde supõe-se um escoamento completamente desenvolvido.

Tabela 3.4: Exemplos de variáveis das equações de conservação atribuídas à equação genérica.

Equação	ϕ	Γ_ϕ	S_ϕ
Massa	1	0	0
Momento	\bar{v}	μ_{ef}	$-\nabla P + \nabla \cdot (\mu_{ef} (\nabla \bar{v})^T) - \nabla \cdot (\frac{2}{3} \rho k \delta + (\frac{2}{3} \mu_{ef} - \zeta) \nabla \cdot \bar{v} \delta) + B$
Modelo $k-\epsilon$	k	$\mu + \frac{\mu_T}{v_k}$	$\Pi + \Psi - \rho \epsilon$
	ϵ	$\mu + \frac{\mu_T}{v_\epsilon}$	$C_{1k\epsilon} \frac{\epsilon}{k} (\Pi + C_{3k\epsilon} \max(\Psi, 0)) - C_{2k\epsilon} \rho \frac{\epsilon^2}{k}$
Modelo RNG $k-\epsilon$	k	$\mu + \frac{\mu_T}{v_{kRNG}}$	$\Pi + \Psi - \rho \epsilon$
	ϵ	$\mu + \frac{\mu_T}{v_{\epsilon RNG}}$	$(C_{1RNG} - C_\eta) \frac{\epsilon}{k} (\Pi + C_{3RNG} \max(\Psi, 0)) - C_{2RNG} \rho \frac{\epsilon^2}{k}$
Energia	H	$\frac{\lambda}{c_p} + \frac{\mu_T}{v_T}$	$\frac{\partial P}{\partial t} + Q$
Combustão <i>Mixed-is- burnt</i>	\bar{f}	$\frac{\mu_T}{v_T} + \frac{\mu}{v_L}$	0
	ϑ	$\frac{\mu_T}{v_T} + \frac{\mu}{v_L}$	$C_{\epsilon 1} \mu_T (\nabla \bar{f})^2 - C_{\epsilon 2} \rho \frac{\epsilon}{k} \vartheta$
Combustão <i>Eddy break-up</i>	φ_C	$\frac{\mu_T}{v_T} + \frac{\mu}{v_L}$	$-\rho \frac{\epsilon}{k} C_R C_A M_{lim}$

3.3.1.2. Condições de Contorno

As velocidades de entrada foram calculadas através das vazões, que foram de 2,14 e 0,22 kg/s para o ar e o combustível respectivamente. O valor de k na entrada foi aproximado por $0,002v^2$ e o valor de ϵ por $\frac{k^{1,5}}{0,3d}$, sendo v o módulo da velocidade de entrada e d o diâmetro hidráulico. Função de parede logarítmica foi usada para representar a sub-camada laminar. As temperaturas de entrada do combustível e do ar foram de 298 K. O combustível utilizado estava composto de 30% de metano e 70% de nitrogênio em porcentagem mássica, com poder calorífico do metano de $5 \cdot 10^7$ J/kg (a taxa de liberação de energia pela combustão foi de aproximadamente 4,7 MW). O ar de combustão apresentava 22% de oxigênio e 78% de nitrogênio. A fração de mistura e a variância da fração de mistura (inseridos através dos comandos *combustion scalar 1* e *combustion scalar 2* respectivamente) foram de 1,0 e 0,0 para a entrada de combustível e 0,0 e 0,0 para a entrada de ar. A troca de calor entre a superfície externa do refratário e o ar ambiente foi introduzida através do comando *temperature ABC* empregado na seguinte forma:

$$A T + B Q = C \quad (3.71)$$

onde, da Lei de Newton do resfriamento, T é a temperatura, Q é o fluxo de calor e A , B e C são constantes que podem ser definidas. Nos casos em que esta condição foi empregada, os valores de A , B e C valeram 9,0, 1,0 e 2.682,0 respectivamente, cujo coeficiente convectivo foi estimado em $9,0 \text{ W/m}^2 \cdot \text{K}$ e a temperatura ambiente em 298 K.

3.3.1.2.1. Esquema Tridimensional do Forno

As paredes externas foram consideradas adiabáticas. As velocidades de entrada do combustível e do ar de combustão foram normais às superfícies de entrada, distribuídas de forma uniforme, sendo calculadas em função das vazões.

3.3.1.2.2. Esquema Bidimensional do Forno

Planos de periodicidade foram inseridos no arquivo de comando para todas as faces através dos comandos *low k* e *high k*. O combustível entra pelo duto central do maçarico na direção normal. O ar entra através do duto anular, sendo a velocidade normal calculada como a razão entre a vazão e a área circunferencial, e a velocidade tangencial foi estimada inicialmente como a razão entre a vazão e a área de entrada dos quatro dutos da figura tridimensional.

3.3.1.2.2.1. Sem refratário e 4 metros de comprimento

As paredes externas foram consideradas adiabáticas. O valor das vazões de entrada de ar serão discutidos posteriormente. Nos casos em que foram inseridas as transferências radiativas, foi realizada uma análise da emissividade que variou de 0,55, 0,65, 0,75 e 0,85. Também foi feita uma análise do coeficiente de absorção do gás com valores de 0,4, 0,5, 0,6 e 0,7. Em um dos casos admitiu-se a existência de perdas de calor para o ambiente, introduzida através do comando *Temperature ABC*. O algoritmo *Discrete Transfer* foi utilizado no cálculo das transferências radiativas.

3.3.1.2.2.2. Com refratário e 6 metros de comprimento

Uma vazão equivalente ao modelo tridimensional foi utilizada. A condutividade térmica do refratário foi de $1,4 \text{ W/mK}$. O comando *Temperature ABC* foi empregado nas mesmas condições do item anterior.

4. RESULTADOS E DISCUSSÕES

O aumento do refinamento da malha pode proporcionar maior estabilidade assim como reduzir os erros numéricos, mas por outro lado, o aumento na quantidade de volumes de controle faz com que o tempo de processamento também se eleve, devido ao maior número de equações que constituirão a matriz de solução, principalmente quando há o tratamento de vários fenômenos simultaneamente. Um balanceamento entre os diversos fatores como o tempo de processamento, a estabilidade de convergência e a precisão numérica, nem sempre é um procedimento fácil, tendo-se também de se considerar as limitações impostas pelo hardware, neste caso, uma estação de trabalho SUN modelo SPARC 20.

Apesar de não alterarem o resultado final, não existe um critério para a escolha dos coeficientes de relaxação que integram as equações de balanço. Os valores de relaxação padronizados pelo *CFX* variam conforme o algoritmo de acoplamento pressão-velocidade e de acordo com as variáveis dependentes. Por exemplo, para a equação da flutuação de pressão vale 0,4 com o algoritmo *SIMPLE* e 1,0 com o *SIMPLEC*. Contudo, uma vez escolhidos, estes fatores tornam-se parte integrante do sistema. Um ajuste dinâmico foi testado, quando um novo fator era definido de acordo com a tendência da curva após um determinado número de iterações. Os efeitos provocados foram bastante semelhantes ao observado no regime transiente, onde para cada novo passo de tempo havia um retorno do resíduo aos níveis anteriores, entretanto, para o ajuste dinâmico dos coeficientes de relaxação, resultava invariavelmente em divergência.

O jato de combustível, chocando-se frontalmente com o fluxo reverso central, atua sobre a estabilidade do sistema aerodinâmico, que por sua vez atua sobre as características de convergência. Velocidade reduzida para a entrada de combustível geralmente apresenta dificuldade de convergência. É possível atuar sobre estes parâmetros, por exemplo, através da adição de um inerte ao combustível ou de uma pré-mistura com o oxidante.

O esquema bidimensional foi utilizado principalmente devido ao elevado tempo computacional para a convergência do esquema tridimensional (sendo que, apenas com a inclusão do modelo de combustão, este tempo foi superior a 500 horas de CPU), o qual impossibilitaria a realização dos diversos testes desejados, como a introdução dos cálculos

radiativos, da análise dos parâmetros numéricos, dos modelos de turbulência e combustão, entre outros. Esquemas de interpolação de segunda ordem dos termos convectivos como o *quick* e o *cct* foram testados no modelo bidimensional com o modelo de turbulência diferencial dos tensores de Reynolds mas sem sucesso.

4.1. ESQUEMA TRIDIMENSIONAL

As simulações tridimensionais a seguir foram obtidas com escoamento compressível, esquema de interpolação *upwind*, os modelos de turbulência $k-\varepsilon$ e de combustão *mixed-is-burnt* sem cálculos radiativos e sem perdas de calor pelas paredes. A simulação tridimensional, devido à convergência mais complicada, foi realizada em diversas etapas nem sempre previamente estabelecidas, onde os resultados parciais foram sendo utilizados no reinício de cada uma delas. Inicialmente, a condição a mais simples possível foi utilizada: entrada apenas de ar e escoamento incompressível isotérmico. Obtida as soluções iniciais, os novos modelos foram sendo adicionados sequencialmente e simulados novamente. Entretanto, com a inserção do modelo de combustão a convergência tornou-se bem mais complicada, principalmente devido aos intensos gradientes impostos pela taxa de liberação de energia pela combustão, denotando a grande rigidez numérica. O passo de tempo utilizado no falso transiente teve de ser reduzido nas etapas iniciais a valores de até 10^{-6} segundos e o escoamento precisou ser tratado como incompressível. Este passo de tempo extremamente reduzido foi indispensável para que o problema não divergisse, mas tornando a aproximação à solução extremamente lenta. Contudo, seus resultados parciais possibilitaram a utilização de passos mais elevados posteriormente. Finalmente o escoamento foi tratado como compressível. A verificação do tempo computacional para cada uma destas etapas acabou não fazendo sentido, pois com frequência o caminho escolhido conduzia a um sistema divergente, seja pela tentativa de acelerar o processo através dos coeficientes de relaxação, pela aplicação do esquema falso transiente ou pela escolha de um outro método de solução das equações. Nestes casos novas estimativas deveriam ser feitas e um novo reinício a partir do último resultado.

Através da Figura 4.1 à Figura 4.6 tem-se a noção dos caminhos percorridos pelos jatos de ar e combustível ao saírem do maçarico. Os mapas de velocidade axial e radial foram divididos em duas escalas, onde em uma delas aparecem apenas os valores positivos e na outra apenas os valores negativos, o que facilita a observação. Devido ao escoamento em vórtice do ar no interior do maçarico e sua saída tangencial, o jato abre-se no interior da câmara (Figura 4.6) indo em direção à parede cilíndrica. Próximo à parede o escoamento subdivide-se, onde uma das partes forma a circulação próxima à parede circular (Figura 4.16) e a outra parte segue em direção à saída. O escoamento em vórtice continua sendo mantido (Figura 4.15 e Figura

4.17). Este tipo de escoamento a altas velocidades gera a característica reversão do fluxo (Figura 4.1 e Figura 4.2). Um mínimo de pressão é observado a aproximadamente 0,75 m da saída do maçarico sobre o eixo axial (Figura 4.12, Figura 4.13 e Figura 4.14). O jato de combustível choca-se frontalmente com o fluxo reverso central, sendo rapidamente consumido por combustão durante este choque (Figura 4.7 e Figura 4.8). A Figura 4.9 indica a existência de um excesso para o ar de combustão. As regiões onde ocorrem uma mistura intensa entre os jatos de ar e combustível apresentam, portanto, os picos de temperatura (Figura 4.10 e Figura 4.11). As menores temperaturas no interior da câmara são observadas nas regiões próximas à parede circular, principalmente devido à circulação do ar, o qual entra à temperatura ambiente no maçarico.

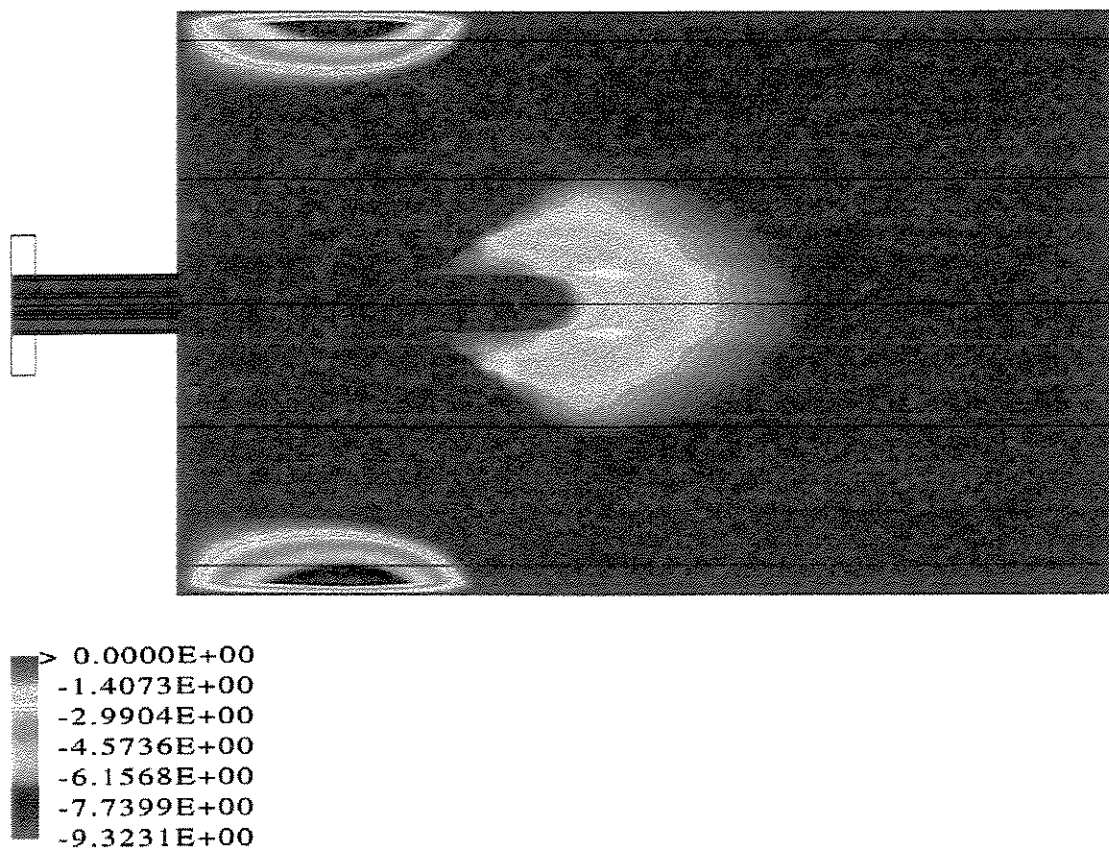


Figura 4.1 : Mapa de Velocidade Axial (I) (m/s).

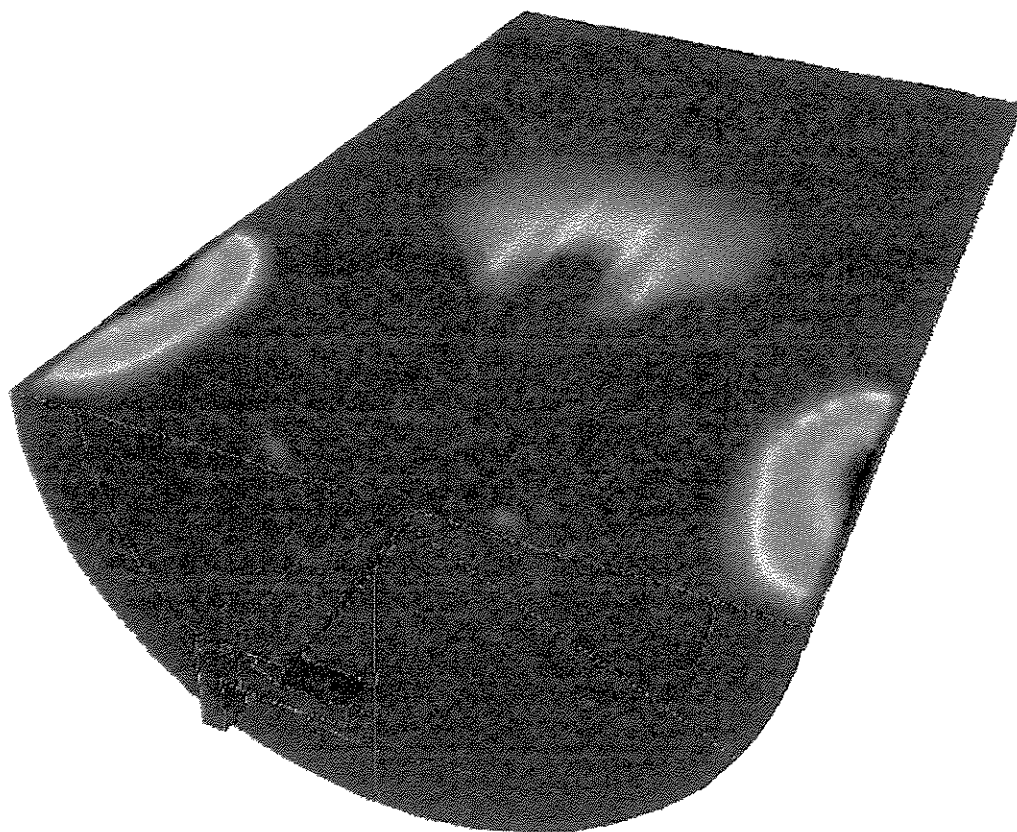


Figura 4.2 : Topografia de Velocidade Axial (I).

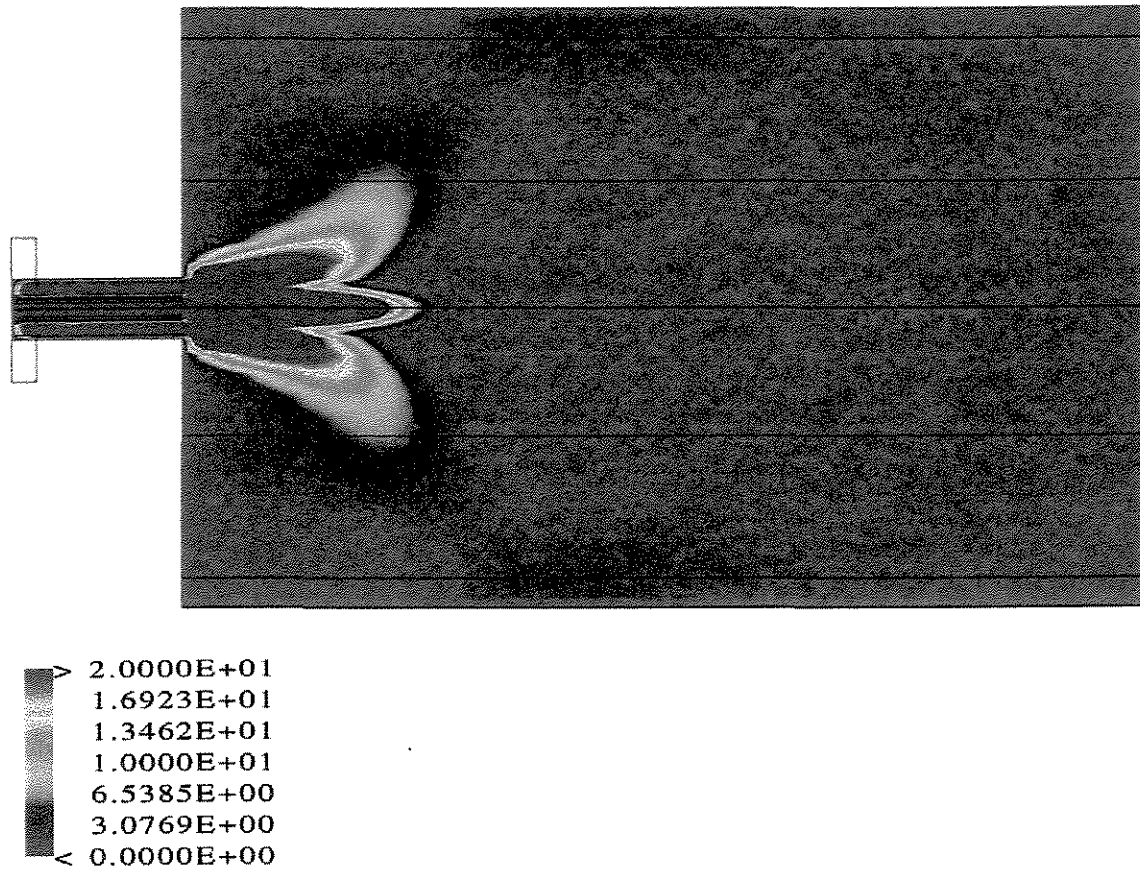


Figura 4.3 : Mapa de Velocidade Axial (II) (m/s).

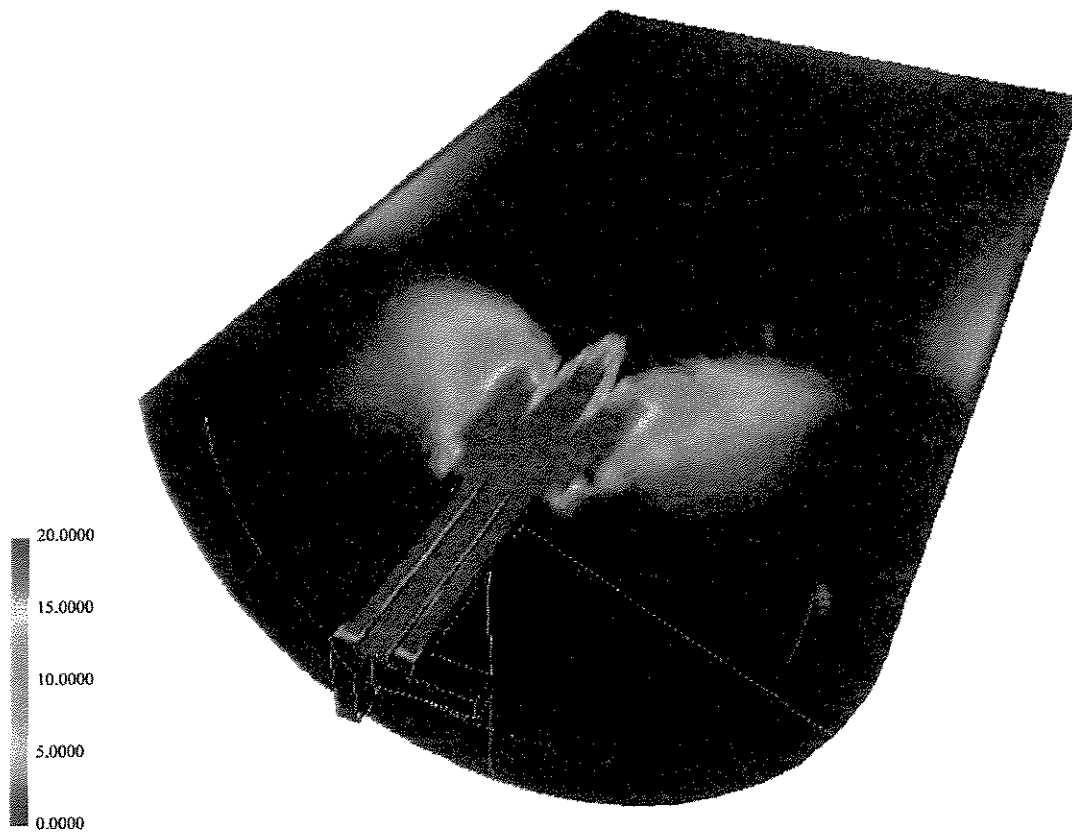


Figura 4.4 : Topografia de Velocidade Axial (II) (m/s).

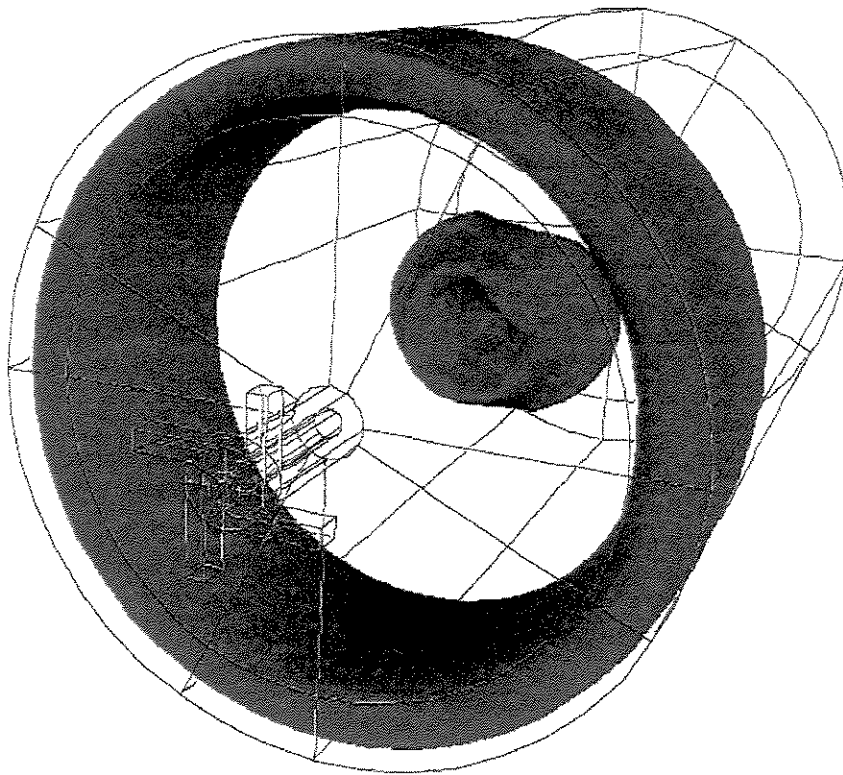


Figura 4.5 : Iso-Superfície de Velocidade Axial a $-1,5$ m/s.

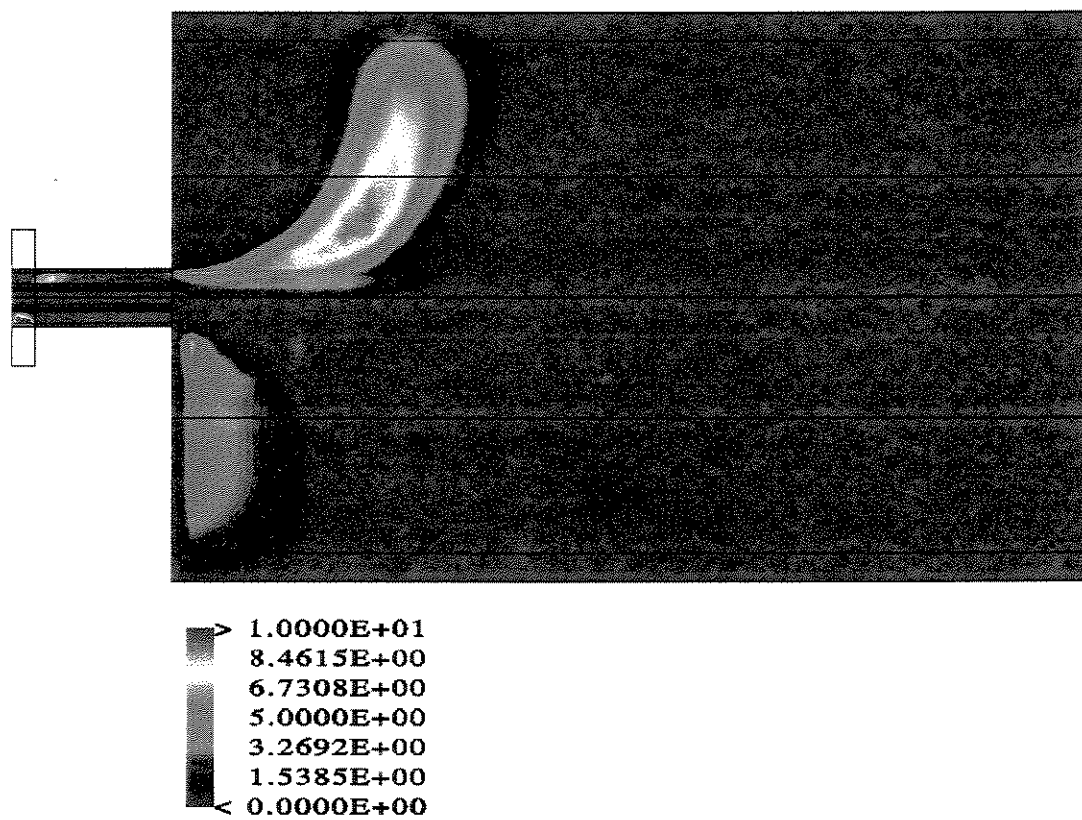


Figura 4.6 : Mapa de Velocidade Radial (m/s).

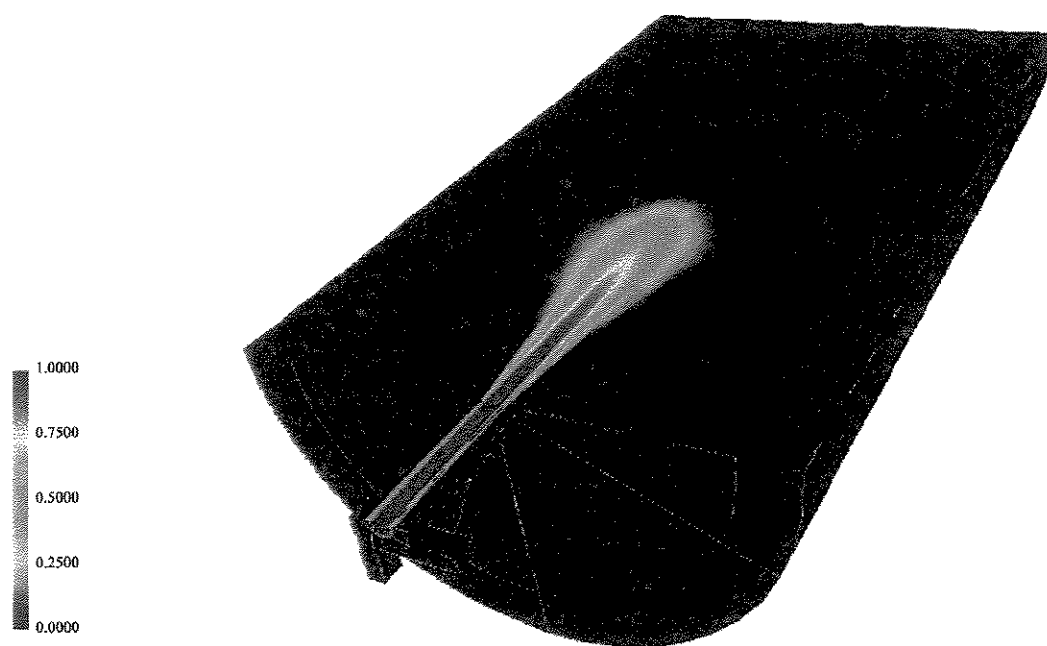


Figura 4.7 : Topografia de Fração Mássica de Combustível.

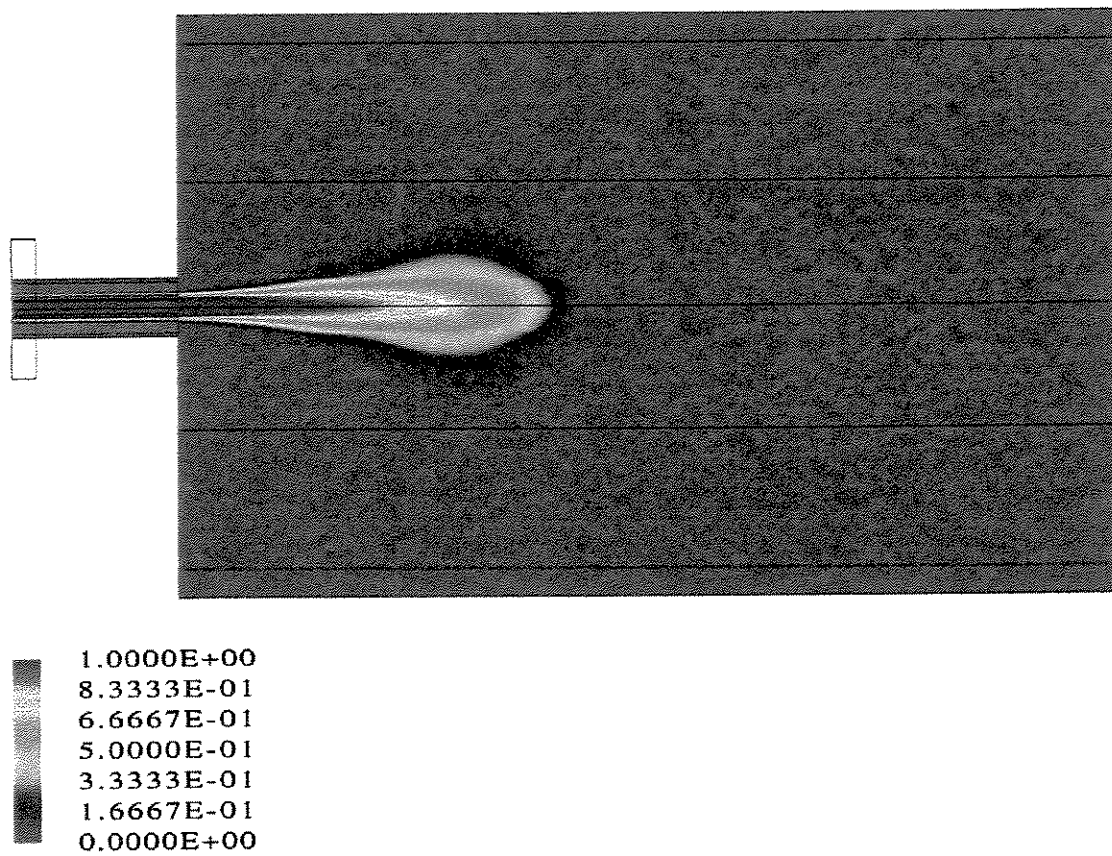


Figura 4.8 : Mapa de Fração Mássica de Combustível.

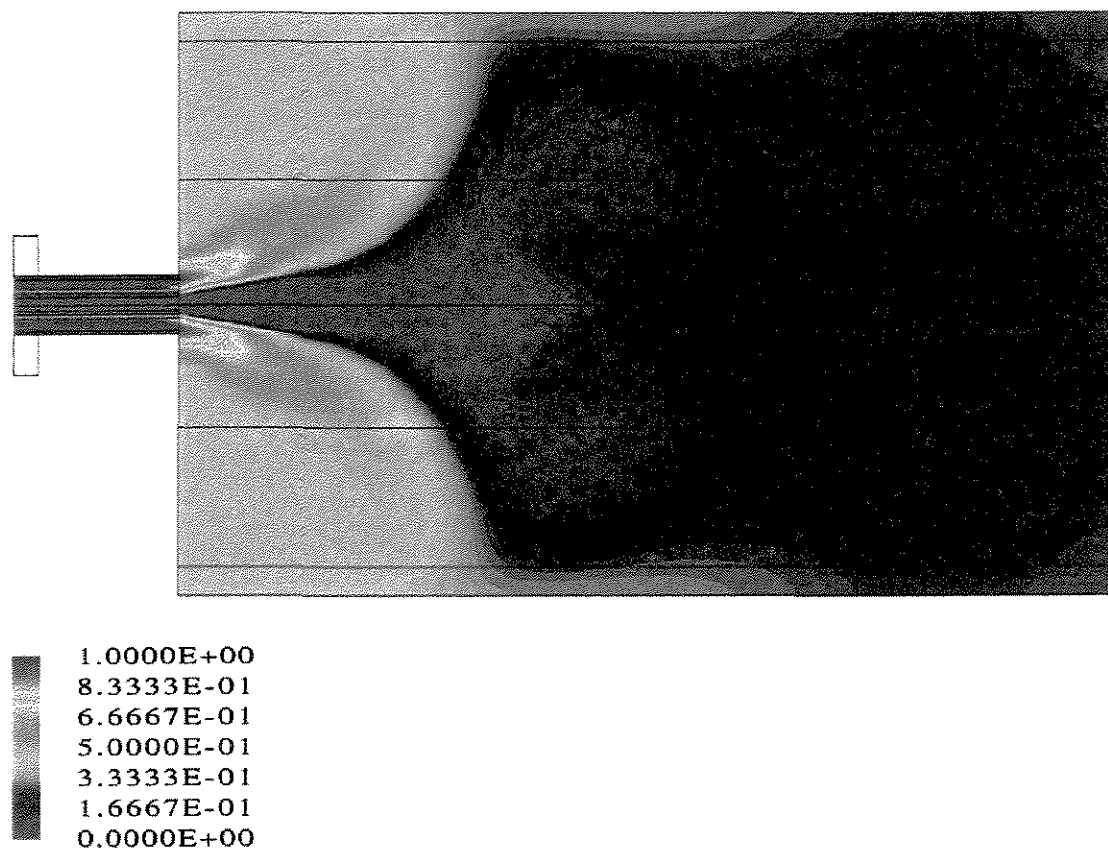


Figura 4.9 : Mapa de Fração Mássica de Oxidante.

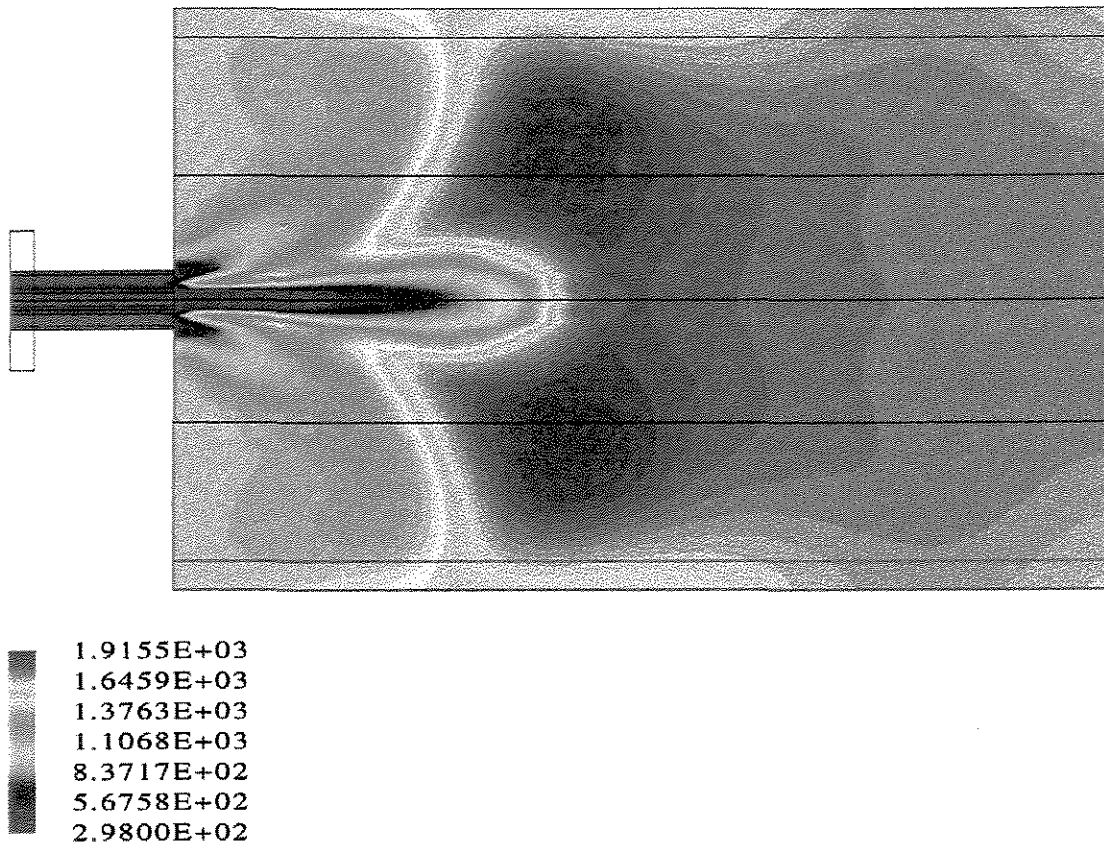


Figura 4.10 : Mapa de Temperatura (K).

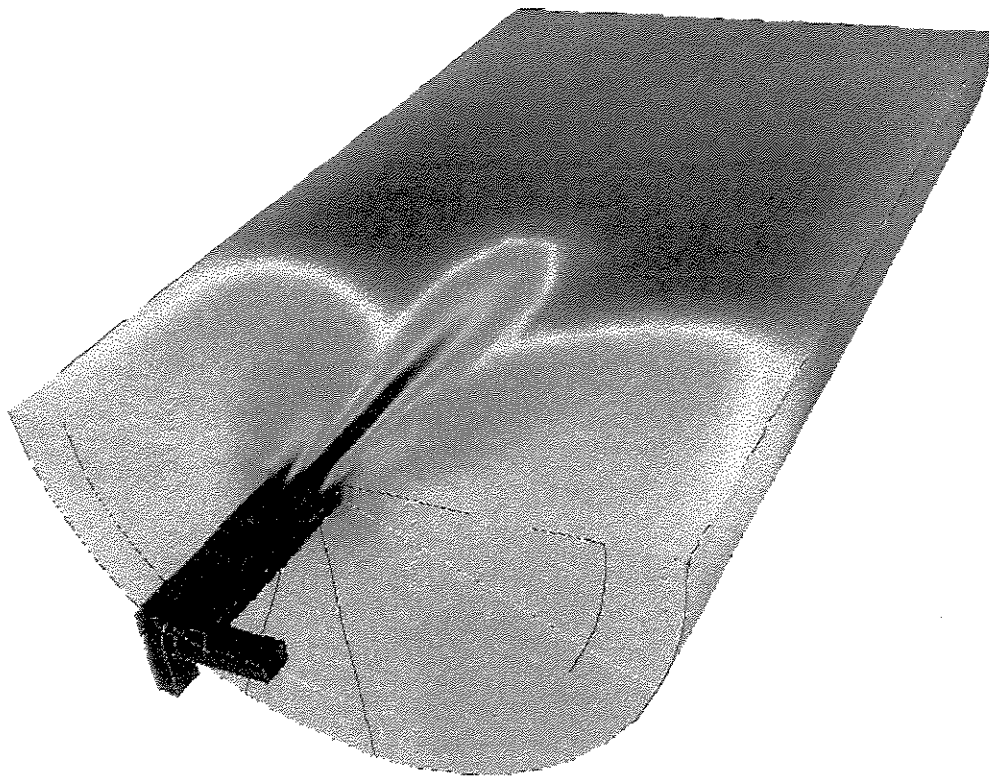


Figura 4.11 : Topografia de Temperatura.

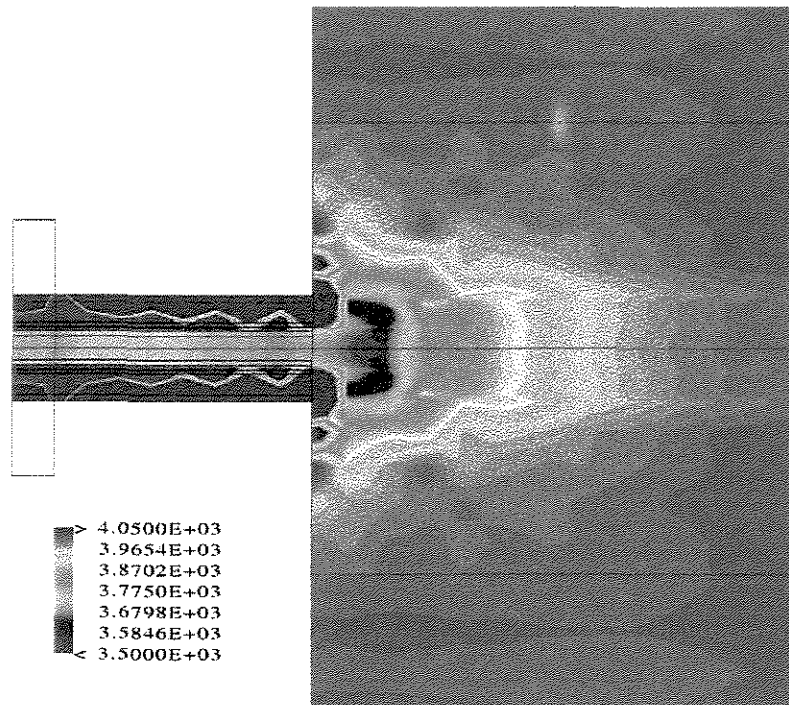


Figura 4.12 : Mapa de Pressão (Pa).

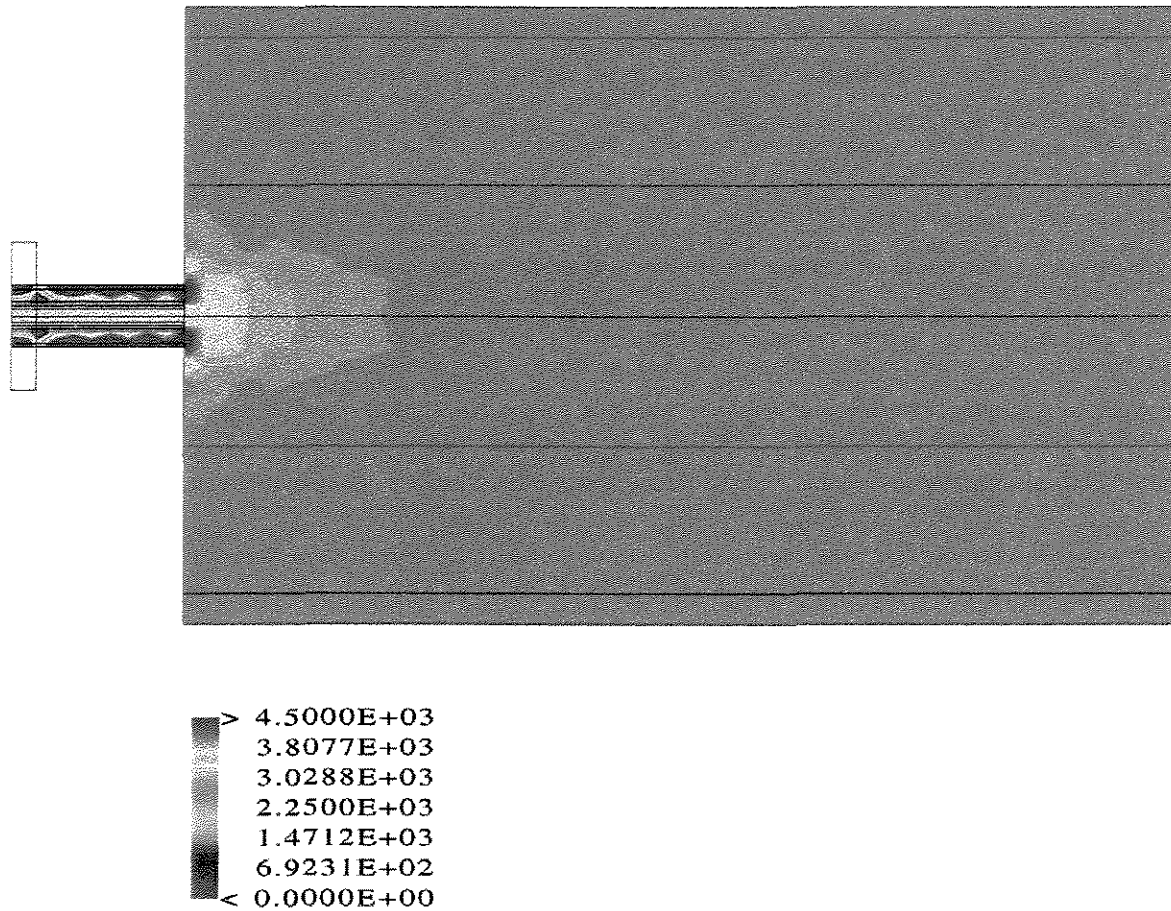


Figura 4.13 : Mapa de Pressão (Pa).

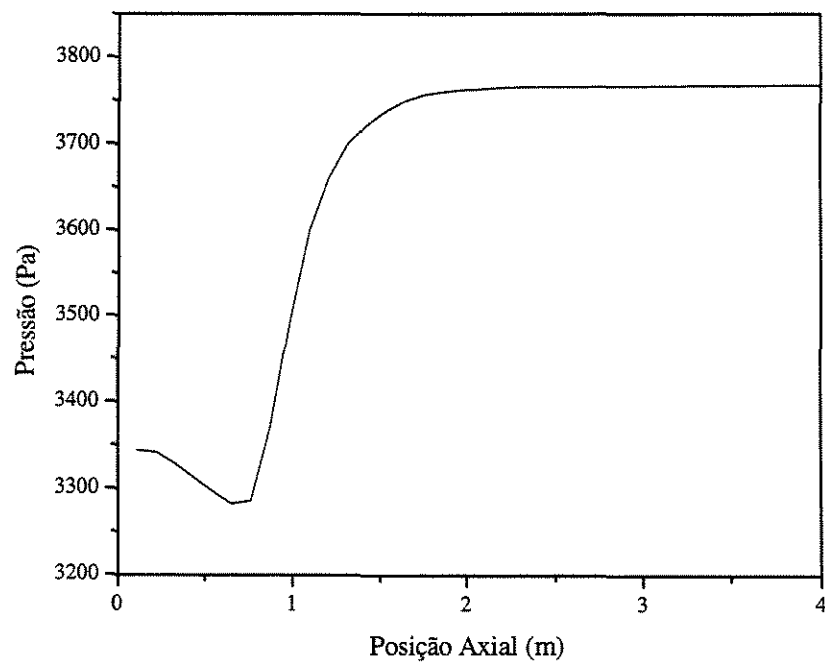


Figura 4.14 : Perfil Axial de Pressão.

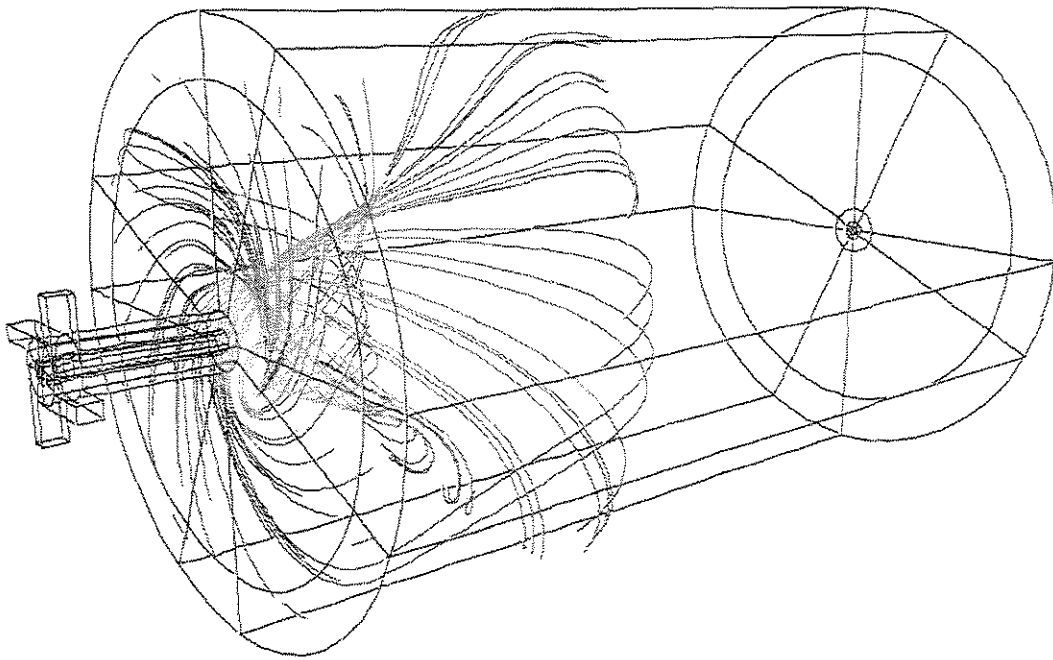


Figura 4.15 : Linhas de Corrente.

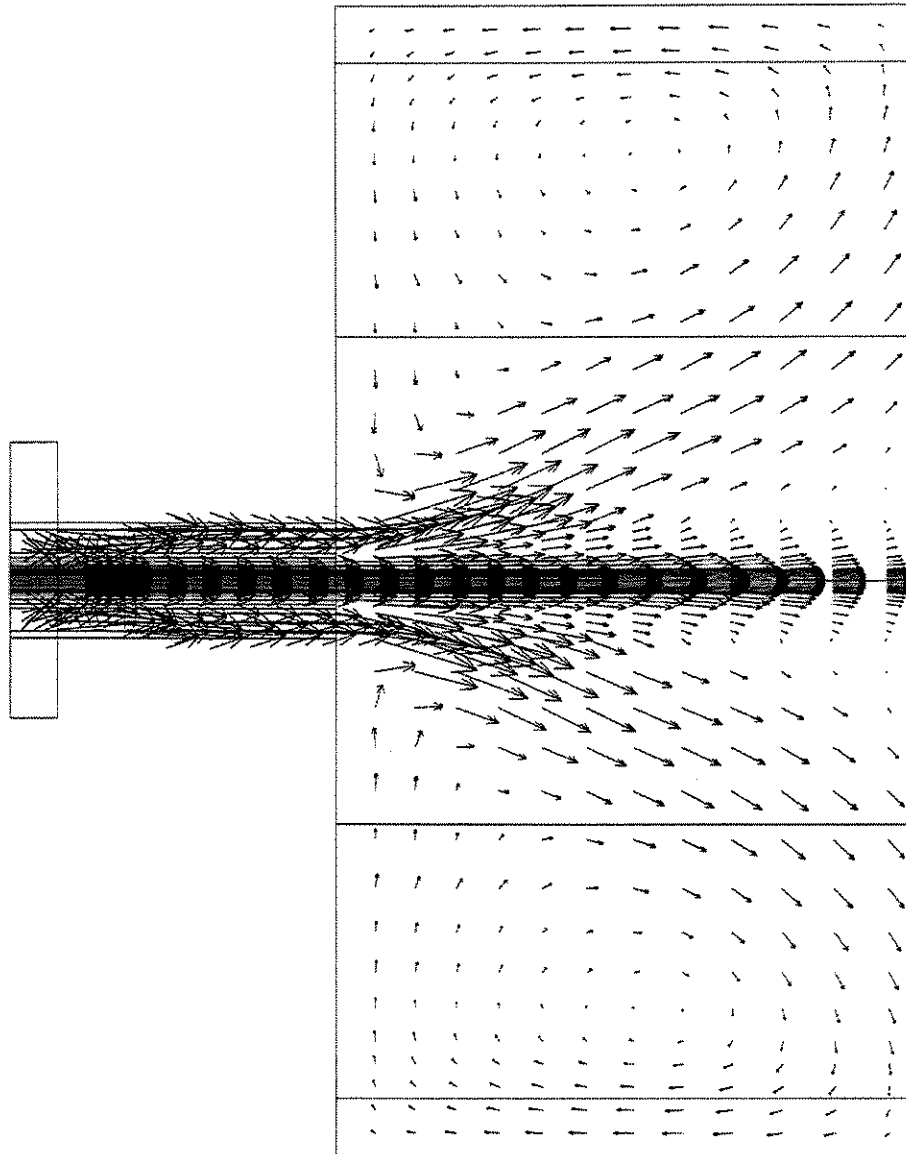


Figura 4.16 : Vetores Velocidade na Saída do Maçarico.

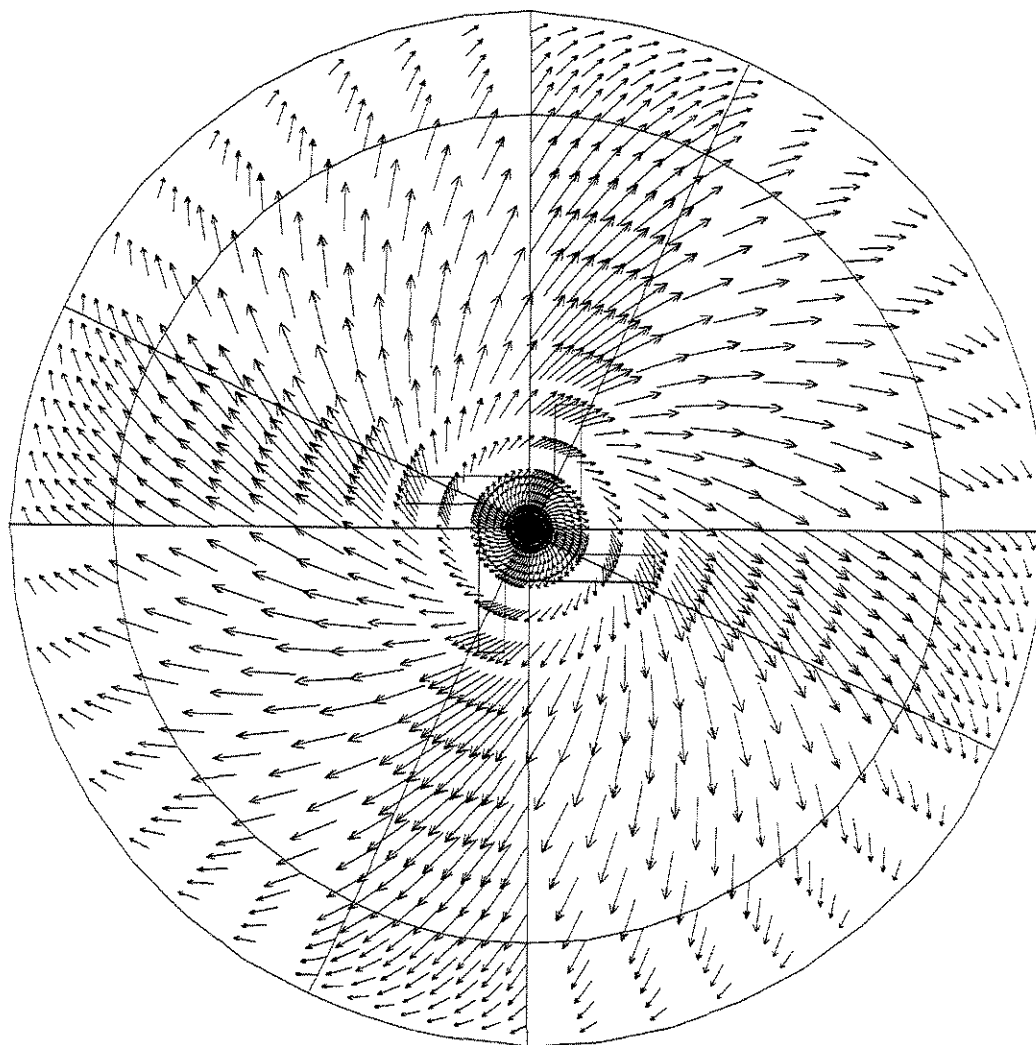


Figura 4.17 : Vetores velocidade a 1m da Parede Circular.

4.2. ESQUEMA BIDIMENSIONAL

A dificuldade na convergência para as malhas bidimensionais foram bem mais amenas que as apresentadas pela malha tridimensional utilizando o mesmo esquema de interpolação *upwind* e o mesmo modelo de turbulência $k-\epsilon$. Apenas quando houve a passagem do modelo de turbulência $k-\epsilon$ para o modelo dos tensores diferenciais de Reynolds a convergência novamente complicou-se, sendo que, dentre os métodos de solução do sistema de equações testados, apenas o *AMG* obteve a convergência mesmo com o esquema de interpolação *upwind*.

A abertura do jato no interior da câmara indo em direção à parede cilíndrica pode ser observada na Figura 4.20, Figura 4.40, Figura 4.48 e Figura 4.54. A divisão do fluxo do jato, da qual forma-se a circulação próxima à parede circular e o fluxo em direção à saída, pode ser observada através das linhas de corrente na Figura 4.28 e Figura 4.58. A reversão do fluxo foi observada em todas as simulações bidimensionais, tanto com a malha de quatro quanto com a de seis metros. O excesso do ar de combustão pode ser observado na Figura 4.23, Figura 4.33 e Figura 4.56. As menores temperaturas no interior da câmara também foram observadas na região de circulação do ar.

4.2.1. Comprimento de Quatro metros

Uma análise foi realizada para a verificação do limite mínimo necessário para o resíduo de massa, onde os resultados dos perfis radiais de temperatura e velocidade axial com o resíduo atingindo 1.10^{-7} e 1.10^{-12} foram comparados (Figura 4.36 e Figura 4.37). Nenhuma diferença perceptível foi observada, indicando que o primeiro valor já é totalmente satisfatório para os casos em estudo.

Três modelos de turbulência foram então testados com esta geometria: $k-\epsilon$, *RNG* $k-\epsilon$ e dos tensores diferenciais. A reversão de fluxo pode ser observada na Figura 4.18, Figura 4.29,

Figura 4.31 e Figura 4.39. Na Figura 4.37 e Figura 4.52 a reversão também pode ser observada através do perfil radial, observando-se que o ponto de separação entre os fluxos diretos e reversos ocorre aproximadamente na posição axial de 0,53 m nesta posição axial.

A partir do modelo $k-\epsilon$, três casos distintos foram simulados e comparados: sem perda de calor pelas paredes e sem trocas radiativas (Figura 4.18 à Figura 4.28), com perda de calor pelas paredes e sem trocas radiativas (Figura 4.29 e Figura 4.30) e, com perda de calor pelas paredes e com trocas radiativas (Figura 4.31 à Figura 4.35). A transferência de calor pelas paredes foi calculada através do comando *temperature ABC* e os cálculos radiativos através do algoritmo *Discrete Transfer*. Como pode ser observado não existiram diferenças sensíveis entre os perfis, existindo entretanto, diferenças em ordem de grandeza entre as variáveis como observado, por exemplo, nos picos de temperatura que foram reduzindo-se do primeiro para o terceiro caso (Figura 4.26, Figura 4.30 e Figura 4.35), ou no campo de velocidade do fluxo reverso.

Por outro lado, uma diferença considerável entre os perfis pode ser observada entre o modelo de turbulência $k-\epsilon$ e os resultados do modelo RNG $k-\epsilon$ (Figura 4.39 à Figura 4.42) principalmente na extensão do jato de combustível, que mostrou-se bem mais pronunciado para este último (Figura 4.41), o qual também apresentou um maior pico de temperatura, apesar de estarem incluídos os fluxos radiativos (Figura 4.42). Ainda com este modelo foram realizadas análises de sensibilidade paramétrica, variando-se os coeficientes de absorvidade do gás (Figura 4.43 e Figura 4.44) e os coeficientes de emissividade das paredes (Figura 4.45 e Figura 4.46). Entretanto, nenhuma diferença significativa nos perfis de temperatura ou de pressão foram observadas nestas análises.

Por outro lado, confirmando o que foi afirmado por Morvan et al (1998), os perfis obtidos com o modelo RNG $k-\epsilon$, à exceção da velocidade axial, aproximaram-se bastante do obtido com o modelo dos tensores diferenciais de Reynolds (Figura 4.47 à Figura 4.50), sendo que ambos foram simulados com o esquema *upwind*.

O modelo de formação de fuligem está disponível apenas para o modelo de combustão *Eddy Break-up*. As maiores concentrações de fuligem foram observadas, como seria de se esperar, nas regiões de maior concentração de combustível a alta temperatura, como a região central a partir da região de reversão de fluxo de acordo com a Figura 4.38.

4.2.1.1. Modelo de Turbulência $k-\epsilon$

4.2.1.1.1. Modelo de Combustão Mixed-is-Burnt

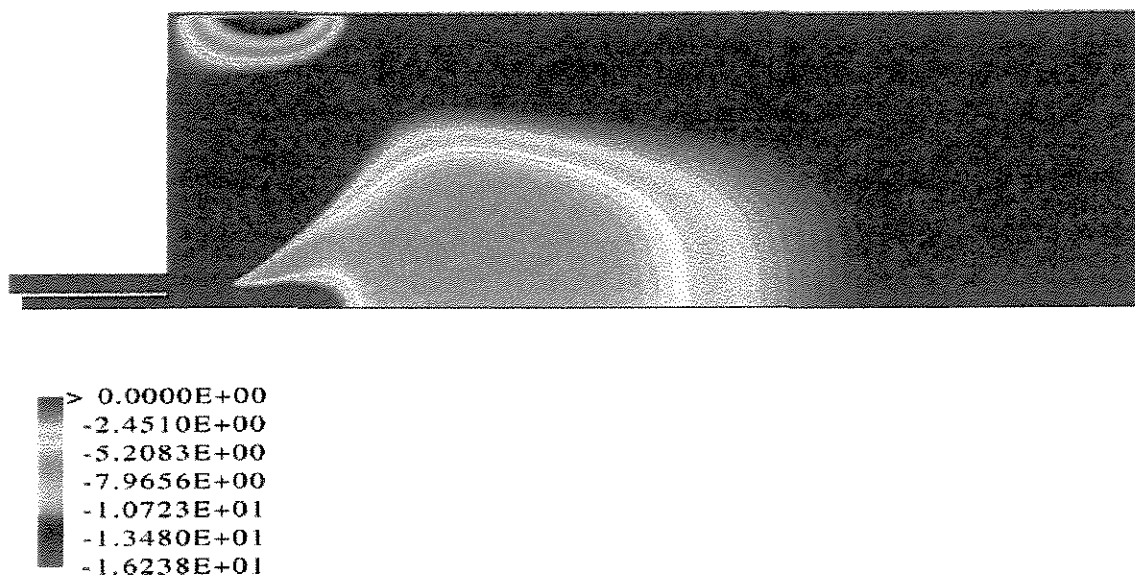


Figura 4.18 : Mapa de Velocidade Axial (I) (m/s) – Modelo $k-\epsilon$.



Figura 4.19 : Mapa de Velocidade Axial (II) (m/s) – Modelo $k-\epsilon$.

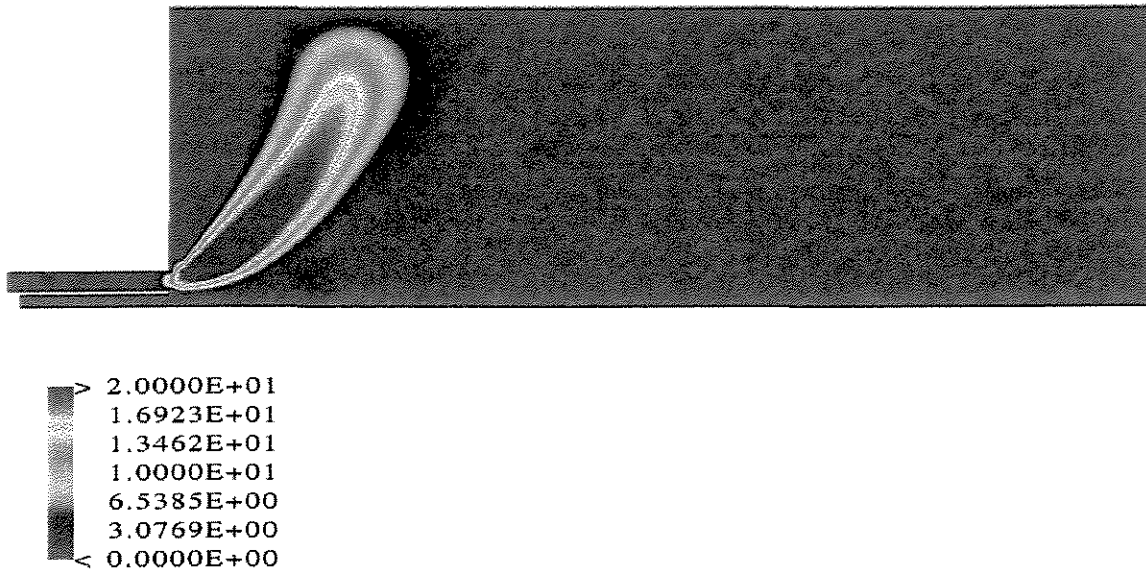


Figura 4.20 : Mapa de Velocidade Radial (I) (m/s) – Modelo $k-\epsilon$.

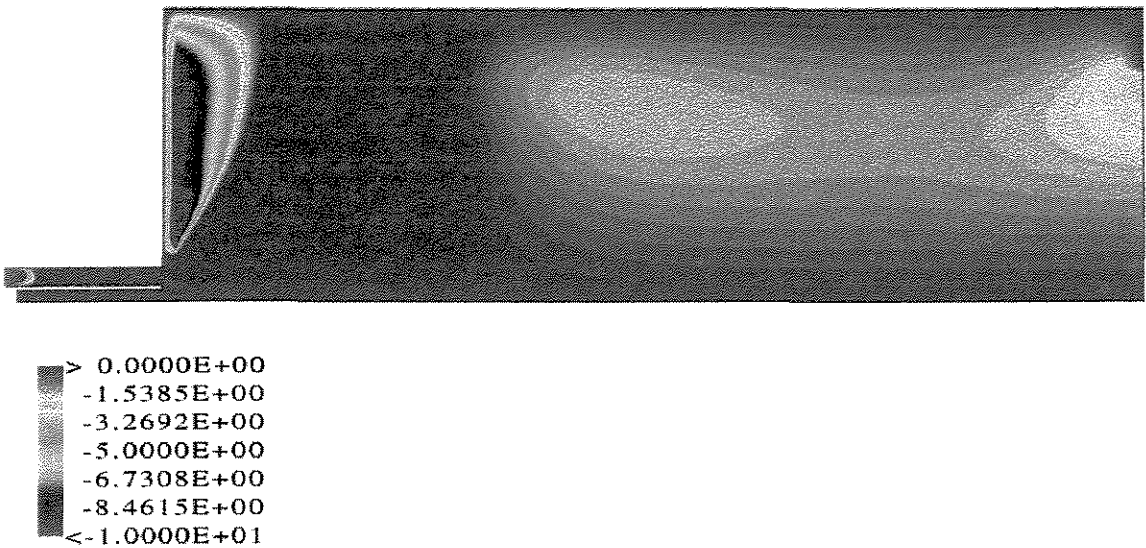


Figura 4.21 : Mapa de Velocidade Radial (II) (m/s) – Modelo $k-\epsilon$.

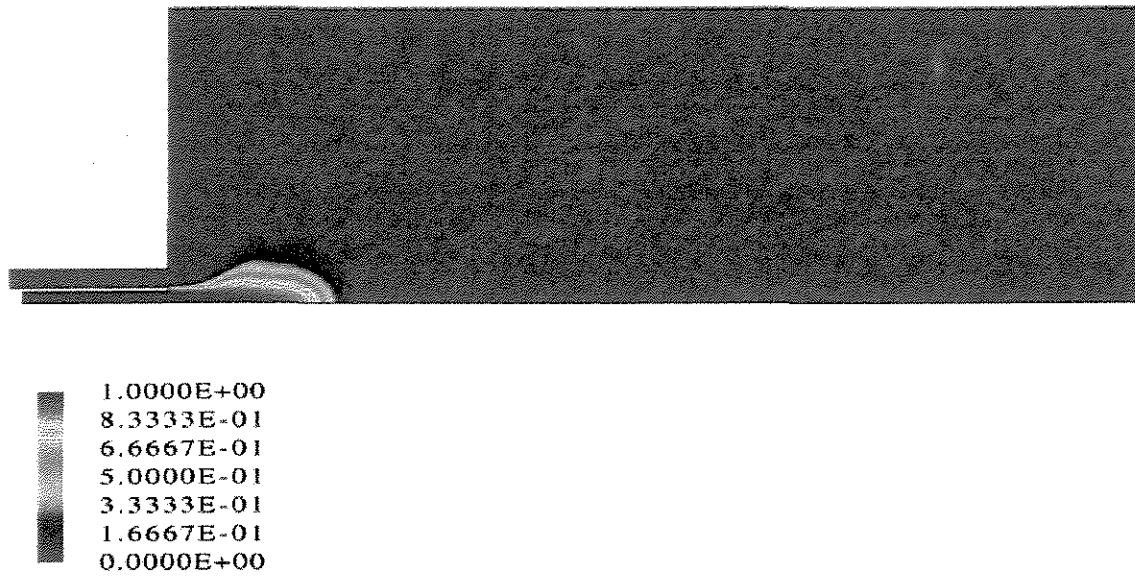


Figura 4.22 : Mapa de Fração Mássica de Combustível – Modelo $k-\epsilon$.



Figura 4.23: Mapa de Fração Mássica de Oxidante – Modelo $k-\epsilon$.



Figura 4.24 : Mapa de Fração Mássica de Produtos – Modelo $k-\epsilon$.



Figura 4.25 : Densidade (kg/m^3) – Modelo $k-\epsilon$.

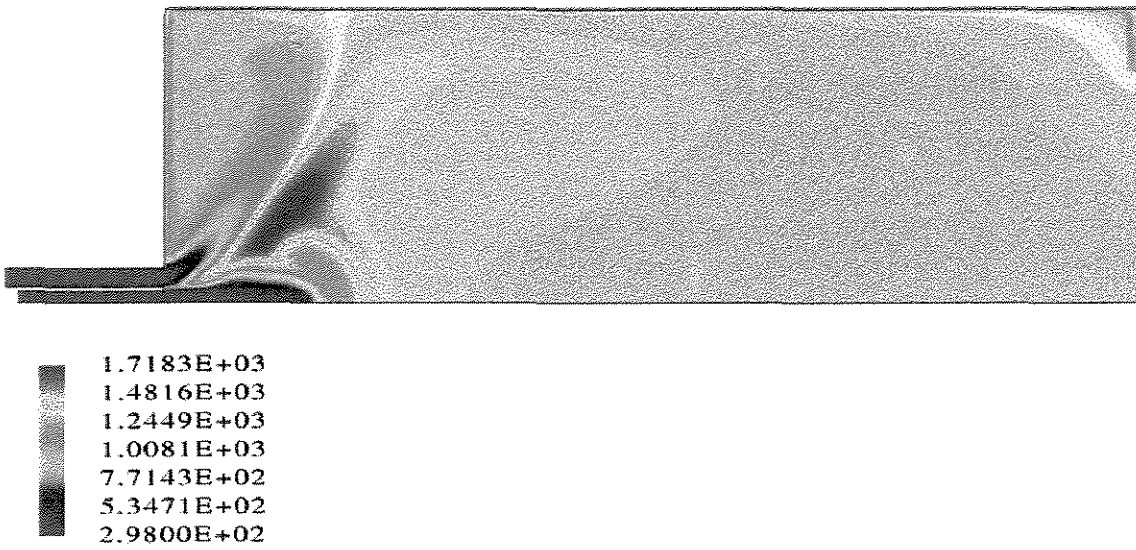


Figura 4.26 : Mapa de Temperatura (K) – Modelo $k-\epsilon$.

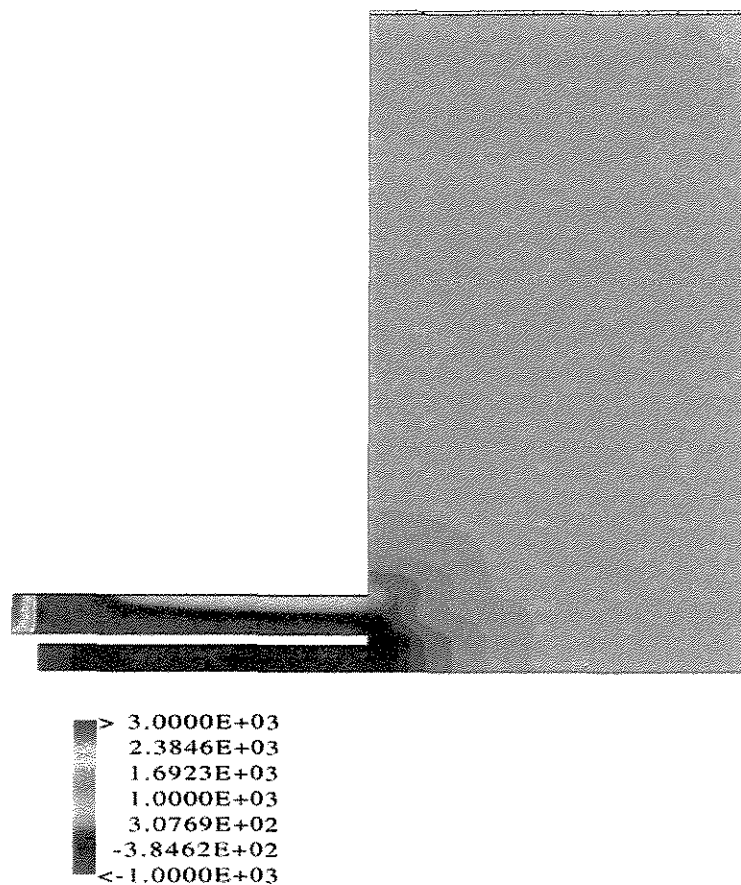


Figura 4.27: Mapa de Pressão (Pa) – Modelo $k-\epsilon$.

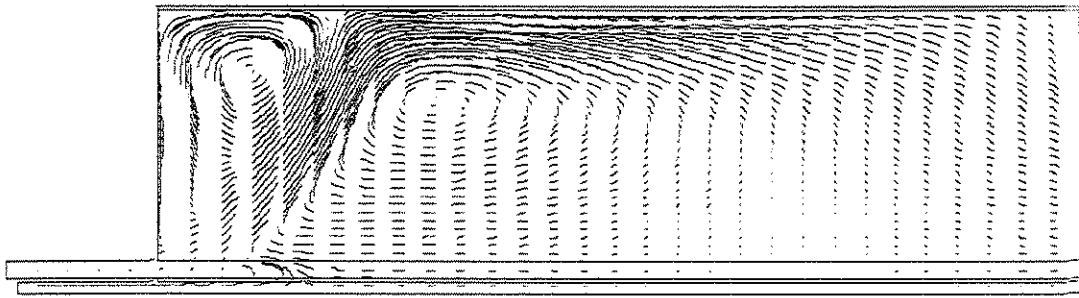


Figura 4.28: Linhas de Corrente – Modelo k - ϵ .

4.2.1.1.1. Perda de Calor pelas Paredes

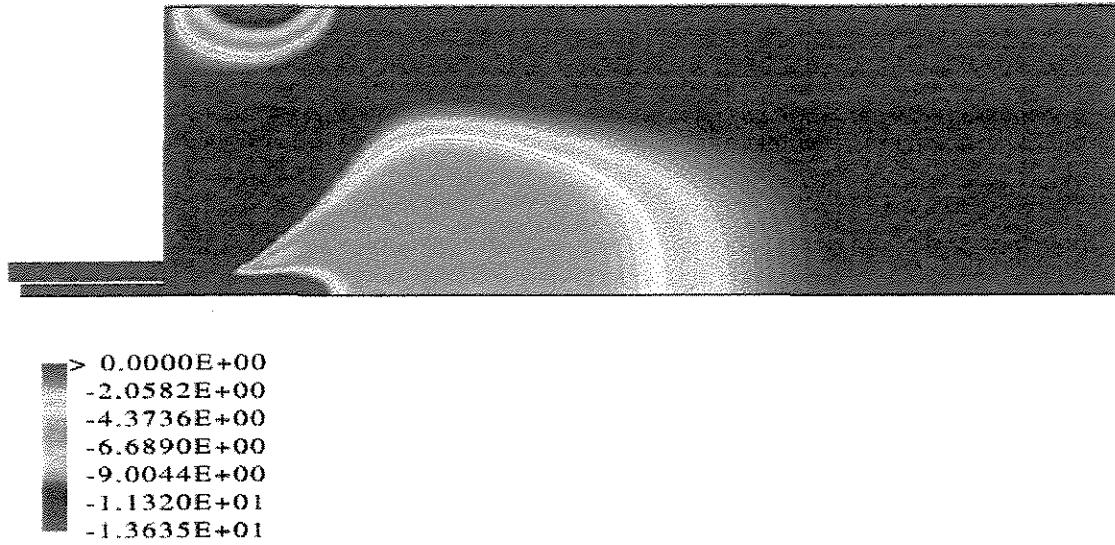


Figura 4.29 : Mapa de Velocidade Axial (m/s) – Modelo k - ϵ .

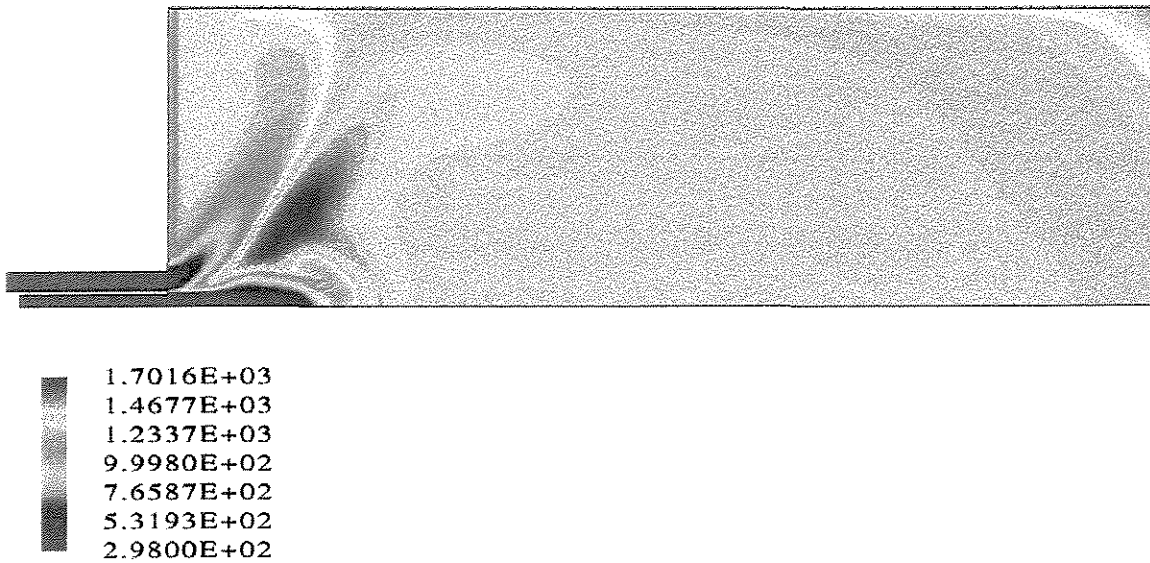


Figura 4.30 : Mapa de Temperatura (K) – Modelo k - ϵ .

4.2.1.1.1.1 Cálculos Radiativos

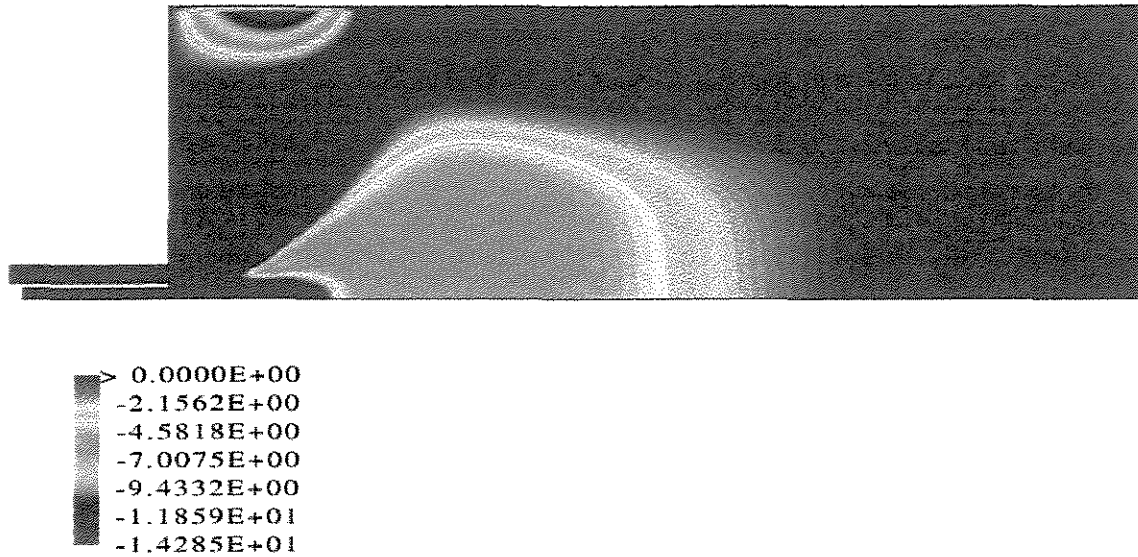


Figura 4.31 : Mapa de Velocidade Axial (m/s) – Modelo k - ϵ .

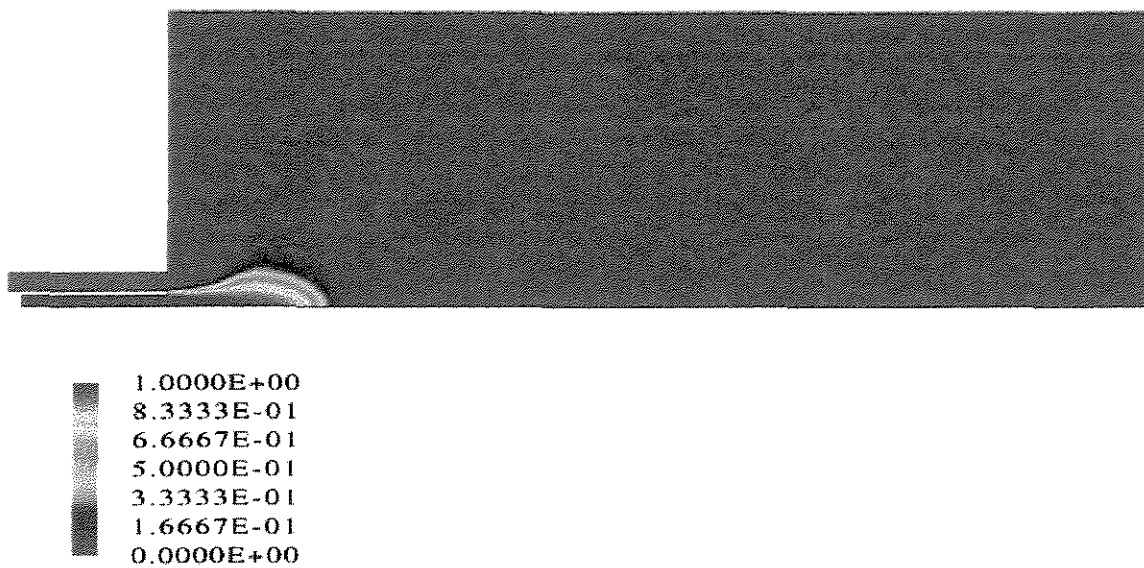


Figura 4.32 : Mapa de Fração Mássica de Combustível – Modelo k - ϵ .

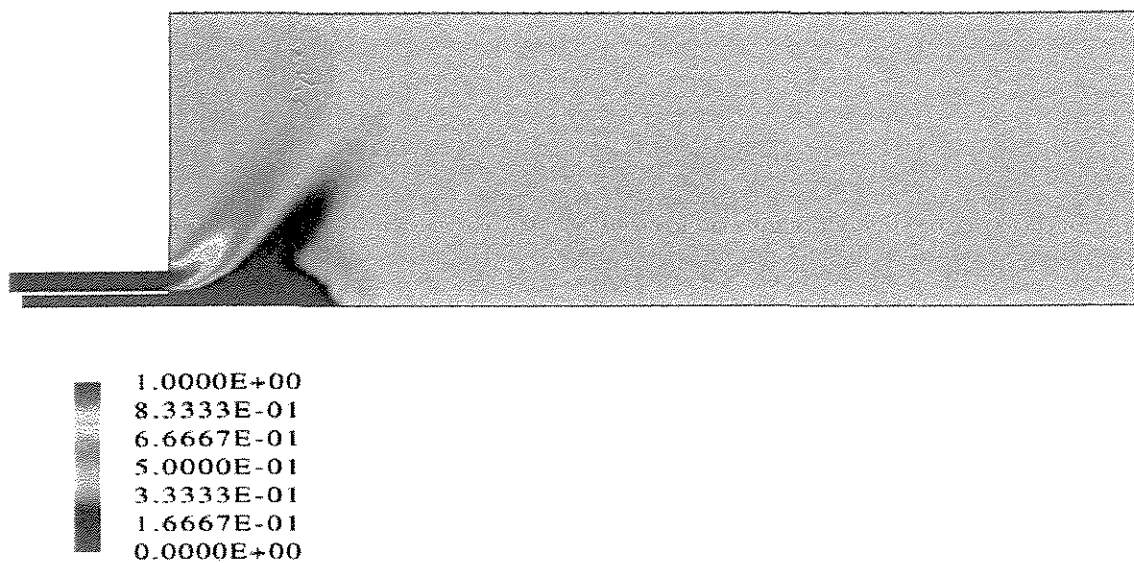


Figura 4.33 : Mapa de Fração Mássica de Oxidante – Modelo $k-\epsilon$.

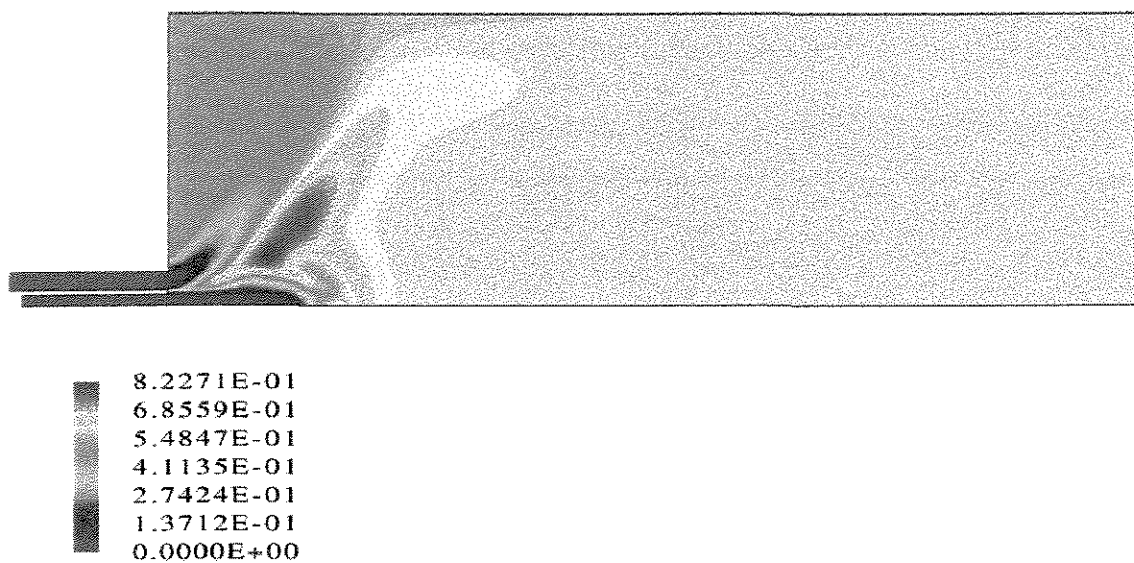


Figura 4.34 : Mapa de Fração Mássica de Produtos – Modelo $k-\epsilon$.

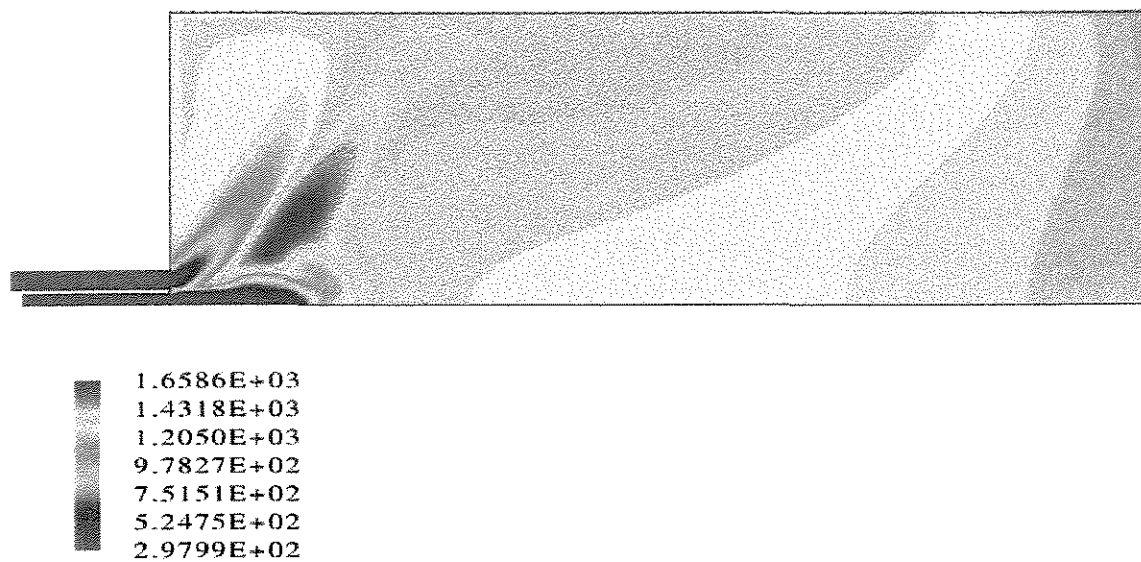


Figura 4.35 : Mapa de Temperatura (K) – Modelo k - ϵ .

4.2.1.1.2. Resíduo de Massa

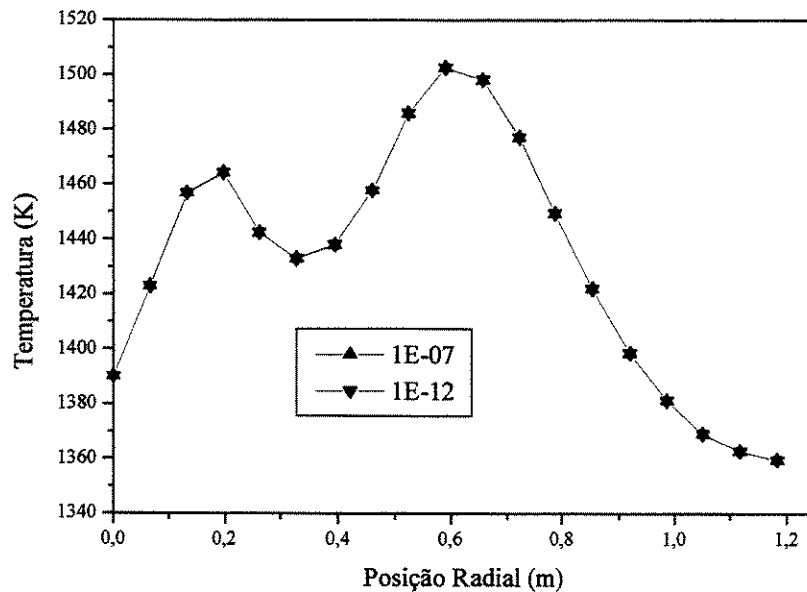


Figura 4.36 : Perfil Radial de Temperatura a 1m do Queimador.

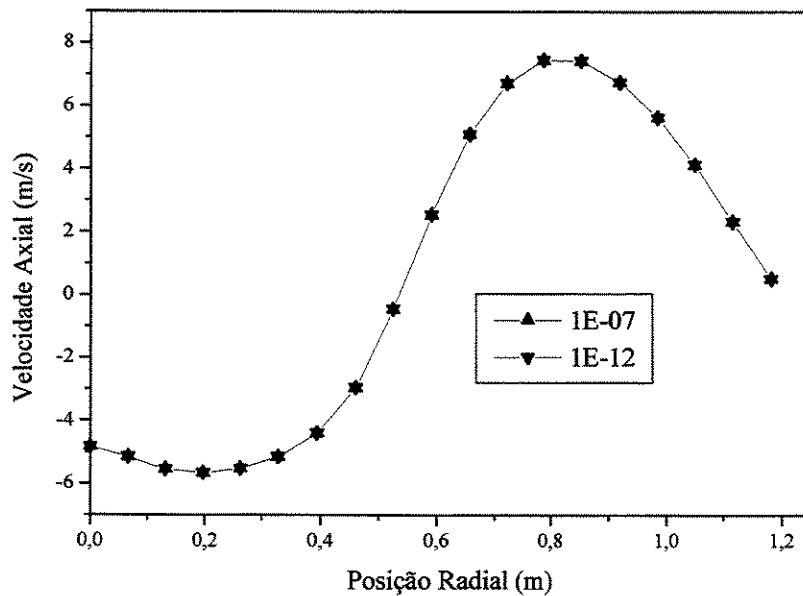


Figura 4.37 : Perfil Radial de Velocidade Axial a 1 m do Queimador.

4.2.1.1.2. Modelo de Combustão Eddy Break-up

4.2.1.1.2.1. Modelo de Fuligem de Magnussen

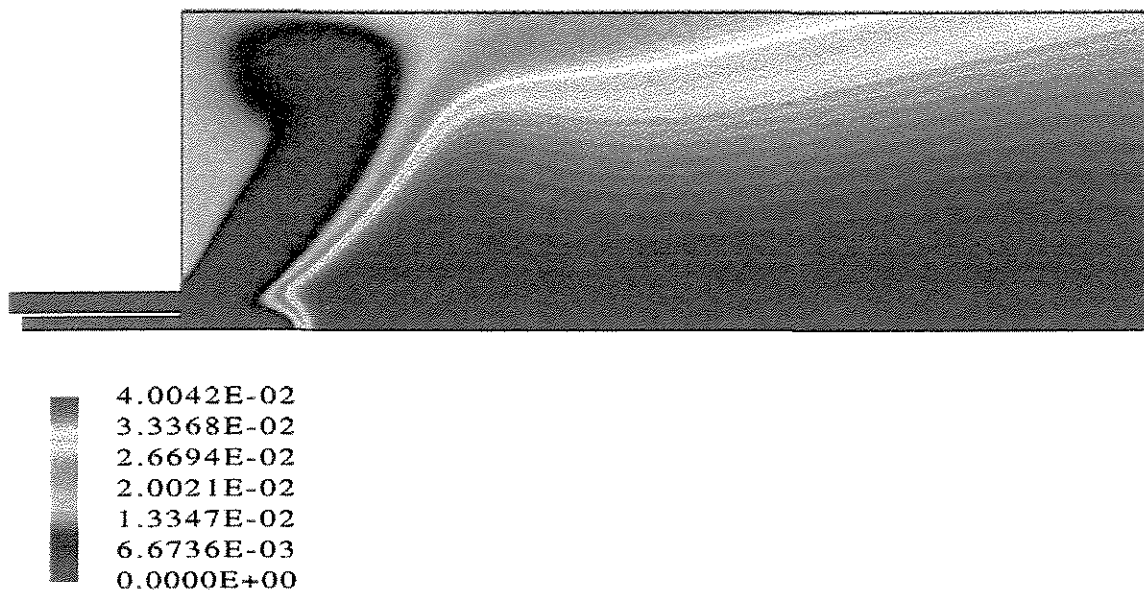


Figura 4.38 : Concentração de Fuligem (kg/kg) – Modelo $k-\epsilon$.

4.2.1.2. Modelo de Turbulência RNG $k-\epsilon$

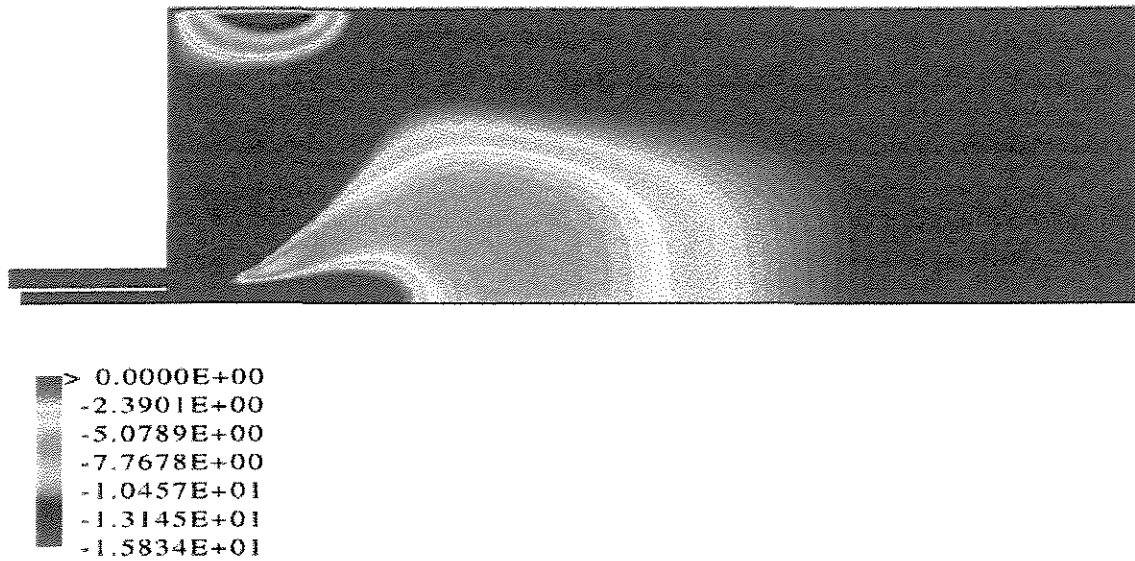


Figura 4.39 : Mapa de Velocidade Axial (m/s) – Modelo RNG $k-\epsilon$.



Figura 4.40 : Mapa de Velocidade Radial (m/s) – Modelo RNG $k-\epsilon$.



Figura 4.41 : Mapa de Fração Mássica de Combustível – Modelo RNG $k-\epsilon$.

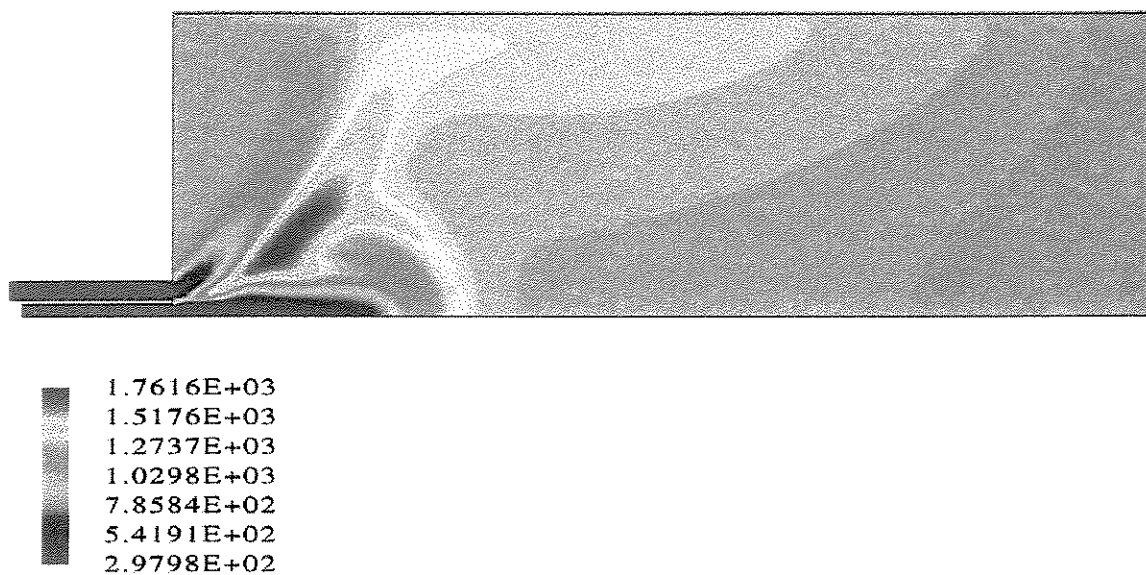


Figura 4.42 : Mapa de Temperatura (K) – Modelo RNG $k-\epsilon$.

4.2.1.2.1. Coeficiente de Absortividade do Gás

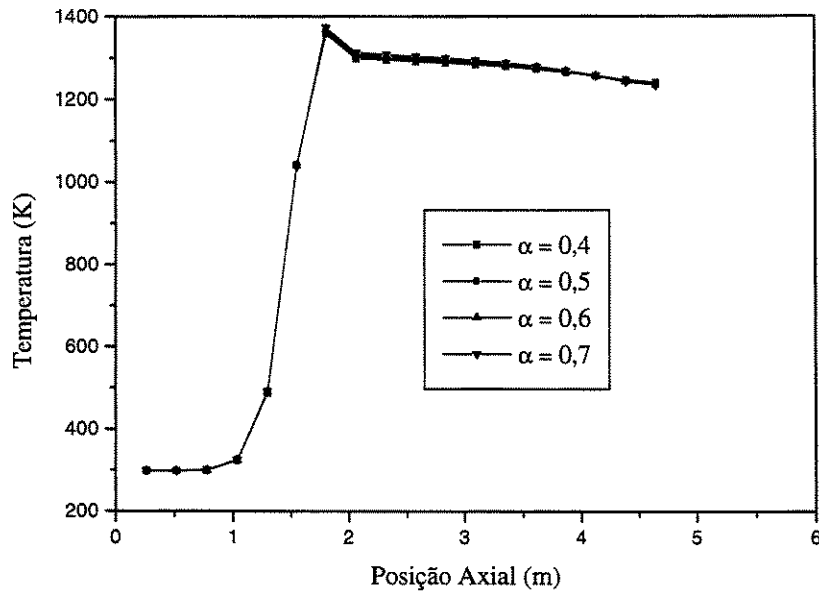


Figura 4.43 : Perfil de Temperatura na Análise Paramétrica da Absortividade do Gás.

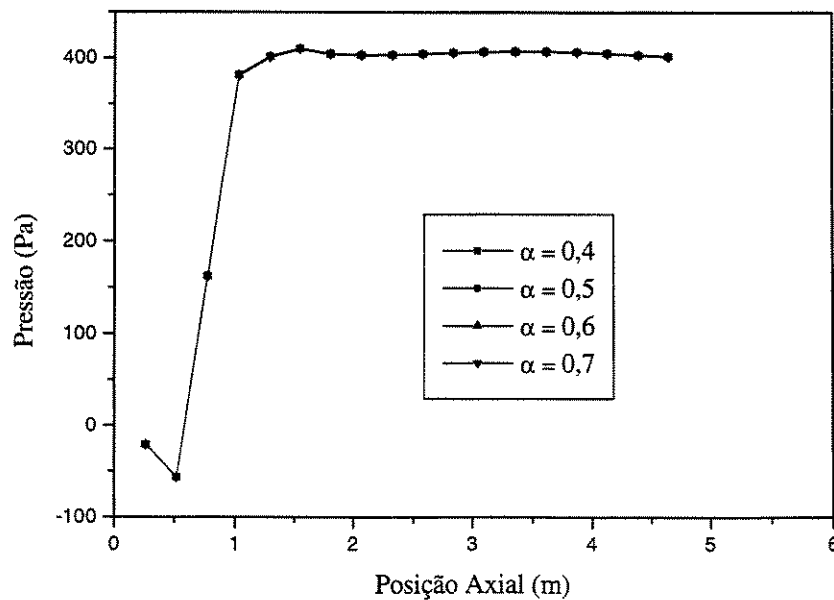


Figura 4.44 : Perfil de Pressão na Análise Paramétrica da Absortividade do Gás.

4.2.1.2.2. Coeficiente de Emissividade das Paredes

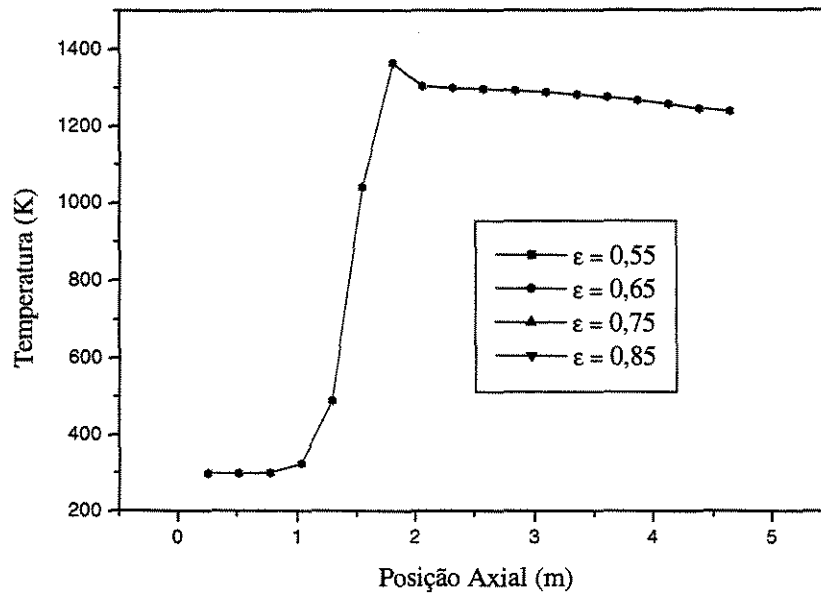


Figura 4.45 : Perfil de Temperatura na Análise Paramétrica da Emissividade das Paredes.

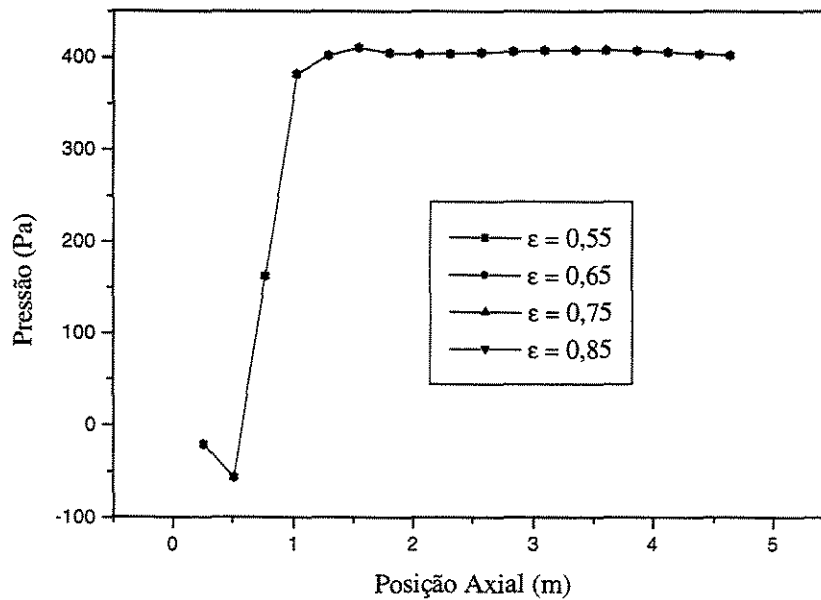


Figura 4.46 : Perfil de Pressão na Análise Paramétrica da Emissividade das Paredes.

4.2.1.3. Modelo de Turbulência dos Tensores Diferenciais

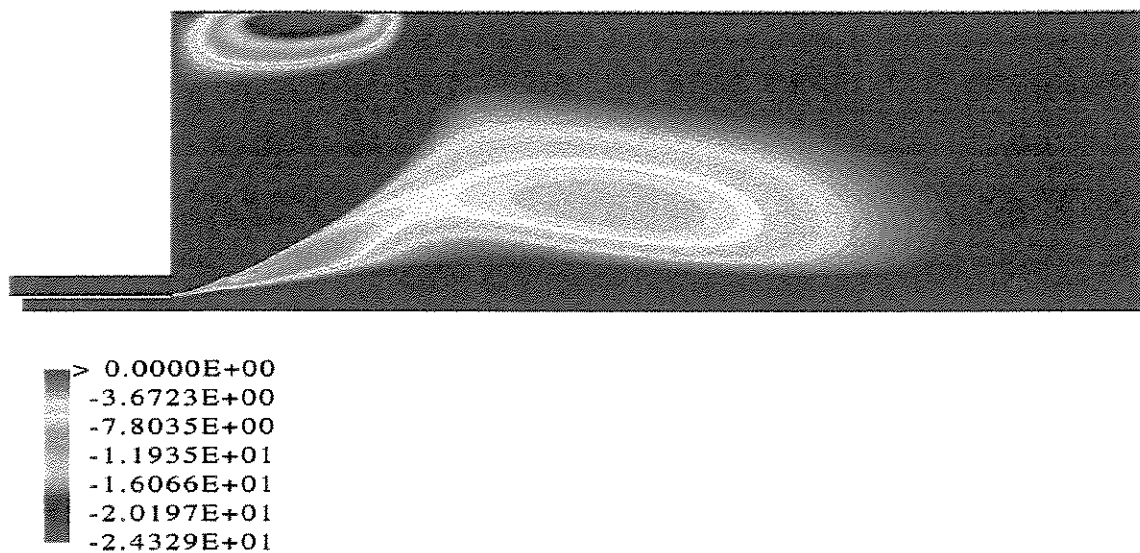


Figura 4.47 : Mapa de Velocidade Axial (m/s) – Modelo dos Tensores de Reynolds.

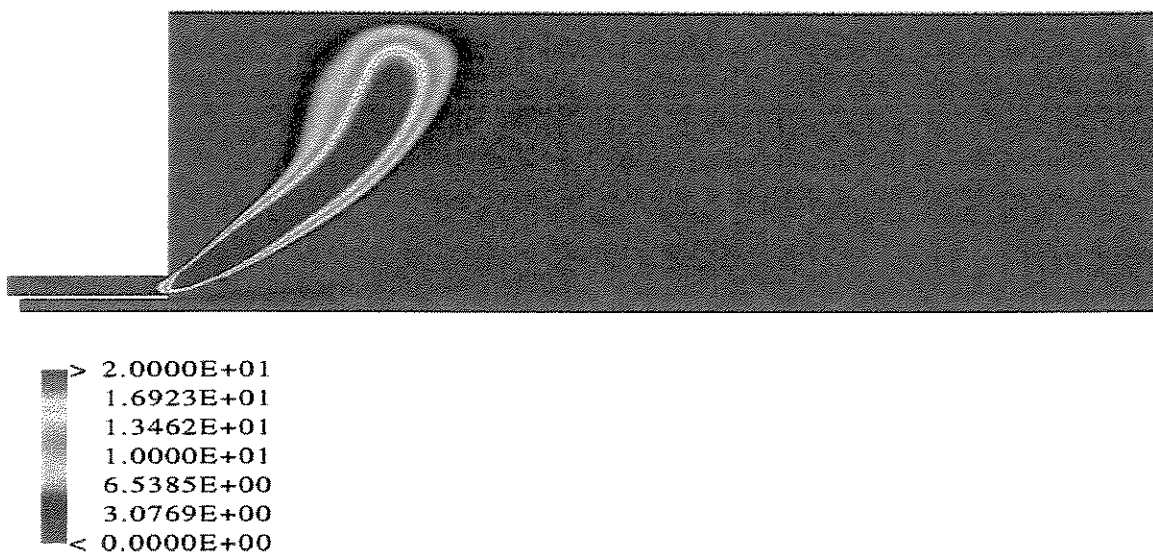


Figura 4.48 : Mapa de Velocidade Radial (m/s) – Modelo dos Tensores de Reynolds.

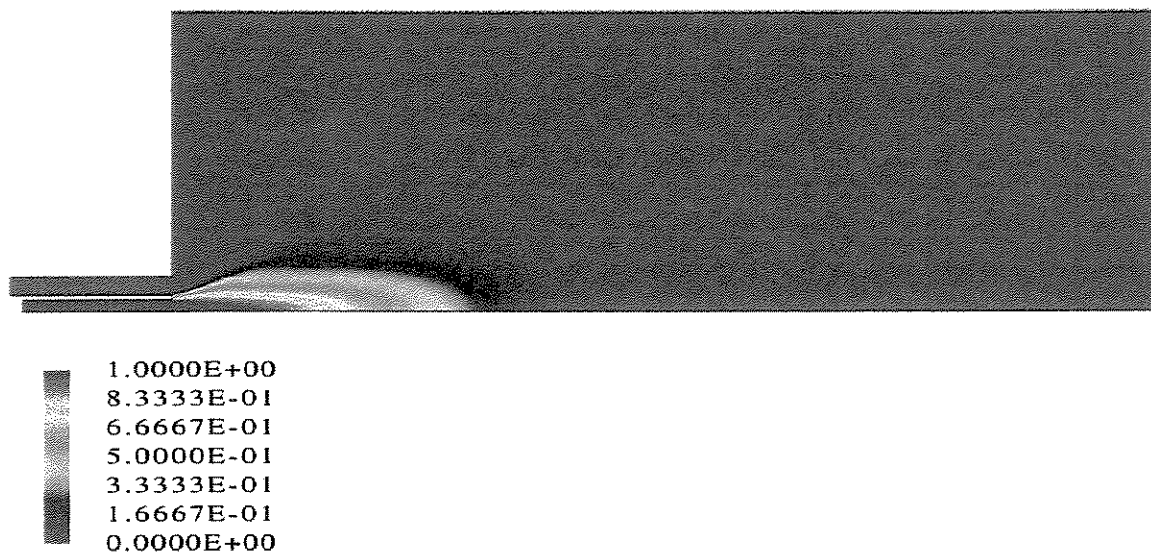


Figura 4.49 : Mapa de Fração Mássica de Combustível – Modelo dos Tensores de Reynolds.

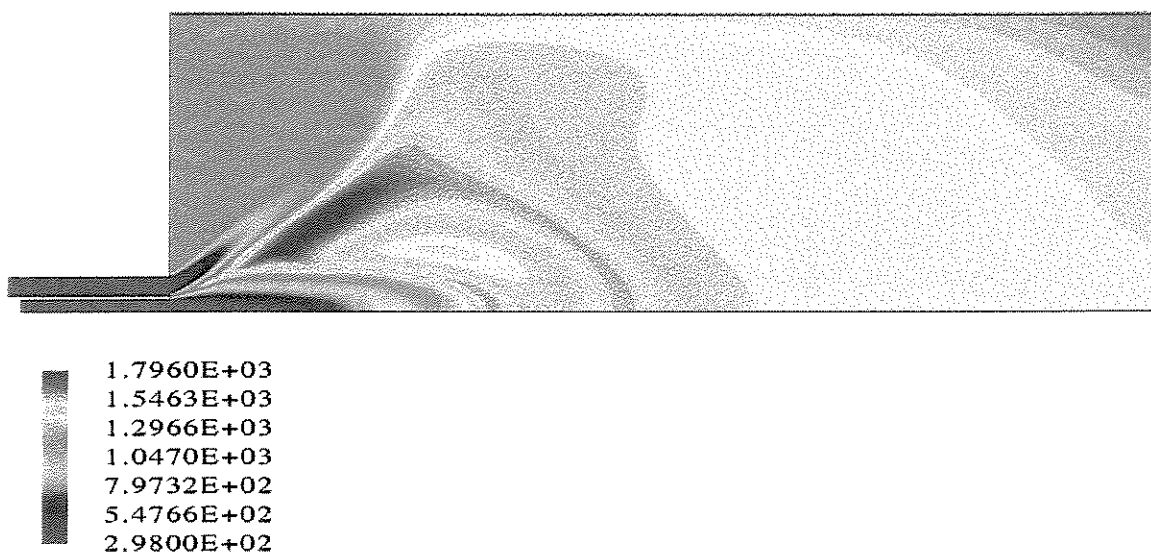


Figura 4.50 : Mapa de Temperatura (K) – Modelo dos Tensores de Reynolds.

4.2.1.4. Comparação entre os modelos $k-\epsilon$ e RNG $k-\epsilon$

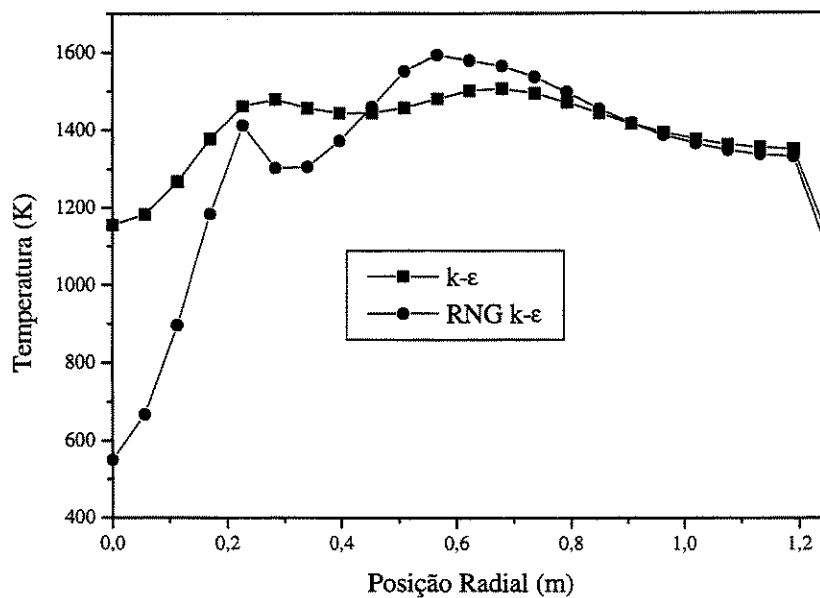


Figura 4.51 : Perfil Radial de Temperatura.

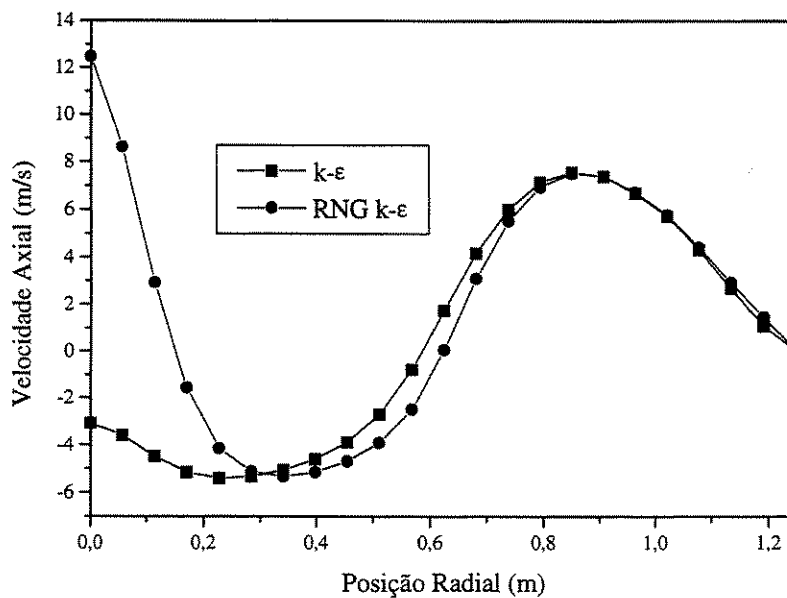


Figura 4.52 : Perfil Radial de Velocidade Axial.

4.2.2. Comprimento de Seis metros

A condição de contorno *mass flow boundaries* implica em um escoamento totalmente desenvolvido na saída, ou seja uma condição de gradiente nulo é aplicada na direção normal ao escoamento. Por este motivo esta condição deve ser inserida longe da região de interesse a fim de se reduzir o impacto desta hipótese simplificadora. Desta forma, o comprimento do forno foi aumentado de quatro para seis metros. Além disso, os fornos normalmente são revestidos com material refratário para evitar a perda de calor para o meio ambiente, assim como a fusão da parede metálica devido às temperaturas elevadas. O calor da combustão dos gases é transferido principalmente por convecção e radiação para a parede interna do refratário, difundindo-se através da região sólida por condução até chegar à parede externa onde é retransmitido para o espaço ambiente. Devido às facilidades do modelo bidimensional, um refratário foi acoplado à sua malha. As simulações a seguir utilizaram o modelo de turbulência $k-\epsilon$, com perdas de calor pela parede externa calculadas através da condição de contorno *Temperature ABC*.

Observando-se os resultados da Figura 4.53 à Figura 4.58, verificou-se que os efeitos observados devido à condição *mass flow boundaries* não foram significativos na região de circulação e nem na de formação do fluxo reverso central, indicando que o comprimento de quatro metros já fornece uma boa representação do sistema. Por outro lado, gradientes de temperatura severos foram observados nos refratários durante a operação (Figura 4.57), indicando que um refratário com condutividade adequada deve ser utilizado para exercer esta função.

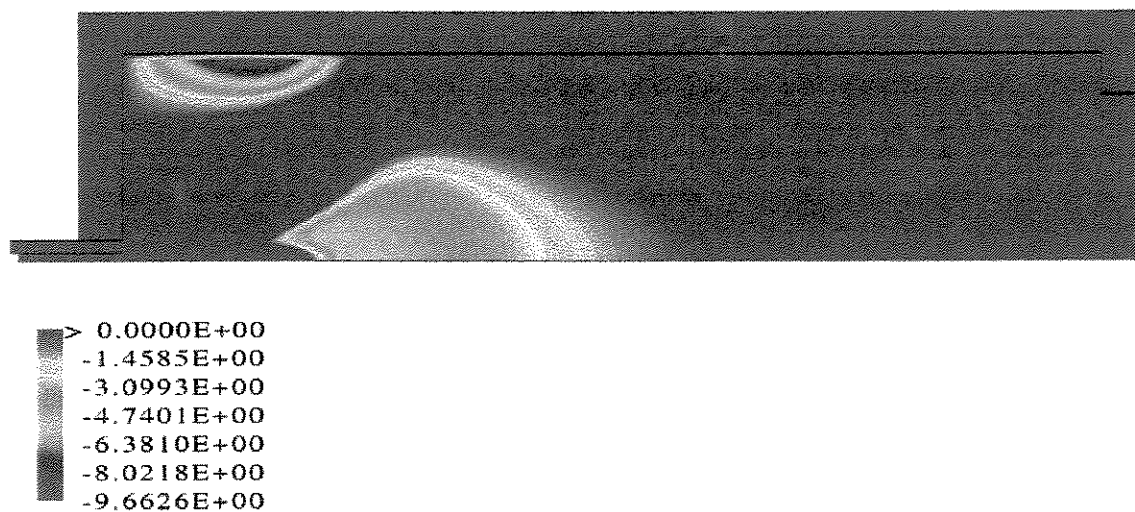


Figura 4.53 : Campo de Velocidades Axiais (m/s) – Modelo $k-\epsilon$.



Figura 4.54 : Campo de Velocidades Radiais (m/s) – Modelo $k-\epsilon$.

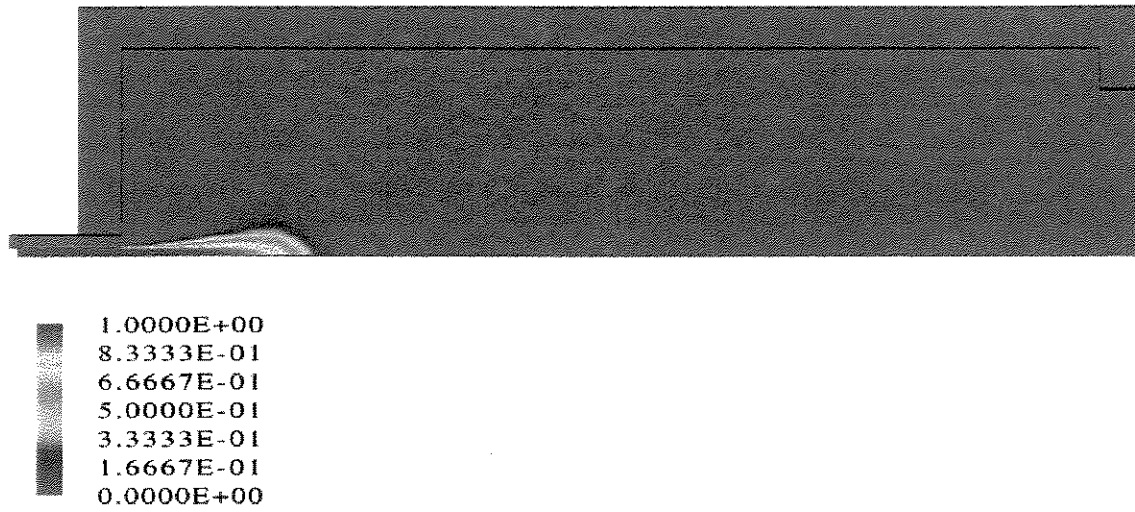


Figura 4.55 : Fração Mássica de Combustível – Modelo $k-\epsilon$.

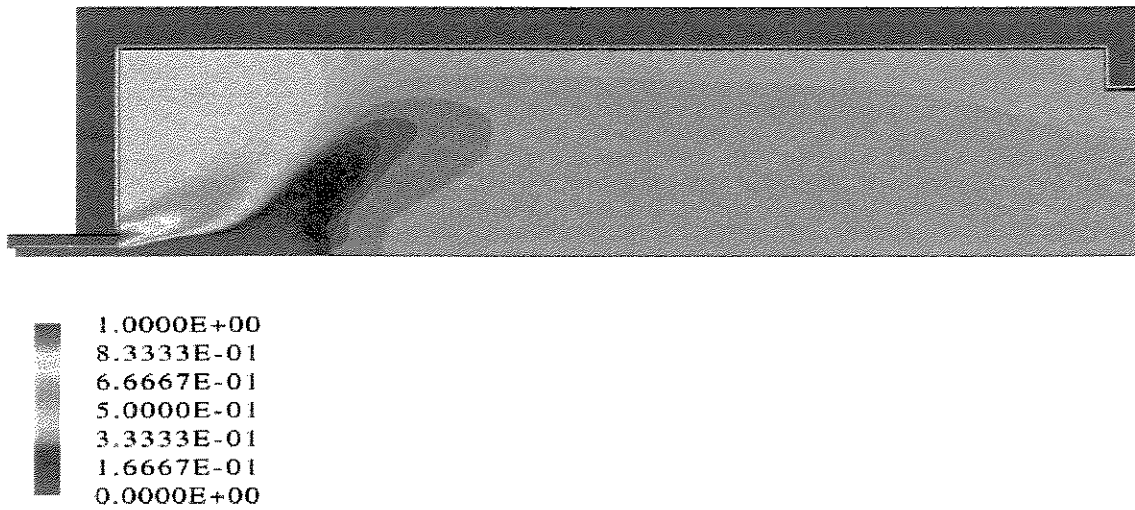


Figura 4.56 : Fração Mássica de Oxidante – Modelo $k-\epsilon$.

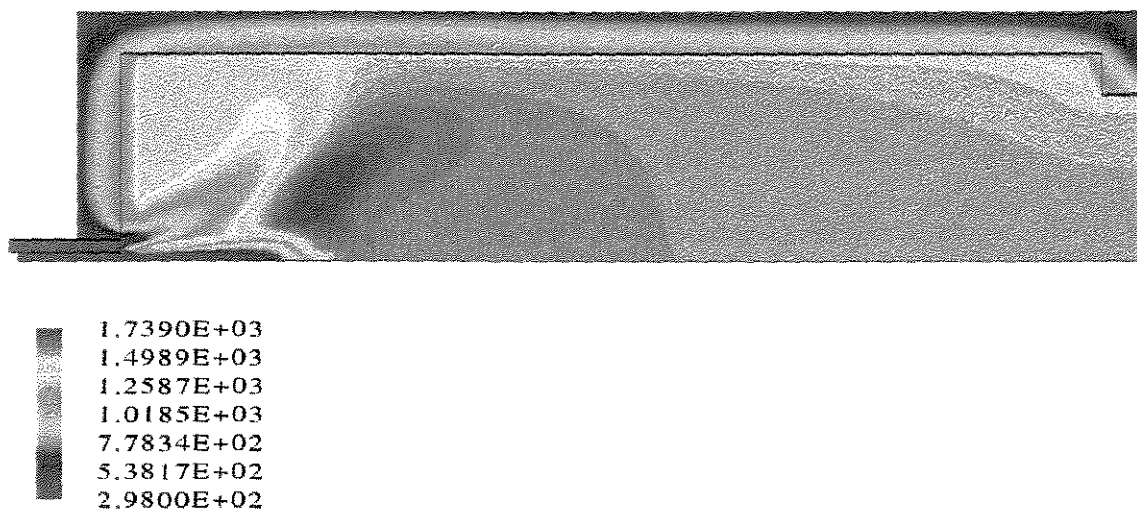


Figura 4.57 : Campo de Temperatura (K) – Modelo k - ϵ .

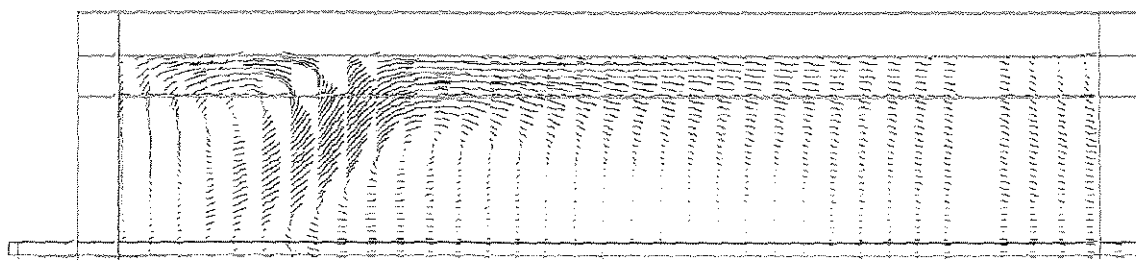


Figura 4.58 : Linhas de Corrente – Modelo k - ϵ .

4.2.2.1. Simulação Com o Método das Seções x CFX

A Figura 4.59 mostra a comparação entre a simulação feita por um programa computacional desenvolvido no trabalho de dissertação de mestrado (Fudihara, 1995), utilizando um modelo simplificado, e a presente simulação no CFX com o perfil de temperatura sendo coletado 0,5 m acima do eixo de simetria. No primeiro caso a simulação foi realizada sem o escoamento da carga sólida e sem a injeção de vapor, num forno de doze metros de comprimento, variáveis estas que fazem parte deste modelo. No segundo, foi utilizado o CFX com a malha de seis metros de comprimento. O diâmetro da câmara, assim como a espessura e a condutividade térmica do refratário, são os mesmos para ambos. Observa-se que apesar da simplicidade do modelo de seções os perfis aproximaram-se bastante. Uma corroboração experimental, entre as temperaturas medidas (da parede externa e do gás na saída) e as obtidas por simulação, foi publicada na ocasião (Fudihara et al., 1996).

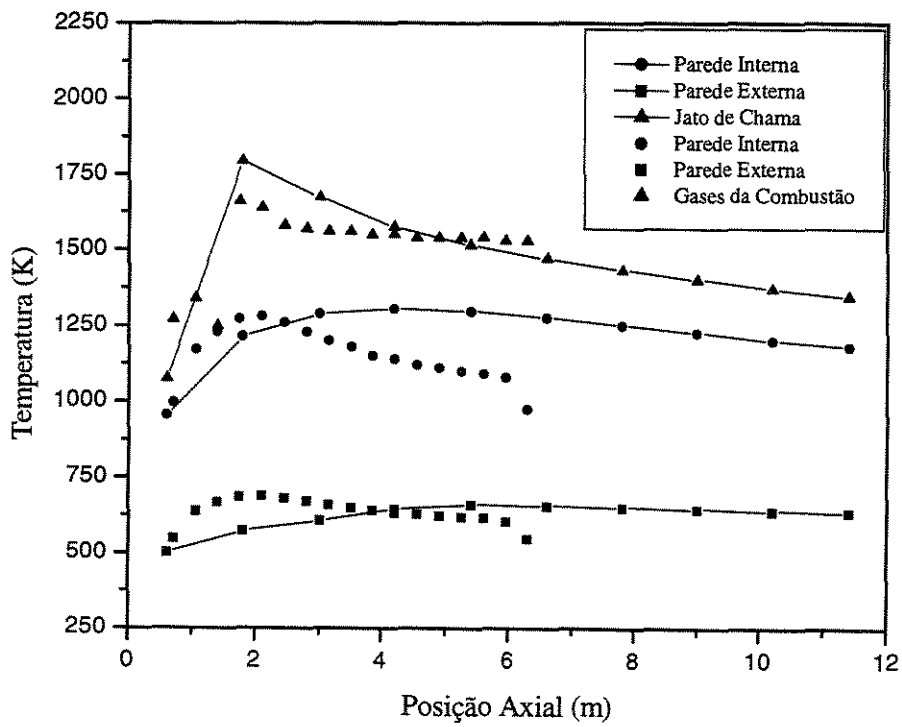


Figura 4.59 : Simulação com o método das seções (pontos conectados por linhas) e simulação através do software CFX (pontos sem conexão).

4.3. BIDIMENSIONAL X TRIDIMENSIONAL

As limitações impostas nas condições de entrada num modelo bidimensional torna-o bastante deficiente. A velocidade radial é calculada de forma simples, sendo a razão entre a vazão e a área anular. Por outro lado, a velocidade tangencial, associada à intensidade de giro, é característica de uma dada configuração geométrica e precisa ser estimada de alguma maneira. Numa primeira aproximação, esta foi calculada como a razão entre a vazão e a área da seção de entrada referente à geometria tridimensional. Uma segunda aproximação utilizou um valor obtido com a simulação tridimensional já realizada anteriormente, sendo que duas posições de coleta das velocidades tangenciais médias foram escolhidas, uma próxima à entrada e outra próxima à saída do maçarico. O projeto escolhido para o maçarico tridimensional foi feito de forma a resultar num escoamento o mais simétrico possível. A disposição das quatro entradas tangenciais sobre o maçarico para a injeção do ar de combustão, distribuída entre os quatro quadrantes do círculo formado pelo duto externo, praticamente eliminou a assimetria.

A partir dessas aproximações, algumas simulações foram realizadas no intuito de se atingir a melhor representação dos campos tridimensionais. Entretanto, os primeiros resultados afastaram-se do esperado. Por fim a velocidade tangencial mais coerente com o esquema tridimensional ficou muito abaixo das primeiras tentativas. Isto sugere que a utilização destas aproximações exige muita cautela, e a reprodução mais fiel das condições reais vai depender da adequação das condições de fronteira.

Somente após esta etapa, prosseguiu-se com a inclusão do modelo de combustão no esquema bidimensional e o comportamento dos fluxos aproximou-se bastante do tridimensional. As figuras tridimensionais (Figura 4.1 à Figura 4.17) e as bidimensionais (Figura 4.18 à Figura 4.28) foram simuladas em condições idênticas, com a inclusão do fenômeno da combustão turbulenta e fluxo compressível, através dos modelos de turbulência $k-\epsilon$ e de combustão *mixed-is-burnt*, onde uma função densidade de probabilidade do tipo duplo delta para o cálculo da fração de mistura média e da variância da fração de mistura é usada para resolver os escalares média-temporais da fração mássica dos gases de combustão.

Comparando-se os mapas das variáveis tridimensionais com as bidimensionais, da velocidade axial no sentido negativo (Figura 4.1 e Figura 4.18), da velocidade axial no sentido

positivo (Figura 4.3 e Figura 4.19), da velocidade radial no sentido positivo (Figura 4.6 e Figura 4.20), da fração mássica de combustível (Figura 4.8 e Figura 4.22), da fração mássica de oxidante (Figura 4.9 e Figura 4.23) e da temperatura (Figura 4.10 e Figura 4.26), as mesmas apresentam semelhanças razoáveis. O fluxo reverso central ocorreu em ambos os casos de forma semelhante como pode ser observado na Figura 4.1 e Figura 4.18. A circulação de fluxo, próxima à parede da câmara de combustão, pode ser observadas nas Figura 4.16 assim como através das linhas de corrente na Figura 4.28. A aproximação bidimensional mostrou-se portanto razoável.

Todo o consumo de combustível ocorreu praticamente logo na saída do maçarico ao redor do eixo central. Como pôde ser observado, o pico de temperatura ocorre numa posição excêntrica numa região fora do eixo longitudinal, sendo que, através de visualização no espaço tridimensional a chama ocupa uma região anular. A diferença entre os picos de temperatura e a distribuição da fração mássica entre as duas dimensões deve-se em grande parte às aproximações das condições de contorno no caso bidimensional, principalmente pela estimativa da velocidade tangencial na entrada.

4.4. INCERTEZAS NAS CORROBORAÇÕES EXPERIMENTAIS

As idealizações simplificadoras, em maior ou menor grau, aplicadas na simulação da fluido-dinâmica computacional são quase sempre indispensáveis na obtenção de resultados práticos aplicáveis e sem as quais não haveriam condições viáveis, seja pelo tempo de processamento proibitivo, seja pelas limitações dos processadores. Analisando-se os modelos matemáticos, os quais se espelham em situações físicas reais, verifica-se que ficaram sujeitos a várias simplificações para que fossem solucionados. A aplicação das médias-temporais às equações de transporte de onde origina-se a hipótese da viscosidade turbulenta ou, dentro dos escoamentos multi-fásicos eulerianos, a aproximação das partículas como uma segunda fase com os atributos de um meio contínuo, são alguns exemplos.

Num processo de validação destes modelos matemáticos simplificados aceita-se normalmente que, quando os valores simulados e os medidos experimentalmente estiverem suficientemente próximos, seja o bastante para a sua corroboração. Não raro as constantes dos modelos são obtidas a partir destas medidas experimentais. Nestes casos o escoamento já seria suficientemente conhecido. No caso onde isto não acontece, e os modelos são colocados à prova numa situação não usual, o problema torna-se mais complexo. Erros de leitura da instrumentação ou de painel não podem ser descartados nesta validação, principalmente em se tratando de medidas intrusivas.

Entretanto, analisando-se mais minuciosamente todas as fontes destes desvios, uma constatação importante que se faz é que mesmo num estado hipotético de uma existência de aferições perfeitas, não se deveria atribuir somente ao modelo matemático toda a fonte de incoerência. Analisando-se mais detidamente a questão, chega-se a uma outra causa de incerteza, cujas pistas passaram a ser fornecidas pelas próprias simulações. Trata-se da exatidão das figuras geométricas que buscam reproduzir um projeto real. Geralmente atribui-se grande importância à representação geométrica a mais fiel possível do objeto a ser simulado. Entretanto, seus acessórios que lhe estão adjacentes tais como as contrações, expansões, curvas, barreiras, desvios, entre outros e que normalmente ficam na periferia, portanto fazendo parte das condições de contorno, não raramente são desprezados nas figuras. E nestes casos, as condições de fronteira são muitas vezes aproximadas por situações totalmente fictícias. Muitas vezes isto acontece devido à dificuldade em se obter valores experimentais nestas

regiões. Além disso, um aumento na complexidade da malha poderia também representar um aumento exagerado no número de células e de equações, se incluídos estes acessórios.

Mas uma nova questão surge: em que extensão estas condições de fronteira irreais irão alterar o perfil do escoamento? Se fosse constatado que seria de forma significativa, questiona-se se numa situação de diferença expressiva entre os resultados simulados e os valores experimentais, estaríamos diante de uma falha devido apenas ao modelo matemático. Modificações significativas do escoamento foram observadas na simulação bifásica num tubo vertical (Fudihara et al, 1998) após a introdução de uma curva na entrada, ocasionando uma dupla circulação transversal ao escoamento, fato que já foi observado experimentalmente. Neste caso, com o escoamento de partículas, já no início de seu percurso estas foram arremessadas contra a parede, o que não ocorreria com uma entrada reta. Também, durante a realização do estudo das formas geométricas do ciclone (Fudihara et al, 1999), a proximidade de uma expansão na fronteira gerou um efeito fluido-dinâmico intenso, com regiões de circulação através do duto de entrada. Isto fez com que a área efetiva para o escoamento na entrada fosse bem menor que a área física, pois parte desta área ficou ocupada por esta circulação, modificando bastante os perfis. Se estendermos estes efeitos a outras simulações, realizadas com o intuito de serem corroboradas por experimentos, e cuja malha não incluía estes acessórios adjacentes, conclui-se que existe grande probabilidade de estarem sendo subestimados estes efeitos. Isto principalmente devido à utilização de condições irreais para as fronteiras, como por exemplo a que comumente se utiliza, que é o de um perfil uniforme na entrada. Essa última suposição constitui uma condição ao que tudo indica muito longe de uma aproximação razoável de uma situação concreta. Assim, a exclusão dos acessórios resulta na maioria das vezes na obtenção de simulações incoerentes, induzidos por estes ajustes para a fronteira. Além disso, na etapa de corroboração com as medidas experimentais, as comparações poderão estar coincidindo com os pontos de maior atuação destes acessórios, chegando-se desta forma a conclusões deveras equivocadas.

5. CONCLUSÕES E SUGESTÕES

As principais características do fenômeno da combustão, num forno aquecido diretamente por um jato de chama produzido por um maçarico, foram reproduzidas nesta investigação computacional, através do método dos volumes finitos com variáveis localizadas, coordenadas generalizadas e a técnica dos multi-blocos. O projeto geométrico tanto da câmara e principalmente do maçarico foram fundamentais na definição das características de todos os processos envolvidos.

A grande diferença entre as dimensões do maçarico e da câmara solicitou uma malha refinada para a câmara, principalmente para os blocos de junção entre ambos. A complexidade do maçarico com dois percursos concêntricos e isolados, o interno para o combustível e o anular para o ar, exigiu um número elevado de blocos para a sua construção.

A alta velocidade tangencial do ar no interior do maçarico e a formação do jato no interior da câmara produziram um escoamento em vórtice complexo, como pôde ser observado nos diagramas computacionais. O tipo de maçarico utilizado produziu um escoamento praticamente simétrico, sem nenhum centro de vórtice secundário como o observado com entradas não simétricas. Observou-se também o característico fluxo reverso central, onde o fluxo retorna pelo centro e colide com o jato. Esta região de reversão de fluxo caracterizou-se por uma mistura intensa entre os reagentes e os produtos da combustão aquecidos, sendo que longe desta região o escoamento passou para um regime aproximadamente pistonado a baixas velocidades, mas os vórtices mantiveram-se ao longo de todo o forno. Circundando a região de reversão de fluxo e confinadas entre as paredes, as circulações mostraram-se intensas e complexas, as quais também foram observadas em trabalhos experimentais.

Métodos de solução de equações mais simples apresentaram-se muitas vezes mais estáveis que os métodos mais elaborados, assim como os esquemas de interpolação de primeira ordem. Após a inserção dos modelo de combustão, apenas passos de tempo extremamente reduzidos para o falso transiente asseguraram a convergência numérica. O modelo de turbulência anisotrópico dos tensores de Reynolds exigiu um esforço computacional desproporcional em comparação com os modelos derivados da hipótese da viscosidade

turbulenta. O jato de combustível apresentou uma influência marcante na estabilidade aerodinâmica do sistema.

Observou-se também que, através das próprias simulações, as simplificações inadvertidas tanto da figura geométrica quanto da definição das condições de fronteira podem comprometer profundamente a busca de uma análise mais rigorosa não apenas da fluidodinâmica dos fornos, mas dos fenômenos que ocorrem nos equipamentos industriais em geral.

SUGESTÕES PARA OS PRÓXIMOS TRABALHOS

Abordagens numéricas: realização de novas simulações comparativas utilizando outros esquemas de interpolação, como os esquemas de alta ordem *higher-order upwind*, *muscl*, *quick* e *ccct*, todos já presentes no CFX; implementação de outros algoritmos de acoplamento pressão-velocidade; estudo da influência das variáveis pertencentes às funções de parede, utilizadas como condição de contorno para escoamentos turbulentos.

Abordagens operacionais: testes com outras composições de combustíveis gasosos; realização de modificações nos modelos que permitam a injeção com pré-mistura de reagentes no maçarico, talvez utilizando modelos de combustão que calculam a taxa de geração de energia diretamente da taxa cinética da reação de combustão; aplicação de modelos multi-fásicos ou de transporte de partículas para o cálculo da combustão de combustíveis líquidos ou sólidos pulverizados; tratamento da equação do momento com a inclusão dos efeitos da convecção natural, e por conseguinte, dos efeitos regenerativos da parede na transferência de calor, principalmente no caso dos fornos rotativos.

Abordagens de projeto: modificações no projeto do maçarico atual ou introdução de outros tipos de maçaricos, analisando-se principalmente os efeitos sobre o fluxo reverso central e sobre a estabilidade do escoamento; otimização do formato da câmara, principalmente na região de grande circulação.

Abordagens ambientais: avaliação da taxa de formação de NO_x , o qual constitui-se num poluente de grande impacto ambiental; estudo da conversão de resíduos considerados tóxicos, tratados com frequência neste tipo de forno.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- 1 ANAND, M. S.; HSU, A. T. & POPE, S. B. - Calculations of Swirl Combustors Using Joint Velocity-Scalar Probability Density Function Method. *ALAA Journal* **35(7)**: 1143-1150 1997.
- 2 BARREIROS, A.; CARVALHO, M. G.; COSTA, M. & LOCKWOOD, F. C. - Prediction of the Near Burner Region and Measurements of NO_x and Particulate Emissions in Heavy Fuel Oil Spray Flames. *Combustion and Flame* **92**: 231-240, 1993.
- 3 BEÉR, J. M. & CHIGIER, N. A. - *Combustion Aerodynamics*. Applied Science Publishers Ltd, 1972. 264p.
- 4 BIRD, R. B.; STEWART, W. E. & LIGHTFOOT, E. N. - *Transport Phenomena*. John Wiley & Sons, 1960. 780 p.
- 5 BRUNNER, C. R. - *Incineration Systems*. Incinerator Consultants Incorporated, 1984. 417p.
- 6 CHEN, C.; RILEY, J. J. & McMURTRY, P. A. - A Study of Favre Averaging in Turbulent Flows with Chemical Reaction. *Combustion and Flame* **87**: 257-277, 1991.
- 7 CHOI, C. E. & BAEK, S. W. - Numerical Analysis of a Spray Combustion with Nongray Radiation Using Weighted Sum of Gray Gases Model. *Combustion Science and Technology* **115**: 297-315, 1996.
- 8 CHOMIAK, J. - *Combustion, a Study in Theory, Fact and Application*. Abacus Press, 1990. 464p.
- 9 COIMBRA, C. F. M.; AZAVEDO, J. L. T. & CARVALHO, M. G. - 3-D Numerical Model for Predicting NO_x Emissions from an Industrial Pulverized Coal Combustor. *Fuel* **73(7)**: 1128-1134, 1994.
- 10 CORREA, S. M. & SHYY, W. - Computational Models and Methods for Continuous Gaseous Turbulent Combustion. *Progress in Energy and Combustion Science* **13**: 249-292, 1987.
- 11 COSTA, M.; COSTEN, P. & LOCKWOOD, F. C. - Detailed Measurements in a Heavy Fuel Oil-Fired Large-Scale Furnace. *Combustion Science and Technology* **77**: 1-26, 1991.

- 12 COSTA, M.; COSTEN, P. & LOCKWOOD, F. C. - Combustion Measurements in a Heavy Fuel Oil-Fired Furnace. *Combustion Science and Technology* **75**: 129-154, 1991.
- 13 DUKOWICZ, J. K. & RAMSHAW, J. D. - Tensor Viscosity Method for Convection in Numerical Fluid Dynamics. *Journal of Computational Physics* **32**: 71-79, 1979.
- 14 FALLOT, L.; GONZALEZ, M.; ELAMRAOUI, R. & OBOUNOU, M. - Modelling Finite-Rate Chemistry Effects in Nonpremixed Turbulent Combustion: Test on the Bluff-Body Stabilized Flame. *Combustion and Flame* **110**: 298-318, 1997.
- 15 FAN, W. - *Computer Modelling of Combustion Processes*. International Academic Publishers, 1991. 219p.
- 16 FICK, W.; SYRED, N.; GRIFFITHS, A.J. & O'DOHERTY, T. - Phase-averaged Temperature Characterization in Swirl Burners. *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers A: Journal of Power and Energy* **210(5)**: 383-395, 1996.
- 17 FIVELAND, W. A. & WESSEL, R. A. - A Model for Predicting Formation and Reduction of NO_x in Three-Dimensional Furnaces Burning Pulverized Fuel. *Journal of the Institute of Energy* **64**: 41-54, 1991.
- 18 FUCHS, A. & LEWIN, D. R. - Modelling, Simulation and Control of a Crude Oil Preheating Furnace. *Chemical Engineering Science* **48**: 661-679, 1993.
- 19 FUDIHARA, T. J.; MORI, M.; LAURITO, J. & SPITZNER Jr., R. - Modelagem de um Incinerador Tipo Forno Rotativo de Aquecimento Direto. *XXII Encontro sobre Escoamento em Meios Porosos*, Florianópolis, SC, 1994.
- 20 FUDIHARA, T. J. - *Modelagem e Simulação de um Forno Rotativo em Regime Permanente*. São Paulo: Universidade Estadual de Campinas, 1995. 171p. Dissertação (Mestrado).
- 21 FUDIHARA, T. J.; MORI, M.; LAURITO, J. & SPITZNER Jr., R. - Perfis Axiais de Temperatura e Análises de Sensitividade Paramétrica em um Incinerador Tipo Forno Rotativo. *Revista de Ciência e Tecnologia* **5/2(10)**: 29-46, 1996.
- 22 FUDIHARA, T. J.; ALVES, J. J. N.; MARTIGNONI, W. & MORI, M. - Aplicação do Código CFX-F3D na Simulação Tridimensional do Escoamento Gás-Sólido Diluído em

- Tubos Verticais. *XII Congresso Brasileiro de Engenharia Química*, 14-17 Setembro, Porto Alegre, Brasil, 1998.
- 23 FUDIHARA, T. J. & MORI, M. - Simulação Matemática Tridimensional de um Forno com Entrada de Ar em Vórtice. *XV Congresso Brasileiro de Engenharia Mecânica*, 22-26 Novembro, Águas de Lindóia, São Paulo, Brasil, 1999.
- 24 FUDIHARA, T. J.; MEIER, H. F.; MARTIGNONI, W. P. & MORI, M. - Modelagem e Simulação 3-D de um Escoamento Gasoso em um Ciclone: uma Avaliação dos Efeitos Geométricos. *XV Congresso Brasileiro de Engenharia Mecânica*, 22-26 Novembro, Águas de Lindóia, São Paulo, Brasil, 1999.
- 25 FUDIHARA, T. J. & MORI, M. - Three-Dimensional Numerical Simulation of a Furnace with a Swirling Flow. *European Symposium on Computer Aided Process Engineering-10*, 7-10 Maio, Florença, Itália, 2000.
- 26 GARDE, R. J. - *Turbulent Flow*. John Wiley & Sons Inc, New Delhi, India. 1994. 287p.
- 27 GAYDON, A. G. & WOLFARD, H. G. - *Flames, Their Structure, Radiation and Temperature*. Chapman and Hall Ltd, 1970. 401p.
- 28 Guia do Usuário do CFX versão 4.2 - *AEA Technology*, 1997.
- 29 HAYNES, B. S. & WAGNER, H. G. - Soot Formation. *Progress in Energy and Combustion Science* 7: 229-273, 1981.
- 30 HOFFMANN, S.; HABISREUTHER, B. & LENZE, B. - Development and Assessment of Correlations for Predicting Stability Limits of Swirling Flames. *Chemical Engineering and Processing* 33(5): 393-400, 1994.
- 31 HOLMAN, J. P. - *Transferência de Calor*. McGraw-Hill do Brasil, 1983.
- 32 HONNERY, D. R. & KENT, J. H. - Furnace Flow Modelling: Physical and Computational. *Journal of the Institute of Energy* : 169-177, 1989.
- 33 HOTTEL, H. C. & SAROFIM, A. F. - *Radiative Transfer*. McGraw-Hill Book Company, 1967. 520p.

- 34 ISSA, R. I. - Solution of the Implicitly Discretised Fluid Flow Equations by Operator Splitting. *Journal of Computational Physics* **62**: 40-65, 1986.
- 35 ISSA, R. I.; GOSMAN, A. D. & WATKINS, A. P. - The Computation of Compressible and Incompressible Recirculating Flows by a Non-Iterative Implicit Scheme. *Journal of Computational Physics* **62**: 66-82, 1986.
- 36 KENBAR, A.M.A.; BELTAGUI, S. A. & MACCALLUM, N.R.L.- Combustion Aerodynamics of a Gas-Fired Furnace with Peripheral Fuel Injection. *Experimental Thermal and Fluid Science* **10(3)**: 335-346, 1995.
- 37 KHALIL, E. E. - Numerical Computations of Turbulent Reacting Combustor Flows. *Numerical Methods in Heat Transfer* **23**: 489-509, 1981.
- 38 KHALIL, E. E. - *Modelling of Furnaces and Combustors*. Abacus Press, 1982. 260p.
- 39 KIM, C.-J. & RO, S. T. - A Block Correction-Aided, Strongly Implicit Procedure to Treat Simultaneous Linear Equations Arising from Implicit Discretization of Three-Dimensional Field Equations. *Numerical Heat Transfer B* **28**: 371-384, 1995.
- 40 KUMAR, S. & TAMARU, T. - Computation of Turbulent Reacting Flow in a Jet Assisted Ram Combustor. *Computers & Fluids* **26**: 117-133, 1997.
- 41 KUO, K. K. - *Principles of Combustion*. Wyley-Interscience Publication. John Wiley & Sons, 1986. 810p.
- 42 LAUNDER, B. E. & SPALDING, D. B. - The Numerical Computation of Turbulent Flows. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* **3**: 269-289, 1974.
- 43 LEGER, C. B.; CUNDY, V. A. & STERLING, A. M. - A Three-Dimensional Detailed Numerical Model of a Field-Scale Rotary Kiln Incinerator. *Environmental Science and Technology* **27(4)**: 677-690, 1993.
- 44 LIXING, Z. - *Theory and Numerical Modelling of Turbulent Gas-Particle Flows and Combustion*. Science Press, 1993. 231p.
- 45 LUO, X.-L., BOYD, R. K. & KENT, J. H. - Computational Investigation of Burnout in a Furnace Firing Pulverised Coal. *Journal of the Institute of Energy* **64**: 230-238, 1991.

- 46 MALISKA, C. R. - *Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional*. LTC - Livros Técnicos e Científicos Editora, S.A., 1995. 424p.
- 47 MASTORAKOS, E.; MASSIAS, A.; TSAKIROGLOU, C. D.; GOUSSIS, D. A.; BURGANOS, V. N. & PAYATAKES, A. C. - CFD Predictions for Cement Kilns Including Flame Modelling Heat Transfer and Clinker Chemistry. *Applied Mathematical Modelling* **23**: 55-76, 1999.
- 48 MAY, H.-O. - A Three-Dimensional Numerical Model of a Waste Incinerator. *Proceedings of Institution of Mechanical Engineers* **208**: 237-247, 1994.
- 49 MORVAN, D.; PORTERIE, B.; LARINI, M. & LORAUD, J. C. - Numerical Simulation of Turbulent Diffusion Flame in Cross Flow. *Combustion Science and Technology* **140**: 93-122, 1998.
- 50 NASSERZADEH, V.; SWITHEBANK, J.; SCHOFIELD, C.; SCOTT, D. W.; LOADER, A.; LEONARD, A.; RUSSELL, R. & WINN, D. - Three-Dimensional Modelling of the Coventry MSW Incinerator Using Computational Fluid Dynamics and Experimental Data. *Transactions of Institution of Chemical Engineers* **71(B)**: 269-279, 1993.
- 51 NELSON, H.F. - Radiative Heating in Scramjet Combustors. *Journal of Thermophysics and Heat Transfer* **11**: 59-64, 1997.
- 52 NIESSEN, W. R. - *Combustion and Incineration Processes*. Marcel Dekker, Inc., 1978. 371p.
- 53 PAI, B. R.; MICHELFELDER, S. & SPALDING, D. B. - Prediction of Furnace Heat Transfer with a Three-Dimensional Mathematical Model. *International Journal of Heat and Mass Transfer* **21**: 571-580, 1978.
- 54 PATANKAR, S. V. - *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*. Hemisphere Publishing Corporation, 1980.
- 55 PATANKAR, S. V. & SPALDING, D. B. - A Calculation Procedure for Heat, Mass and Momentum Transfer in Three-Dimensional Parabolic Flows. *International Journal of Heat and Mass Transfer* **15**: 1787-1806, 1972.
- 56 PERRY, R. H. & CHILTON, C. H. - *Manual de Engenharia Química*. Guanabara Dois, 1980.

- 57 PITA, J. A. & SUNDARESAN, S. - Developing Flow of a Gas-Particle Mixture in a Vertical Riser. *AIChE Journal* **39(4)**: 541-552, 1993.
- 58 POPE, S. B. - PDF Methods for Turbulent Reacting Flows. *Progress in Energy and Combustion Science* **11**: 119-192, 1985.
- 59 RAJU, M.S. Application of Scalar Monte Carlo Probability Density Function Method for Turbulent Spray Flames. *Numerical Heat Transfer A* **30(8)**: 753-777, 1996.
- 60 RHIE, C. M. & CHOW, W. L. - Numerical study of the turbulent flow past an airfoil with trailing edge separation. *ALAA Journal* **21**: 1527-1532, 1983.
- 61 RICOU, F. P. & SPALDING, D. B. - Measurements of Entrainment by Axisymmetrical Turbulent Jets. *Journal of Fluid Mechanics* **11**: 21-32, 1961.
- 62 SAXENA, S. C. & THOMAS, L. A. - An Equilibrium Model for Predicting Flue-Gas Composition of an Incinerator. *International Journal of Energy Research* **19**: 317-327, 1995.
- 63 SCHNEIDER, G. E. & ZEDAN, M. - A Modified Strongly Implicit Procedure for the Numerical Solution of Field Problems. *Numerical Heat Transfer* **4**: 1-19, 1981.
- 64 SERAG-ELDIN, M. A. & SPALDING, D. B. - A Computational Procedure for Three-Dimensional Recirculating Flows Inside Can Combustors. *Numerical Methods in Heat Transfer* **21**: 445-466, 1981.
- 65 SETTARI, A. & AZIZ, K. - A Generalization of the Additive Corrections Methods for the Iterative Solution of Matrix Equations. *Siam Journal on Numerical Analysis* **10**: 506-521, 1973.
- 66 SIEGEL, R. & HOWELL, J. R. - *Thermal Radiation Heat Transfer*. McGraw-Hill Book Company, 1972. 814p.
- 67 SLATTERY, J. C. - *Momentum, Energy and Mass Transfer in Continua*. McGraw-Hill Kogakusha Ltda., 1972. 679p.
- 68 SMART, J.P.; WOYCENCO, D.M.; MORGAN, D.J. & van de KAMP, W.L. Studies on Scale-up of Swirl-Stabilised Pulverised-Coal Burners in the Thermal Input Range 2.5-12 MW. *Journal of the Institute of Energy* **69(480)**: 131-143, 1996.

- 69 SPARROW, E. M. & CESS, R. D. - *Radiation Heat Transfer*. Brooks/Cole Publishing Company. 1970. 340p.
- 70 SPEZIALE, C. G. - Analytical Methods for the Development of Reynolds-Stress Closures in Turbulence. *Annual Review of Fluid Mechanics* **23**: 107-157, 1991.
- 71 STONE, H. L. - Iterative Solution of Implicit Approximations of Multidimensional Partial Differential Equations. *Siam Journal on Numerical Analysis* **5**: 530-558, 1968.
- 72 Van DOORMAL, J.P. & RAITHBY, G.D. - Enhancements of the SIMPLE Method for Predicting Incompressible Fluid Flows. *Numerical Heat Transfer* **7**: 147-163, 1984.
- 73 VU, B. T. & GOULDIN, F. C. - Flow Measurements in a Model Swirl Combustor. *AALA Journal* **20(5)**: 642-651, 1981.
- 74 WILLIAMS, J. D.; BECKER, A. R. & GIROVICH, M. J. - 3-D Flow Modeling of Hazardous Waste Incinerator. *Journal of Air Pollution Control Association* **38**: 1050-1054, 1988.
- 75 XU, Z. G.; GOTHAM, D. H. T.; COLLINS, M. W.; CONEY, J. E. R.; SHEPPARD, C. G. W. & MERDJANI, S. - Validation of Turbulence Models in a Simulated Air-Conditioning Unit. *International Journal for Numerical Methods in Fluids* **26**: 199-215, 1998.
- 76 YAKHOT, V. & ORSZAG, S. A. - Renormalization Group Analysis of Turbulence. *Journal of Scientific Computing* **1**: 3-51, 1986.
- 77 YANG, Y.; RAKHORST, J.; REUTER, M. A. & VONCKEN, J. H. L. - Analysis of Gas Flow and Mixing in a Rotary Kiln Waste Incinerator. *Proceedings of the Second International Conference on CFD in the Minerals and Process Industries, Melbourne, Australia*: 443-448, 1998.
- 78 ZELDOVICH, Y. B.; BARENBLATT, G. I.; LIBROVICH, V. B. & MAKHVILADZE, G. M. - *The Mathematical Theory of Combustion and Explosions*. Consultants Bureau, 1985. 597p.