

**UNIVERSIDADE FEDERAL DO PAMPA**

**RAFAEL PEREIRA BIANCHIN**

**DESENVOLVIMENTO DA TEORIA SPRAY-FLAMELET**

**Alegrete**

**2016**

**RAFAEL PEREIRA BIANCHIN**

**DESENVOLVIMENTO DA TEORIA SPRAY-FLAMELET**

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado ao Curso de Engenharia Mecânica da Universidade Federal do Pampa, como requisito parcial para obtenção do Título de Bacharel em Engenharia Mecânica.

Orientador: César Flaubiano da Cruz  
Cristaldo

**Alegrete**  
**2016**

Ficha catalográfica elaborada automaticamente com os dados fornecidos  
pelo(a) autor(a) através do Módulo de Biblioteca do  
Sistema GURI (Gestão Unificada de Recursos Institucionais) .

B577d Bianchin, Rafael Pereira  
Desenvolvimento da Teoria Spray-Flamelet / Rafael Pereira  
Bianchin.  
72 p.

Trabalho de Conclusão de Curso(Graduação)-- Universidade  
Federal do Pampa, ENGENHARIA MECÂNICA, 2016.

"Orientação: César Flaubiano da Cruz Cristaldo".

1. Fenômenos de Transporte. 2. Mecânica dos Fluídos  
Reativos. 3. Combustão. I. Título.

**RAFAEL PEREIRA BIANCHIN**

**DESENVOLVIMENTO DA TEORIA SPRAY-FLAMELET**

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado ao Curso de Engenharia Mecânica da Universidade Federal do Pampa, como requisito parcial para obtenção do Título de Bacharel em Engenharia Mecânica.

Trabalho de Conclusão de Curso defendido e aprovado em 2 de dezembro de 2016.

Banca examinadora:



---

Prof. Dr. César Flaubiano da Cruz Cristaldo

Orientador

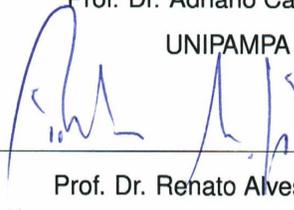
UNIPAMPA



---

Prof. Dr. Adriano Carotenuto

UNIPAMPA



---

Prof. Dr. Renato Alves da Silva

UNIPAMPA

Este trabalho é dedicado a Deus, aos meus pais e aos meus irmãos.

## **AGRADECIMENTO**

A Deus, que é a origem de todas as coisas, e que me guiou em cada caminho que eu trilhei. Suas muitas misericórdias são a causa de não sermos consumidos.

Aos meus pais, Délcio e Valéria, pelo apoio incondicional.

Aos meus irmãos, Filipe e Gabriela, pela compreensão.

Ao Régis, pela parceria ao longo de todo o curso.

Ao professor César Cristaldo, pela orientação e pelo apoio na elaboração deste trabalho.

Ao professor Fernando Fachini e pelos valiosos ensinamentos e sugestões.

Aos professores Valdoir Dutra, Edson Diniz e Carlos Dili pelo apoio durante meu ingresso no curso.

Aos demais alunos e professores com quem tive o prazer de conviver e aprender durante a graduação.

Mas ele foi traspassado pelas nossas transgressões e moído pelas nossas iniquidades; o castigo que nos traz a paz estava sobre ele, e pelas suas pisaduras fomos sarados.

Isaías 53:5

## RESUMO

Este trabalho apresenta a análise de uma chama difusiva onde o trajeto do fluxo de reagentes é representado pela configuração de escoamento em contracorrente. Esta configuração baseia-se na injeção de combustível gasoso e oxidante em direções opostas, estabelecendo um ponto de estagnação entre eles. No presente modelo, uma determinada fração de combustível encontra-se na fase líquida sob a forma de gotas. A descrição matemática do problema é elaborada a partir das equações de conservação de energia e de espécies químicas que, após simplificadas e descritas em um sistema coordenado auxiliar, são integradas ao longo do domínio, fornecendo portanto as características do processo de combustão. Dentre os parâmetros que apresentam influência sobre tais características, estão o parâmetro de vaporização do spray, a temperatura e fração de combustível presente no gás e a posição em que o combustível líquido é injetado. A influência de cada parâmetro é estudada e discutida quantitativa e qualitativamente, sendo observado que a fração de combustível no gás apresenta grande influência sobre a temperatura e posição da chama.

Palavras-Chave: chama em contra-fluxo; combustão de spray; spray-flamelet; vaporização de gotas.

## **ABSTRACT**

This work presents the analysis of a diffusive flame where the trajectory of the reactants flow is represented by the counterflow configuration. This configuration is based in the injection of gaseous and oxidant in opposite directions, establishing a stagnation point between them. In the present model, a determined fraction of the fuel is found in the liquid state in the form of droplets. The mathematical description of the problem is elaborated from the energy and chemical species conservation equation which, after being simplified and described in an auxiliary coordinated system, are integrated along the domain, providing the properties of the combustion process. Among the parameters that presents influence over those properties, are the spray vaporization parameter, the temperature and fuel fraction in the gas and the position where the fuel in liquid state is injected. The influence of each parameter is studied and discussed in a quantitative and qualitative way, being showed that the fuel fraction in the gas presents great influence over the flame temperature and position.

Keywords: counterflow configuration flame; droplet vaporization; spray combustion; spray-flamelet model.

## LISTA DE FIGURAS

1	Combustão de gota.....	22
2	Chama em contra corrente .....	23
3	Configurações de chamas em contra corrente .....	25
4	Combustão de spray .....	27
5	Combustão de múltiplas gotas .....	27
6	Combustão de gota.....	29
7	Configuração do problema. ....	30
8	Volume e superfície de controle. ....	31
9	Raio das gotas ao longo do escoamento. ....	56
10	Perfis de temperatura e de concentração de combustível para $x_i^* = -1,5$ , $T_{-\infty}^* = 2T_B^*$ e $\Phi = \Phi_{max}$ . ....	57
11	Nomenclatura utilizada. ....	58
12	Perfis de temperatura e de concentração de combustível para $x_i^* = -1,5$ , $T_{-\infty}^* = 2T_B$ e $\Phi = \Phi_{max} - 3$ . ....	59
13	Perfis de temperatura e de concentração de combustível para $M = 400$ , $T_{-\infty}^* = 2T_B$ e $\Phi = \Phi_{max}$ . ....	60
14	Perfis de temperatura e de concentração de combustível para $M = 400$ , $T_{-\infty}^* = 2T_B$ e $\Phi = \Phi_{max} - 2$ . ....	61
15	Perfis de temperatura e de concentração de combustível para $M = 200$ , $x_i^* = -1,0$ e $\Phi = \Phi_{max}$ . ....	62
16	Perfis de temperatura e de concentração de combustível para $M = 200$ e $x_i^* = -1,0$ e $\Phi = \Phi_{max} - 3$ . ....	63
17	Perfis de temperatura e de concentração de combustível para $M = 200$ , $x_i^* = -1,0$ e $T_{-\infty}^* = 2T_B^*$ . ....	64
18	Variação da posição da chama com $\Phi_{max} - \Phi$ para os parâmetros dados pela Tab.(2) e $M = 100$ .....	65
19	Variação da posição da chama com $\Phi_{max} - \Phi$ para os parâmetros dados pela Tab.(2) e $M = 400$ .....	66

- 20 Variação da posição da chama com  $\Phi_{max} - \Phi$  para os parâmetros dados pela Tab.(2) e  $M = 100$  (curvas 1a-4a) e  $M = 400$  (curvas 1b-4b) ..... 67
- 21 Comparação entre a função  $L - x^*$  calculada numericamente e analiticamente 70

## LISTA DE SÍMBOLOS

### Caracteres latinos:

$a$  - raio da gota (adimensional);

$D_i$  - difusividade mássica da espécie  $i$  [ $m^2/s$ ];

$e$  - energia [J];

$H$  - função excesso de entalpia (adimensional);

$h$  - entalpia [J/kg];

$k$  - condutividade térmica [W/m.K];

$L_h$  - calor latente de vaporização do combustível [J/kg];

$M$  - parâmetro de vaporização (adimensional);

$\dot{m}$  - taxa de vaporização individual das gotas [kg/s];

$N$  - Número de gotas por unidade de volume [ $1/m^3$ ];

$p$  - pressão termodinâmica [Pa];

$Q$  - calor gerado por mol de combustível consumido na reação química [kJ/s.mol];

$r$  - coordenada radial [m];

$T$  - temperatura estática [K];

$t$  - tempo [s];

$\vec{V}$  - velocidade [m/s];

$x$  - coordenada longitudinal [m];

$x_i$  - posição de injeção de combustível [m];

$x_a$  - posição de evaporação das gotas [m];

$Y_i$  - concentração em massa da espécie  $i$  (adimensional);

$Z$  - função fração de mistura (adimensional);

### Caracteres gregos:

$\beta$  - função de vaporização da gota (adimensional);

$\Gamma$  - Fator de frequência da reação química [ $1/s$ ];

$\delta$  - energia consumida na evaporação das gotas [kJ/kg.s];

$\lambda$  - taxa de vaporização da gota (adimensional);

$\mu$  - viscosidade dinâmica [N.s/m<sup>2</sup>];

$\nu$  - razão estequiométrica da reação química (adimensional);

$\xi$  - coordenada transformada (adimensional);

$\rho$  - massa específica [ $\text{kg}/\text{m}^3$ ];

$\Phi$  - fração mássica de combustível (adimensional);

$\omega$  - taxa de consumo de espécies na reação química [ $\text{mol}/\text{s}$ ];

Subscritos e sobrescritos:

$\cdot_f$  - propriedade na chama;

$\cdot_c$  - propriedade ou variável característica;

$\cdot^*$  - propriedade ou variável adimensional.

## SUMÁRIO

<b>1</b>	<b>INTRODUÇÃO</b>	<b>16</b>
<b>2</b>	<b>REVISÃO BIBLIOGRÁFICA</b>	<b>18</b>
2.1	Classificação da combustão	18
2.2	Modelagem da combustão	20
2.3	Combustão de gotas	21
2.4	Chama em contra corrente	22
2.5	Combustão de spray	26
2.6	Aplicações	28
<b>3</b>	<b>METODOLOGIA</b>	<b>30</b>
3.1	Equações governantes	30
3.1.1	Equação da conservação da massa	31
3.1.2	Equação da conservação da quantidade de movimento	32
3.1.3	Equação da conservação das espécies	33
3.1.4	Equação da conservação da energia	34
3.1.5	Equação de estado	36
3.2	Condições de contorno	37
3.3	Descrição dos termos de fonte	37
3.4	Adimensionalização das equações de conservação	38
3.5	Formulação de Schvab-Zeldovich	46
3.6	Condições de contorno	47
3.7	Mudança de variável	47
3.8	Descrição do termo fonte das gotas	49
3.9	Solução	52
3.9.1	Solução analítica	52
3.9.2	Solução numérica	53
<b>4</b>	<b>RESULTADOS</b>	<b>55</b>
4.1	Validação dos resultados	55
4.2	Influência do parâmetro de vaporização $M$	57

4.3	Influência da posição de injeção $x_i^*$ .....	60
4.4	Influência da temperatura do gás com combustível $T_{-\infty}^*$ .....	61
4.5	Influência da fração mássica de combustível $\Phi$ .....	63
4.6	Transformação de Crocco .....	68
5	CONSIDERAÇÕES FINAIS .....	71
	REFERÊNCIAS .....	72

## 1. INTRODUÇÃO

É inegável que o controle da combustão é um fator muito importante para o desenvolvimento tecnológico. Apesar do fogo ter sido um elemento de extrema importância para a humanidade há milhares de anos, apenas no século XVIII, com a teoria do flogisto, explicações cientificamente razoáveis foram criadas para o processo de combustão. No século passado, entretanto, o progresso do estudo de fenômenos de transporte, da química e da matemática permitiram avanços extraordinários na descrição do processo de combustão.

Uma das principais aplicações práticas do estudo da combustão está na geração de energia. Segundo a EIA, agência americana que estuda a administração de energia, 38,8 % da energia elétrica era gerada em 2014 pela combustão de carvão, e 27,4 % pela combustão de gás natural, totalizando 66,2 % de energia gerada através da combustão.

Em outros países, grande parcela da geração de energia elétrica provém da combustão de óleo. A combustão de óleo também é utilizada em motores de diversos meios de transporte, como em motores a Diesel e motores a reação.

A vantagem dos combustíveis líquidos é sua grande capacidade de armazenamento de energia de fácil estocagem. Sabe-se que a queima de combustíveis líquidos ocorre na fase gasosa, portanto o combustível deve ser vaporizado antes de sua queima. A vaporização por sua vez é controlada pelo fluxo de calor transferido da chama para o líquido pela sua superfície de contato com a fase gasosa. Portanto, a atomização é o principal mecanismo de controle de transferência de calor para o combustível, uma vez que aumenta a área superficial de contato do líquido com gás. Conseqüentemente, o que temos é uma nuvem de gotas aquecendo e vaporizando (combustão de spray) dentro de uma câmara de combustão.

O tema deste trabalho é analisar a combustão de um spray no qual estejam dispersas gotas de combustível em um meio gasoso, a partir das equações de conservação. Este estudo é justificado pela compreensão dos mecanismos envolvidos na combustão multifásica permitindo, por exemplo, que a geração de poluentes seja diminuída, ou que os parâmetros que otimizam o processo sejam identificados.

O objetivo deste trabalho é descrever as propriedades da chama na presença de gotas

de combustível líquido. Os objetivos específicos são: 1) descobrir a influência da presença de combustível na fase líquida sobre as variáveis do problema; 2) obter uma solução para o perfil de temperatura e concentração dos reagentes; e 3) caracterizar de forma quantitativa e qualitativa os fenômenos da combustão.

Este trabalho é composto pela revisão bibliográfica, onde a fundamentação teórica para o desenvolvimento do trabalho é obtida através de pesquisa na literatura, permitindo-se identificar as abordagens e considerações mais coerentes e convenientes; pela metodologia, onde está descrito o procedimento preliminar à obtenção dos resultados, como a descrição matemática do problema e a abordagem numérica utilizada; e pelos resultados onde, são exibidos e discutidos o comportamento das variáveis do problema, bem como a influência dos parâmetros físicos sobre estas.

## **2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA**

O estudo da combustão envolve inúmeros fenômenos relacionados aos mecanismos de reação química, transporte de energia, de massa e de quantidade de movimento. Devido à extrema complexidade desses fenômenos, aproximações devem ser feitas de forma a simplificar a modelagem matemática. A combustão de metano, por exemplo, ocorre em mais de 300 reações químicas envolvendo mais de 30 espécies. A princípio, um conjunto de equações diferenciais deveriam ser resolvidos para cada uma dessas reações, mas modelos simplificados costumam ser utilizados na busca por soluções analíticas [3]. Nesta seção as diferentes formas de classificar os processos de combustão serão comentados, bem como as suas principais configurações.

### **2.1. Classificação da combustão**

A combustão pode ocorrer em diferentes modos. Pode, por exemplo, haver ou não a presença de chama. Em um motor de ignição por centelha, a combustão tem início quando uma centelha é produzida na vela, gerando uma frente de chama que se propaga ao longo da câmara de combustão. Assim, há uma região onde a reação química ocorre, separando uma região com mistura de ar e combustível e uma região com produtos de combustão. Entretanto, pode ocorrer autoignição no combustível, quando a temperatura da mistura é tão elevada que leva a reação a se iniciar espontaneamente. Como, neste caso, a reação química não se sustenta, estas reações ocorrem isoladamente, sem a formação de uma frente de chama. A autoignição é um fenômeno indesejado porque a ausência de chama diminui a eficiência térmica do motor.

A combustão com chama pode ser separada em duas grandes classes, pré-misturada e não pré-misturada (difusiva). Nas chamas pré-misturadas os reagentes se encontram misturados em nível molecular antes do início da combustão, como em motores de ignição por centelha. Em uma chama não pré-misturada, comumente chamada de difusiva, os reagentes encontram-se inicialmente separados fisicamente, e a reação química ocorre simultaneamente ao processo de mistura. Um exemplo comum de chama difusiva é a chama de uma vela, em que a parafina no estado gasoso deve difundir até o ar para que a

combustão ocorra. Em motores de combustão por compressão, como motores a Diesel, ocorrem ambos os regimes de combustão [23].

Um bico de Bunsen é um equipamento capaz de gerar ambos os regimes de combustão devido a um orifício de entrada de ar primário na tubulação de admissão de combustível. Conforme o combustível gasoso passa pela tubulação, ele se mistura com o ar primário que entra através do orifício, e a combustão ocorre após a mistura sair do tubo. Quando a mistura é pobre (isto é, quando há oxidante em excesso), todo o combustível é queimado. Se o orifício está parcialmente fechado, a mistura torna-se rica (ou seja, há combustível em excesso) e todo o oxidante que entra pelo orifício é queimado. Entretanto, o restante do combustível reage com o ar do ambiente, sem estar previamente misturado a ele, gerando uma chama difusiva. Quando o orifício está totalmente fechado, o gás só entra em contato com o ar no exterior do tubo, gerando uma chama puramente difusiva [14].

A combustão também pode ocorrer em regime laminar e em regime turbulento. Assim como em qualquer escoamento, em uma chama laminar existem linhas de corrente distintas e definidas, que descrevem a trajetória das partículas de fluido, enquanto que em uma chama turbulenta o mesmo não ocorre. A presença de turbulência na combustão difusiva pode auxiliar na mistura dos reagentes. Em motores a Diesel, por exemplo, a turbulência é induzida antes que a combustão ocorra para haver um regime de combustão pré-misturada. Embora a presença de turbulência torne a modelagem consideravelmente mais complexa, certas considerações permitem que o escoamento possa ser analisado como laminar em escalas com comprimento característicos menores que o diâmetro do menor turbilhão.

Outra forma de caracterizar a combustão de acordo com a natureza de seu escoamento é através da velocidade do escoamento. Quando o escoamento é subsônico, o processo de difusão envolvendo a colisão entre as moléculas é predominante, havendo maior tempo para que as reações químicas ocorram. Em combustão supersônica, por outro lado, a alta velocidade do escoamento faz com que os fenômenos de convecção de energia e de espécies químicas se sobressaiam ao de difusão, deixando menor tempo para que a reação ocorra. Em explosões, por exemplo, ocorre combustão supersônica.

O estado de agregação dos reagentes fornecem outra forma de se classificar a com-

bustão. Na combustão homogênea, ambos os reagentes existem no mesmo estado de agregação, como na chama de um bico de Bunsen, por exemplo. Quando os reagentes existem em estados diferentes, a combustão é denominada heterogênea [14].

## 2.2. Modelagem da combustão

Assim como a maioria dos processos que ocorrem em fenômenos de transporte, a combustão pode ser modelada através das equações de conservação. Durante a combustão, existe fluxo de massa por difusão e convecção, geração e consumo de espécies químicas, transferência de quantidade de movimento e de energia [12]. Logo, as equações de conservação referentes à estes fenômenos devem ser utilizadas.

Muitas considerações e simplificações são utilizadas na modelagem de combustão. No estudo de chamas difusivas, a principal consideração utilizada é o limite de Burke-Schumann. Em 1928, estes autores estudaram uma chama difusiva que se estabelecia quando os reagentes escoavam a partir de dois tubos concêntricos. Eles perceberam experimentalmente que a chama se confinava a uma região extremamente fina, separando fisicamente os dois reagentes [2]. Assim, a frente de chama é definida como o lugar geométrico onde a taxa de difusão dos reagentes são tais que permitam que ocorra a razão estequiométrica entre a concentração de combustível e oxidante. Pode se mostrar que o termo relacionado ao consumo dos reagentes na reação química é proporcional a  $Da y_O^{\nu_1} y_F^{\nu_2}$ , sendo  $Da$  o número de Damköhler, que representa a razão entre a taxa de reação química e de transporte de massa,  $y_O$  e  $y_F$  são as concentrações de oxidante e combustível, respectivamente e  $\nu_1$  e  $\nu_2$  são os expoentes que relacionam a taxa de reação química à concentração dos reagentes. Quando o número de Damköhler é muito elevado  $Da \rightarrow \infty$ , a condição  $y_O^{\nu_1} y_F^{\nu_2} \rightarrow 0$  é necessária para que o termo permaneça na ordem da unidade, isto é  $Da y_O^{\nu_1} y_F^{\nu_2} = O(1)$ . Isto significa que para todo o domínio, combustível e oxidante não coexistem, isto é  $y_O = 0$  ou  $y_F = 0$ , logo o domínio é separado em lado do combustível (entre a gota e a chama) e lado do oxidante (da chama até o infinito). Nestas condições, o limite de Burke-Schumann pode ser estabelecido. Entretanto, foi demonstrado matematicamente através de expansões assintóticas que outras formas de solução podem ocorrer mesmo quando o número de Damköhler é elevado [1].

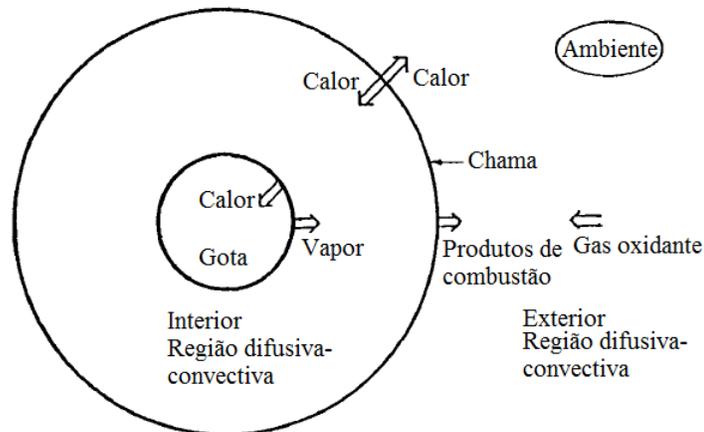
Quanto às reações químicas, a consideração mais comum é a de reações simples, de passo único. Enquanto na realidade a combustão ocorre em dezenas de reações distintas, em sequência, em modelos analíticos geralmente considera-se que a reação ocorre entre os reagentes iniciais gerando diretamente os produtos finais. Esta consideração permite que o número de equações de conservação e de termos fonte seja diminuído drasticamente, o que é desejável tanto em estudos analíticos quanto em estudos numéricos.

A lei de Fick é frequentemente utilizada para descrever a difusão das espécies químicas. A lei de Fick afirma que o fluxo de substância ocorre de regiões de maior concentração para regiões de menor concentração, e que a magnitude do fluxo é proporcional ao gradiente de concentração. Outra consideração comum envolve assumir que a difusividade térmica é igual à difusividade mássica, o que é equivalente a assumir que o número de Lewis, razão entre estas propriedades, é unitário.

### **2.3. Combustão de gotas**

O estudo da combustão de gotas isoladas é muito importante pois permite identificar sua influência num spray de gotas . Os primeiros estudos envolvendo a combustão de gotas foram realizados por Spalding e Godsave, [20, 7, 8]. Na combustão de gotas, uma chama se estabelece ao redor da gota, aquecendo o combustível na fase líquida e evaporando-o. A Fig.(1) exhibe a configuração mais comum de processos de combustão de gotas.

Figura 1 – Combustão de gota



Adaptado de [13]

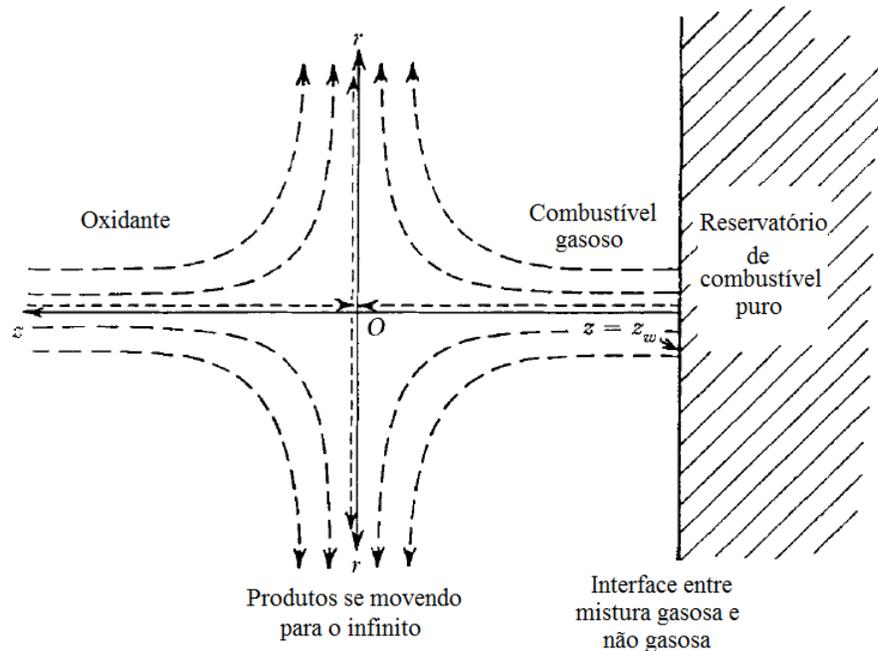
Se a gota tem formato esférico e encontra-se sem movimento relativo ao ambiente gasoso, o problema possui simetria radial e pode ser tratado como unidimensional, isto permite que o problema seja resolvido de maneira simplificada permitindo encontrar soluções analíticas para descrever a posição e temperatura da chama, sob determinadas hipóteses. Como a gota evapora, o processo é naturalmente transiente, porém sob condições de baixa pressão a fase gasosa pode ser tratada como quase estacionária devido a inércia térmica da fase líquida ser muito maior do que na fase gasosa, ou seja, havendo qualquer variação de temperatura na superfície da gota, a fase gasosa se adapta instantaneamente.

#### 2.4. Chama em contra corrente

Estudos experimentais envolvendo chamas em contra corrente foram desenvolvidos por Potter e Butler [18]. Desde então, muitos estudos foram efetuados sobre as chamas em contra corrente, pois são mais simples de estabilizar, e sua zona de reação fina permite estudos detalhados relacionados à cinética química. Além disso, o seu caráter unidimensional da distribuição de temperatura e de concentração dos reagentes permite comparações entre medições experimentais e previsões de modelos matemáticos. A configuração de contra corrente é também conhecida como de jatos opostos ou impingentes. Uma chama

em contra corrente está exibida na Fig.(2).

Figura 2 – Chama em contra corrente



Adaptado de [5]

A primeira modelagem matemática de uma chama em contra corrente foi efetuada por Spalding [21]. O modelo de escoamento adotado por Spalding, e que é adotado até a atualidade, se baseia no escoamento potencial de um fluido contra uma placa plana. Embora a solução adotada seja válida para fluidos incompressíveis e invíscidos, esta costuma ser uma boa aproximação em regiões próximas do ponto de estagnação. A modelagem da mistura dos reagentes por difusão permitiu a obtenção da localização da chama no campo de escoamento, e foi mostrado que as condições de extinção da chama não dependem das propriedades de transporte do fluido.

Fendell examinou uma chama em contra corrente com reagentes possuindo números de Lewis unitários, envolvendo reações de passo único e passo duplo [5]. Foi identificado que o número de Damköhler apresenta grande influência sobre o fenômeno de combustão. Dois limites foram determinados: um fluxo "congelado", não havendo reação e nem geração de calor, e um fluxo em equilíbrio, quando a taxa de reação é infinita. O fluxo

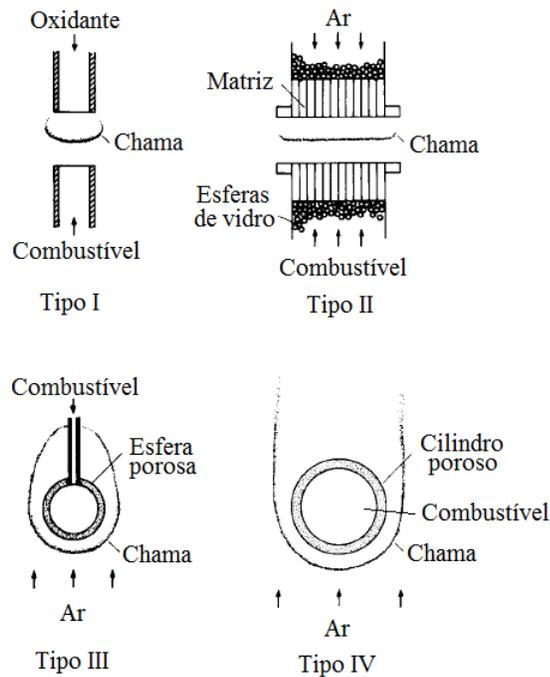
congelado ocorre quando a colisão entre as moléculas, que é o mecanismo que induz a reação, leva muito mais tempo para ocorrer do que o tempo necessário para que o reagente atravesse a chama. Quando a taxa de reação é infinita, o equilíbrio químico apenas se estabelece quando os reagentes entram em contato, vindo instantaneamente a reagir, formando uma chama de espessura desprezível, pois a escala de tempo da reação é muito menor que o tempo necessário para que o reagente atravesse a chama. Estes casos limites ocorrem quando o número de Damköhler é nulo ou infinito, respectivamente. Para casos intermediários, o mecanismo de reação química deve ser detalhado.

O efeito de um campo elétrico sobre uma chama difusiva em contra corrente foi estudada sob diferentes condições de intensidade e polaridade por Heinshon, Wulfhorst e Becker [9]. Experimentos mostraram que, a qualquer composição, a presença de campo elétrico permite que as chamas apresentem maior intensidade, alterando os gradientes de concentração e contribuindo com a reação. Foi sugerido que a influência se dê pela presença de íons entre as moléculas de reagentes, além da possível existência de novas reações químicas. Um estudo posterior modelou matematicamente este problema e resolveu-o através da integração numérica das equações de conservação em diferenças finitas [11].

A análise da estrutura de uma chama em contra corrente foi desenvolvida por Liñán [15] porque, segundo o autor, os aspectos qualitativos da estrutura da chama são independentes da configuração da combustão. Em uma chama difusiva, a temperatura máxima no campo de escoamento depende do número de Damköhler. Quando a energia de ativação da reação química é baixa, a dependência é monotônica, mas o mesmo não ocorre quando a energia de ativação é alta, havendo uma curva em forma de S, que representa as condições de ignição e de extinção da chama. Assim, para uma análise assintótica, Liñán utiliza como parâmetro de perturbação a razão entre a temperatura da chama e a energia de ativação, permitindo que as condições de ignição e de extinção sejam obtidas.

Tsuji [22] elaborou uma revisão envolvendo as chamas em contra corrente, e separou as chamas em contra corrente nas configurações exibidas na Fig.(3).

Figura 3 – Configurações de chamas em contra corrente



Adaptado de [22]

A chama de tipo I pode ser tridimensional ou plana e se estabelece entre dois jatos opostos provenientes de tubos circulares ou retangulares. A chama de tipo II ocorre entre dois queimadores ejetando reagentes em direções opostas. A chama de tipo III ocorre na região de estagnação de um queimador esférico ou hemisférico poroso. A chama de tipo IV se estabelece na região de estagnação de um queimador cilíndrico. O tipo I é utilizado no estudo de características relacionadas à extinção da chama, além do efeito da combinação de reagentes sobre a intensidade da chama e o efeito de campo elétrico sobre a chama. A chama de tipo II permite o estudo da formação e deposição de carbono e da análise espectroscópica acerca da estrutura da chama. O tipo III é utilizado em estudos similares ao do tipo I, mas permite verificar a eficácia de inibidores e limites de diluição. O tipo IV permite estudos da estrutura da chama e das condições de extinção na ausência de campos elétricos.

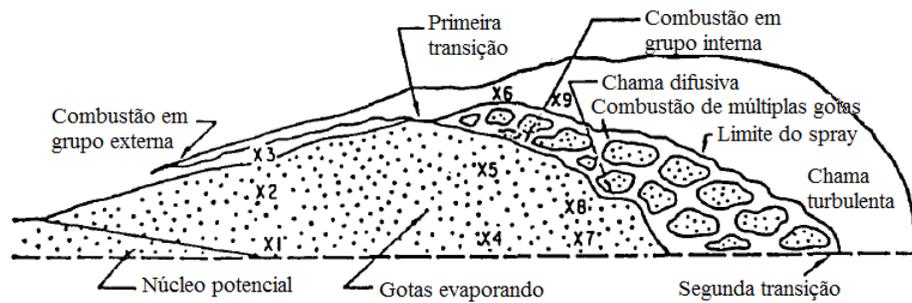
## 2.5. Combustão de spray

Embora o estudo de gotas isoladas seja muito útil para a compreensão dos fenômenos de combustão, em situações práticas as gotas podem estar muito próximas umas das outras, com distâncias da mesma ordem de grandeza de seus diâmetros, de forma que há forte interação entre elas. Sirignano [19] identifica três fenômenos distintos que ocorrem na vaporização e combustão de gotas em spray: (i) O ambiente gasoso é fortemente afetado pela presença de gotas. No estudo teórico da combustão de gotas, em geral assume-se que os fenômenos relacionados à combustão e vaporização não interferem nas condições do ambiente, mas como qualquer queimador tem dimensões finitas, o ambiente é influenciado pelas gotas; (ii) o ambiente local também é influenciado, afetando a transferência de massa entre gotas individuais e a taxa de vaporização; (iii) a própria geometria do problema é influenciada, alterando, por sua vez, o número de Nusselt, que é a relação entre o calor trocado por convecção e o calor trocado por condução.

As configurações estudadas na interação de gotas tomam a forma de gotas agrupadas periodicamente e de sprays. Embora o primeiro caso seja artificial, permite compreender o segundo e o terceiro fenômeno, pois ilustra a interação entre as gotas. Como, geralmente, poucas gotas são analisadas, o primeiro fenômeno não pode ser estudado por esta abordagem.

A Fig.(4) exibe uma típica combustão de spray. Combustível líquido atomizado é ignitado a certa distância do injetor, surgindo uma chama externa. O vapor de combustível produzido como resultado da vaporização do spray não é capaz de gerar chama no interior de spray devido à ausência de oxidante. A combustão em grupo externa surge da difusão na direção radial, e a presença de oxidante na borda do spray permite que ali ocorra combustão. A medida que as gotas escoam ao longo do spray, seu tamanho diminui e o espaçamento entre elas aumenta, permitindo que oxidante entre no spray, surgindo a combustão de grupo interna.

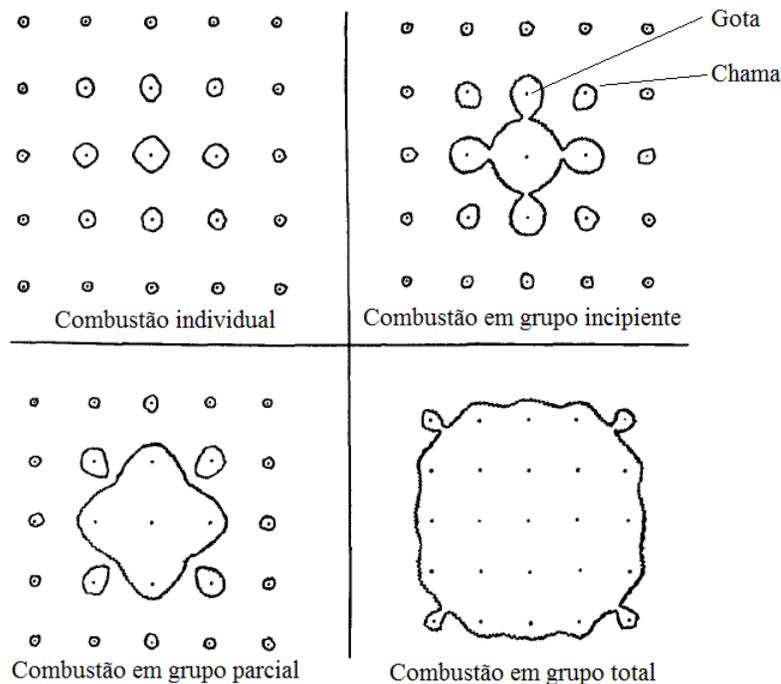
Figura 4 – Combustão de spray



Adaptado de [24]

A Fig.(5) exibe diferentes situações de combustão de grupo de gotas, obtidas para diferentes espaçamentos. Chamas em grupo ocorrem quando o espaçamento entre gotas é pequeno e há pouco oxidante no espaço entre as gotas. A razão entre a taxa de vaporização de gotas queimando em grupo ou sozinhas é dependente apenas da distância entre as gotas adimensionalizada pelo diâmetro das gotas [24]).

Figura 5 – Combustão de múltiplas gotas



Adaptado de [24]

Sprays são mais densos nas primeiras camadas após a injeção, e se tornam mais rarefeitos ao longo do escoamento. A velocidade relativa entre o líquido e o gás ambiente produz tensão superficial que parte as gotas em gotas menores. Assim, o diâmetro das gotas diminui ao longo do spray, de modo que apenas gotas pequenas estão presentes na região diluída do spray.

A turbulência induzida pela injeção de líquido não é um fator determinante na formação de gotas, mas gera uma distribuição mais uniforme de tamanho de gotas. Assim, a combustão turbulenta é modelada dividindo-se a chama em pequenas seções que podem ser consideradas como laminares e unidimensionais. Além disso, chamas difusivas com gotas no interior da zona de reação costumam ser modeladas através de chamas em contra corrente com a adição de um sumidouro de energia, devido ao calor latente de vaporização do combustível na fase líquida, e uma fonte de combustível, devido à evaporação das gotas [10].

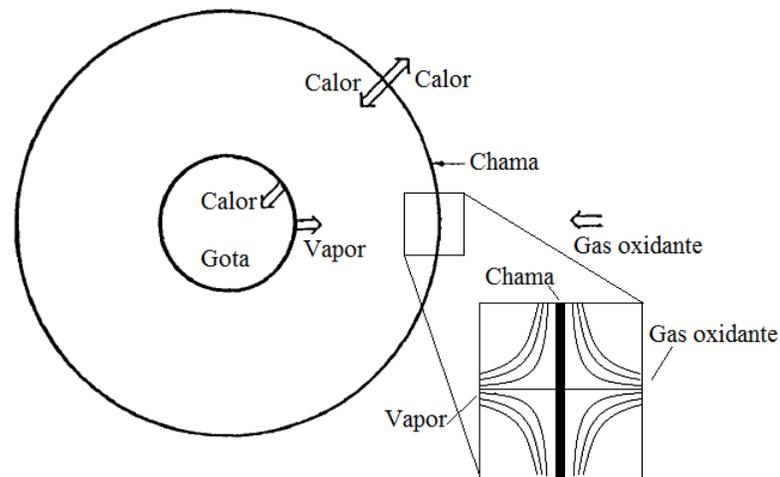
## **2.6. Aplicações**

O estudo da combustão de sprays é de importância fundamental no desenvolvimento de motores em que combustível é atomizado antes de ser queimado, como em motores a Diesel, motores a reação e motores a gasolina injetados. Motores a Diesel e demais motores que queimam óleos são largamente utilizados no transporte terrestre, em caminhões e trens, e no transporte marítimo, pois a maior parte dos navios é propelida por motores a óleo Diesel. Em motores a reação o combustível é injetado em um fluxo de ar a alta temperatura e pressão. Como motores de aeronaves devem possuir grande eficiência e confiabilidade, a evolução dos motores a reação é incessante desde seu surgimento, na década de 1940. Além disso, na atualidade, é cada vez menor o número de veículos movidos por motores a gasolina carburado, pois motores injetados permitem maior confiabilidade e controle da quantidade de combustível admitida pelo motor. Assim, é de grande importância que a combustão de sprays seja estudada e compreendida, pois seu campo de aplicação tem se mostrado crescente.

O estudo de sprays em contrafluxo possui relevância também no campo teórico, pois as chamas em contrafluxo são largamente utilizadas no modelo flamelet, que considera

uma pequena região da chama para ser analisada, como mostra a Fig.(6).

Figura 6 – Combustão de gota



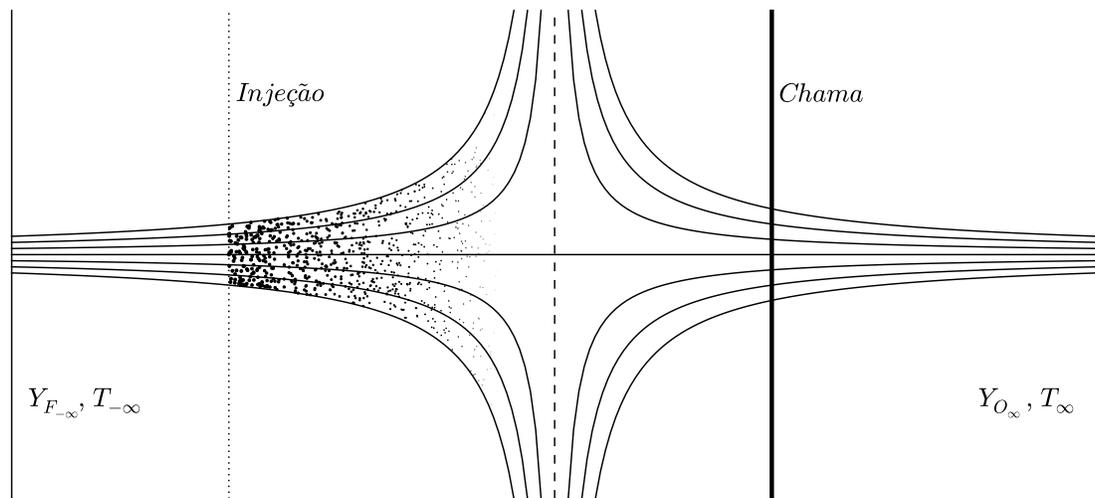
Adaptado de [13]

A Fig.(6) mostra a combustão de uma gota, possuindo simetria radial, em que a zona de reação apresenta espessura desprezível. Analisando a chama em sua escala, como exibido em destaque, a difusão de reagentes em direção à chama pode ser modelada como a convecção de reagentes em uma escala menor, na qual a espessura da zona de reação não é desprezível. Esta convecção pode ser modelada como um escoamento em contrafluxo [15]. Tendo-se conhecimento do comportamento dos perfis de temperatura e de concentração de reagentes na escala original do problema, é possível se adaptar esta solução para a região no interior da zona de reação através de métodos assintóticos.

### 3. METODOLOGIA

A configuração de jatos impingentes consiste no campo de escoamento gerado pelo encontro de dois jatos em direções opostas, provenientes de uma distância muito grande do plano de estagnação. O jato do lado esquerdo possui uma concentração de combustível  $Y_{F-\infty}$  na sua fonte, a uma temperatura  $T_{-\infty}$ , e o jato do lado direito possui uma concentração de oxidante  $Y_{O_\infty}$ , a uma temperatura  $T_\infty$ . Em determinado ponto do lado esquerdo do plano de estagnação é injetado combustível atomizado na sua temperatura de ebulição. Uma chama se estabelece em um ponto após a evaporação de todas as gotas. A configuração está exibida na Fig.(7), onde a linha tracejada indica o plano de estagnação.

Figura 7 – Configuração do problema.



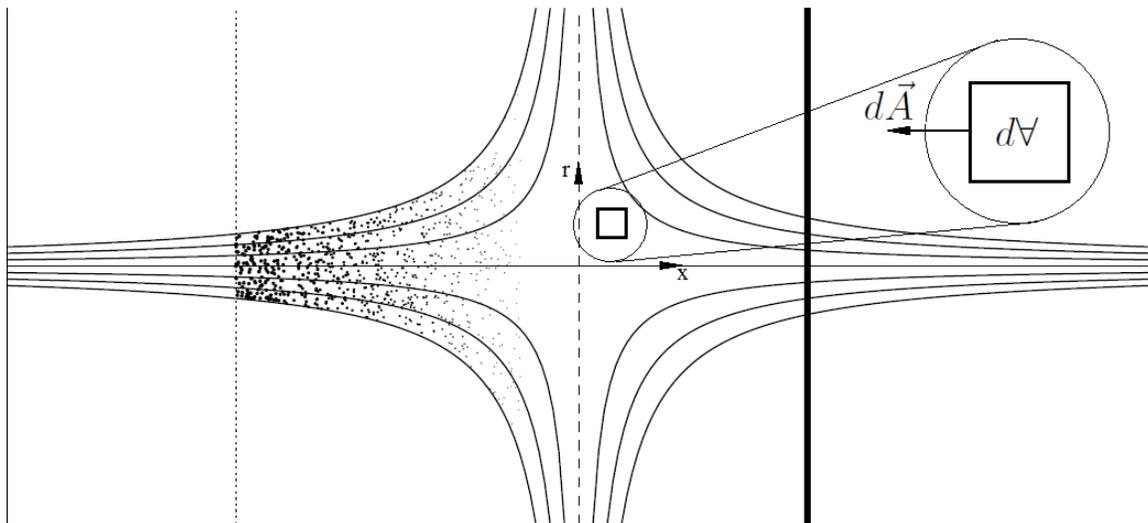
#### 3.1. Equações governantes

Segundo o Teorema de Transporte de Reynolds, para uma propriedade extensiva  $B$  vale a seguinte relação [25]:

$$\dot{B} = \frac{\partial}{\partial t} \int_{VC} \beta \rho dV + \int_{SC} \beta \rho \vec{V} \cdot d\vec{A} \quad (1)$$

Onde  $\beta$  é a propriedade específica relacionada à  $B$ ,  $\rho$  é a massa específica do fluido e  $\vec{V}$  seu vetor velocidade. O primeiro termo da equação representa a variação total da propriedade no sistema; o segundo termo representa o fluxo da propriedade no volume de controle; e o terceiro termo representa o fluxo da propriedade através da superfície de controle. O volume de controle e a superfície de controle estão exibidos na Fig.(8).

Figura 8 – Volume e superfície de controle.



Aplicando o Teorema de Gauss à integral de superfície e calculando o limite  $\forall \rightarrow 0$ :

$$\dot{b} = \frac{\partial}{\partial t}(\beta\rho) + \nabla \cdot (\beta\rho\vec{V}) \quad (2)$$

Onde  $b = dB/dV$  é a quantidade da propriedade  $B$  por unidade de volume.

### 3.1.1 Equação da conservação da massa

Neste caso, a propriedade é a massa, isto é,  $B = m$  e  $\beta = 1$ . Como não pode haver variação de massa em um sistema,  $\dot{b} = 0$ . Assim, temos:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\vec{V}) = 0 \quad (3)$$

Esta é a equação da conservação da massa. Expandindo a Eq.(2) obtemos:

$$\dot{b} = \rho \frac{\partial \beta}{\partial t} + \beta \frac{\partial \rho}{\partial t} + \beta \nabla \cdot (\rho\vec{V}) + \rho\vec{V} \cdot \nabla \beta \quad (4)$$

Mas, pela Eq.(3), a soma do segundo e do terceiro termo do lado direito é nula, levando a:

$$\dot{b} = \rho \left( \frac{\partial \beta}{\partial t} + \vec{V} \cdot \nabla \beta \right) \quad (5)$$

Definindo a derivada material como:

$$\frac{DA}{Dt} = \frac{\partial A}{\partial t} + \vec{V} \cdot \nabla A \quad (6)$$

Sendo  $A$  uma propriedade intensiva genérica, temos:

$$\rho \frac{D\beta}{Dt} = \dot{b} \quad (7)$$

No termo  $\dot{b}$  estão inclusos termos relacionados à fontes e sumidouros, bem como a outros processos de transporte. A equação de conservação de massa também pode ser escrita como:

$$\frac{D\rho}{Dt} + \rho \nabla \cdot \vec{V} = 0 \quad (8)$$

### 3.1.2 Equação da conservação da quantidade de movimento

Neste caso, a propriedade é  $B = \vec{P} = m\vec{V}$ ,  $\beta = \vec{V}$ . Assim, a equação toma a forma:

$$\rho \frac{D\vec{V}}{Dt} = \dot{b}_S \quad (9)$$

Os termos de fonte e sumidouro são:

- Forças relacionadas à pressão:  $-\nabla p$ ;
- Forças relacionadas à viscosidade:  $\nabla \cdot \vec{S}$ .
- Forças de corpo:  $\rho \vec{g}$ ;

Sendo  $\vec{g}$  um campo de forças de corpo, como a força da gravidade, por exemplo. Assim,

temos:

$$\rho \frac{D\vec{V}}{Dt} = -\nabla p + \nabla \cdot \vec{S} + \rho \vec{g} \quad (10)$$

Para um fluido Newtoniano,  $\vec{S} = \mu \nabla \vec{V}$ . A equação da conservação da quantidade de movimento é, portanto:

$$\rho \frac{D\vec{V}}{Dt} = -\nabla p + \nabla \cdot (\mu \nabla \vec{V}) + \rho \vec{g} \quad (11)$$

### 3.1.3 Equação da conservação das espécies

Neste caso, a propriedade é a massa da espécie  $i$ , isto é,  $B = m_i$ , levando a  $\beta = m_i/m = \rho_i/\rho = Y_i$ , sendo  $Y_i$  a concentração da espécie  $i$ . Assim, a equação toma a forma:

$$\rho \frac{DY_i}{Dt} = \dot{b}_S \quad (12)$$

Os termos de fonte e sumidouro são:

- Difusão de massa:  $\nabla \cdot (\rho \mathcal{D}_i \nabla Y_i)$ ;
- Consumo de espécies químicas na reação química:  $\rho s_i \omega$ ;
- Geração de espécies químicas devido à evaporação das gotas:  $\rho r_i N \dot{m}$ .

Sendo  $\mathcal{D}_i$  a difusividade mássica da espécie  $i$ ,  $\omega$  a taxa de consumo de espécies químicas,  $N$  o número de gotas por unidade de volume,  $\dot{m}$  a taxa de vaporização individual das gotas e  $s_F = 1$ ,  $s_O = \nu$ ,  $r_F = 1$  e  $r_O = 0$  são coeficientes que descrevem a reação química e a evaporação de gotas em cada espécie. Portanto, a equação da conservação das espécies é representada por:

$$\rho \frac{DY_i}{Dt} = \nabla \cdot (\rho \mathcal{D}_i \nabla Y_i) + \rho (s_i \omega + r_i N \dot{m}) \quad (13)$$

### 3.1.4 Equação da conservação da energia

Neste caso, a propriedade é  $B = E$ ,  $\beta = e$ . Assim, a equação toma a forma:

$$\rho \frac{De}{Dt} = \dot{b}_S \quad (14)$$

Sendo  $e = u + V^2/2$ . Os termos de fonte e sumidouro são:

- Difusão de calor:  $\nabla \cdot (k\nabla T)$ ;
- Transferência de calor por difusão de massa:  $-\nabla \cdot \left( \sum \rho Y_i \vec{V}_i h_i \right)$
- Trabalho realizado por forças de pressão:  $\nabla \cdot (\vec{V} \cdot \vec{\tau})$ ;
- Trabalho realizado por forças de corpo:  $\rho \vec{V} \cdot \vec{g}$ .

Sendo  $k$  a condutividade térmica,  $h_i$  a entalpia de formação da espécie  $i$ ,  $\vec{\tau} = -p\vec{I} + \vec{S}$ .

Portanto:

$$\rho \frac{De}{Dt} = \nabla \cdot \left( k\nabla T - \sum \rho Y_i \vec{V}_i h_i \right) + \nabla \cdot \left( \vec{V} \cdot \left[ -p\vec{I} + \vec{S} \right] \right) + \rho \vec{V} \cdot \vec{g} \quad (15)$$

Multiplicando a Eq.(11) por  $\vec{V}$ , obtemos:

$$\rho \frac{1}{2} \frac{D\vec{V}^2}{Dt} = \rho \vec{V} \cdot \vec{g} - \vec{V} \cdot \nabla p + \vec{V} \cdot \nabla \cdot \vec{S} \quad (16)$$

Subtraindo ambas as equações, obtemos:

$$\frac{Du}{Dt} = \nabla \cdot \left( k\nabla T - \sum \rho Y_i \vec{V}_i h_i \right) - p\nabla \cdot \vec{V} + \nabla \cdot \vec{V} : \vec{S} \quad (17)$$

Utilizando  $u = h - p/\rho$ :

$$\rho \left[ \frac{Dh}{Dt} - \frac{D}{Dt} \left( \frac{p}{\rho} \right) \right] = \nabla \cdot \left( k\nabla T - \sum \rho Y_i \vec{V}_i h_i \right) - p\nabla \cdot \vec{V} + \nabla \cdot \vec{V} : \vec{S} \quad (18)$$

Pela regra do quociente:

$$\frac{D}{Dt} \left( \frac{p}{\rho} \right) = \frac{1}{\rho^2} \left( p \frac{D\rho}{Dt} - \rho \frac{Dp}{Dt} \right) \quad (19)$$

Pela equação da conservação de massa, temos:

$$\frac{D\rho}{Dt} = -\rho \nabla \cdot \vec{V} \quad (20)$$

Portanto:

$$\rho \left[ \frac{Dh}{Dt} - p \frac{1}{\rho} \nabla \cdot \vec{V} - \frac{1}{\rho} \frac{Dp}{Dt} \right] = \nabla \cdot \left( k \nabla T - \sum \rho Y_i \vec{V}_i h_i \right) - p \nabla \cdot \vec{V} + \nabla \vec{V} : \vec{S} \quad (21)$$

$$\rho \frac{Dh}{Dt} = \frac{Dp}{Dt} + \nabla \cdot \left( k \nabla T - \sum \rho Y_i \vec{V}_i h_i \right) + \nabla \vec{V} : \vec{S} \quad (22)$$

Como  $\vec{S} = \mu \nabla \vec{V}$ :

$$\rho \frac{Dh}{Dt} = \frac{Dp}{Dt} + \nabla \cdot \left( k \nabla T - \sum \rho Y_i \vec{V}_i h_i \right) + \mu \nabla \vec{V} : \nabla \vec{V} \quad (23)$$

A entalpia total é a soma da entalpia de formação das espécies ( $h_i^0$ ) e a variação de entalpia sensível ( $h_T$ ), isto é:

$$h = \sum Y_i h_i^0 + \sum_i \int Y_i c_{p_i} dT = \sum_i Y_i h_i^0 + h_T \quad (24)$$

Logo:

$$\rho \frac{Dh_T}{Dt} + \rho \frac{D}{Dt} \left( \sum_i Y_i h_i^0 \right) = \frac{Dp}{Dt} + \nabla \cdot \left( k \nabla T - \sum_i \rho Y_i \vec{V}_i (h_i^0 + h_{T_i}) \right) + \mu \nabla \vec{V} : \nabla \vec{V} \quad (25)$$

$$\rho \frac{Dh_T}{Dt} = \frac{Dp}{Dt} - \sum_i \left[ \rho \frac{D}{Dt} (Y_i h_i^0) + \nabla \cdot \left( \rho Y_i \vec{V}_i (h_i^0 + h_{T_i}) \right) \right] + \nabla \cdot (k \nabla T) + \mu \nabla \vec{V} : \nabla \vec{V} \quad (26)$$

Pela lei de Fick,  $Y_i \vec{V}_i = -\mathcal{D}_i \nabla Y_i$ . Logo:

$$\rho \frac{Dh_T}{Dt} = \frac{Dp}{Dt} - \sum_i \left[ \rho \frac{D}{Dt} (Y_i h_i^0) - \nabla \cdot (\rho \mathcal{D}_i \nabla Y_i (h_i^0 + h_{T_i})) \right] + \nabla \cdot (k \nabla T) + \mu \nabla \vec{V} : \nabla \vec{V} \quad (27)$$

Pela equação da conservação das espécies:

$$\rho \frac{Dh_T}{Dt} = \frac{Dp}{Dt} - \sum_i \left[ \rho (s_i h_i^0 \omega + r_i h_i^0 N) \dot{m} + \nabla \cdot (\rho \mathcal{D}_i \nabla Y_i h_{T_i}) \right] + \nabla \cdot (k \nabla T) + \mu \nabla \vec{V} : \nabla \vec{V} \quad (28)$$

Sendo  $\sum_i s_i h_i^0 \omega = Q\omega$  o calor gerado na reação química,  $\sum_i r_i h_i^0 N \dot{m} = -N \dot{m} L_h$  o calor de vaporização das gotas, sendo  $L_h$  o calor latente de vaporização do combustível, e utilizando  $h_T = c_p T$ , sendo  $c_p$  o calor específico a pressão constante:

$$\rho c_p \frac{DT}{Dt} = \frac{Dp}{Dt} - \sum_i \nabla \cdot (\rho \mathcal{D}_i \nabla Y_i h_{T_i}) + \nabla \cdot (k \nabla T) + \mu \nabla \vec{V} : \nabla \vec{V} + \rho (Q\omega - N \dot{m} L_h) \quad (29)$$

O termo de transferência de calor por difusão de massa apenas é relevante quando as espécies apresentam grandes diferenças em suas massas moleculares; caso contrário, como neste trabalho, a velocidade de difusão e os modos de energia são semelhantes, de forma que este fenômeno pode ser desconsiderado. Assim, a equação de conservação da energia é:

$$\rho c_p \frac{DT}{Dt} = \frac{Dp}{Dt} + \nabla \cdot (k \nabla T) + \mu \nabla \vec{V} : \nabla \vec{V} + \rho (Q\omega - N \dot{m} L_h) \quad (30)$$

### 3.1.5 Equação de estado

A equação de estado, naturalmente, não se trata de uma equação de conservação, mas é necessária para fechar o sistema de equações. A equação de estado é:

$$p = \rho R T \quad (31)$$

Onde  $R$  é a constante universal dos gases.

### 3.2. Condições de contorno

As condições de contorno, exibidas na Fig.(7), são:

$$Y_F = Y_{F_{-\infty}}, \quad Y_O = 0, \quad T = T_{-\infty} \quad \text{em } x \rightarrow -\infty \quad (32)$$

$$Y_F = 0, \quad Y_O = Y_{O_{\infty}}, \quad T = T_{\infty} \quad \text{em } x \rightarrow \infty \quad (33)$$

Além disso, considera-se que o problema possui simetria ao redor do eixo  $x$ .

### 3.3. Descrição dos termos de fonte

A reação química que ocorre apresenta o seguinte mecanismo:



Ou seja, 1 mol de combustível reage com  $\nu$  moles de oxigênio, produzindo  $1 + \nu$  moles de produtos de combustão. Assim, combustível e oxidante são consumidos a uma taxa  $s_i \omega$  (medido em moles por unidade de tempo) na combustão, e energia é gerada a uma taxa  $Q\omega$ .

O processo de reação química pode ser modelado como uma reação de Arrhenius de passo único, que assume que a taxa de reação depende do exponencial do inverso da temperatura. Assim, a taxa de reação é:

$$k = \Gamma \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right) \quad (35)$$

Onde  $\Gamma$  é o fator de frequência, que expressa a frequência das colisões entre as moléculas de reagentes,  $E_a$  é a energia de ativação da reação química e  $R$  é a constante universal dos gases. O termo exponencial representa a probabilidade de que a colisão entre as moléculas resulte em uma reação química. A taxa de consumo de espécies

químicas é:

$$\omega = \Gamma Y_O Y_F \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right) \quad (36)$$

Sendo  $\nu$  o número de moles de oxidante necessários para reagir com um mol de combustível. Podemos escrever o termo de fonte de espécies químicas de forma unificada como:

$$\dot{N}_i = -s_i \omega + \frac{s_i - \nu}{1 - \nu} N \dot{m} \quad (37)$$

Sendo  $s_F = 1$  e  $s_O = \nu$ .

### 3.4. Adimensionalização das equações de conservação

As seguintes variáveis adimensionais serão utilizadas, baseadas em valores característicos, indicados pelo subscrito  $c$ :

$$t^* \equiv \frac{t}{t_c}, \quad \vec{V}^* \equiv \frac{\vec{V}}{V_c}, \quad T^* \equiv \frac{T}{T_c}, \quad p^* \equiv \frac{p}{p_c}, \quad Y_i^* \equiv \frac{Y_i}{Y_{i,c}}, \quad \rho^* \equiv \frac{\rho}{\rho_c} \quad (38)$$

O operador  $\nabla$  é adimensionalizado como  $\nabla^* \equiv L_c \nabla$ , sendo  $L_c$  o comprimento característico do problema, e as variáveis de transporte adimensionalizadas são:

$$\mu^* \equiv \frac{\mu}{\mu_c}, \quad k^* \equiv \frac{k}{k_c}, \quad \mathcal{D}^* \equiv \frac{\mathcal{D}}{\mathcal{D}_c} \quad (39)$$

Substituindo as variáveis adimensionais nas Eqs.(3), (11), (30), (13) e (31) e reorganizando-as, obtemos:

$$\frac{L_c}{V_c t_c} \frac{\partial \rho^*}{\partial t^*} + \nabla^* \cdot (\rho^* \vec{V}^*) = 0 \quad (40)$$

$$\rho^* \left( \frac{L_c}{V_c t_c} \frac{\partial \vec{V}^*}{\partial t^*} + \vec{V}^* \cdot \nabla^* \vec{V}^* \right) = -\frac{p_c}{V_c^2 \rho_c} \nabla^* p^* + \frac{\mu_c}{V_c \rho_c L_c} \nabla^* (\mu^* \nabla^* \vec{V}^*) + \rho^* \frac{L_c}{V_c^2} \vec{g} \quad (41)$$

$$\begin{aligned} \rho^* \left( \frac{L_c}{V_c t_c} \frac{\partial T^*}{\partial t^*} + \vec{V}^* \cdot \nabla^* T^* \right) &= \frac{p_c}{T_c \rho_c c_p} \left( \frac{L_c}{V_c t_c} \frac{\partial p^*}{\partial t^*} + \vec{p}^* \cdot \nabla^* p^* \right) + \\ \frac{k_c}{\rho_c c_p L_c V_c} \nabla^* \cdot (k^* \nabla^* T^*) &+ \frac{\mu_c V_c}{T_c \rho_c c_p L_c} \mu^* \nabla^* \vec{V}^* : \nabla^* \vec{V}^* + \frac{L_c \rho^*}{T_c c_p V_c} (Q\omega - N\dot{m}L_h) \end{aligned} \quad (42)$$

$$\begin{aligned} \rho^* \left( \frac{L_c}{V_c t_c} \frac{\partial Y_i^*}{\partial t^*} + \vec{V}^* \cdot \nabla^* Y_i^* \right) &= \frac{\mathcal{D}_{i_c}}{V_c L_c} \nabla^* \cdot (\rho^* \mathcal{D}_i^* \nabla^* Y_i^*) + \\ \frac{L_c \rho^*}{V_c Y_{i_c}} \left( -s_i \omega + \frac{s_i - \nu}{1 - \nu} N\dot{m} \right) & \end{aligned} \quad (43)$$

$$\frac{p_c}{\rho_c R T_c} p^* = \rho^* T^* \quad (44)$$

As equações acima podem ser descritas pelos seguintes grupos adimensionais apresentados na Tab.(1).

Tabela 1 – Grupos adimensionais relevantes

Grupo adimensional	Definição	Interpretação
Número de Strouhal	$St = \frac{L_c}{V_c t_c}$	Razão entre tempo característico de advecção e o tempo característico do problema
Número de Reynolds	$Re = \frac{\rho_c V_c L_c}{\mu_c}$	Razão entre forças inerciais e forças viscosas.
Número de Mach	$Ma = \frac{V_c}{\sqrt{\gamma R T_c}} = V_c \sqrt{\frac{\rho_c}{\gamma p_c}}$	Razão entre a velocidade do escoamento e velocidade do som.
Número de Peclet	$Pe = \frac{V_c L_c}{\alpha_c}$	Razão entre a taxa de advecção e condução
Número de Lewis	$Le = \frac{\alpha}{D}$	Razão entre a difusibilidade de calor e de massa.
Número de Prandtl	$Pr = \frac{\mu}{\rho \alpha}$	Razão entre a difusibilidade de quantidade de movimento e de calor.
Número de Froude	$Fr = \frac{V_c}{\sqrt{g L_c}}$	Razão entre forças inerciais e forças de corpo.
Número de Damköhler	$Da = \frac{L_c \Gamma Y_{O_c}}{V_c}$	Razão entre a taxa de reação química e taxa de advecção.

Além disso, definimos os seguintes parâmetros adimensionais:

$$Q^* \equiv \frac{Q}{c_p T_c}, \quad L^* \equiv \frac{L_h}{Q}, \quad T_a^* \equiv \frac{E_a}{R T_c}, \quad \omega^* \equiv \frac{L_c \omega}{V_c Y_{F_c}}, \quad \delta^* \equiv \frac{L_c}{\rho_c Y_{F_c} V_c} N \dot{m} \quad (45)$$

Sendo  $\delta^*$  o termo fonte correspondente à evaporação de gotas. Portanto, as equações de conservação podem ser escritas em função das variáveis e dos grupos adimensionais como:

$$St \frac{\partial \rho^*}{\partial t^*} + \nabla^* \cdot (\rho^* \vec{V}^*) = 0 \quad (46)$$

$$\rho^* \left( St \frac{\partial \vec{V}^*}{\partial t^*} + \vec{V}^* \cdot \nabla^* \vec{V}^* \right) = -\frac{1}{\gamma Ma^2} \nabla^* p^* + \frac{1}{Re} \nabla^* (\mu^* \nabla^* \vec{V}^*) + \frac{\rho^*}{Fr^2} \quad (47)$$

$$\begin{aligned} \rho^* \left( St \frac{\partial T^*}{\partial t^*} + \vec{V}^* \cdot \nabla^* T^* \right) &= \frac{V_c^2}{c_p T_c} \frac{1}{\gamma Ma^2} \left( St \frac{\partial p^*}{\partial t^*} + \vec{p}^* \cdot \nabla^* p^* \right) + \\ \frac{1}{Pe} \nabla^* \cdot (k^* \nabla^* T^*) &+ \frac{V_c^2}{c_p T_c} \frac{1}{Re} \mu^* \nabla^* \vec{V}^* : \nabla^* \vec{V}^* + \rho^* Y_{F_c} (Q^* \omega^* - \delta^* L^*) \end{aligned} \quad (48)$$

$$\begin{aligned} \rho^* \left( St \frac{\partial Y_i^*}{\partial t^*} + \vec{V}^* \cdot \nabla^* Y_i^* \right) &= \frac{1}{Pe Le_i} \nabla^* \cdot (\rho^* \mathcal{D}_i^* \nabla^* Y_i^*) \\ &\frac{\rho^* Y_{F_c}}{Y_{i_c}} \left( -s_i \omega^* + \frac{s_i - \nu}{1 - \nu} \delta^* \right) \end{aligned} \quad (49)$$

$$p^* = \rho^* T^* \quad (50)$$

Onde a taxa de reação química adimensional é:

$$\omega^* = Da Y_O^* Y_F^* \exp \left( -\frac{T_a^*}{T^*} \right) \quad (51)$$

A equação de energia ainda pode ser escrita como:

$$\begin{aligned} \rho^* \left( St \frac{\partial T^*}{\partial t^*} + \vec{V}^* \cdot \nabla^* T^* \right) &= \frac{R}{c_p} \left( St \frac{\partial p^*}{\partial t^*} + \vec{p}^* \cdot \nabla^* p^* \right) + \\ \frac{1}{Pe} \nabla^* \cdot (k^* \nabla^* T^*) &+ \frac{\gamma R}{c_p} \frac{Ma^2}{Re} \mu^* \nabla^* \vec{V}^* : \nabla^* \vec{V}^* + \rho^* Y_{F_c} (Q^* \omega^* - \delta^* L^*) \end{aligned} \quad (52)$$

Se considerarmos que  $Ma \ll 1$ , a equação de conservação de quantidade de movimento implica que  $\nabla^* p^* \ll 1$ , de forma que a pressão pode ser considerada constante no campo de escoamento. Como  $R/c_p \sim 1$ , fica claro que o termo de dissipação viscosa pode ser desprezado, a menos que  $Re \ll 1$ . Considerando regime permanente, as equações se

reduzem a:

$$\nabla^* \cdot (\rho^* \vec{V}^*) = 0 \quad (53)$$

$$\rho^* \vec{V}^* \cdot \nabla^* \vec{V}^* = \frac{1}{Re} \nabla^* (\mu^* \nabla^* \vec{V}^*) + \frac{\rho^*}{Fr^2} \quad (54)$$

$$\rho^* \vec{V}^* \cdot \nabla^* T^* = \frac{1}{Pe} \nabla^* \cdot (k^* \nabla^* T^*) + \rho^* Y_{Fc} (Q^* \omega^* - \delta^* L^*) \quad (55)$$

$$\rho^* \vec{V}^* \cdot \nabla^* Y_i^* = \frac{1}{PeLe_i} \nabla^* \cdot (\rho^* \mathcal{D}_i^* \nabla^* Y_i^*) + \frac{\rho^* Y_{Fc}}{Y_{ic}} \left( -s_i \omega^* + \frac{s_i - \nu}{1 - \nu} \delta^* \right) \quad (56)$$

$$p^* = \rho^* T^* \quad (57)$$

Apesar de existirem grandes variações na temperatura no campo de escoamento, considerar-se-á que as propriedades termodinâmicas e de transporte são constantes. Assim, utiliza-se  $\rho^* = k^* = \mathcal{D}^* = \mu^* = 1$ . O número de Lewis será considerado unitário para permitir um desenvolvimento analítico mais completo. Portanto, as equações de conservação se reduzem a:

$$\nabla^* \cdot \vec{V}^* = 0 \quad (58)$$

$$\vec{V}^* \cdot \nabla^* \vec{V}^* = \frac{1}{Re} \nabla^{*2} \vec{V}^* + \frac{1}{Fr^2} \quad (59)$$

$$\vec{V}^* \cdot \nabla^* T^* = \frac{1}{Pe} \nabla^{*2} T^* + Y_{Fc} (Q^* \omega^* - \delta^* L^*) \quad (60)$$

$$\vec{V}^* \cdot \nabla^* Y_i^* = \frac{1}{Pe} \nabla^{*2} Y_i^* + \frac{Y_{Fc}}{Y_{ic}} \left( -s_i \omega^* + \frac{s_i - \nu}{1 - \nu} \delta^* \right) \quad (61)$$

Expandindo o campo de velocidades em série de Taylor, obtemos:

$$\vec{V} = \vec{V}|_0 + \nabla \vec{V}|_0 \vec{x} + \dots \quad (62)$$

Se a origem for um ponto de estagnação, temos  $\vec{V}|_0 = 0$ . Desprezando as derivadas de segunda ordem, obtemos:

$$\vec{V} \approx \frac{\partial u_x}{\partial x} \Big|_0 x \hat{x} + \frac{\partial u_r}{\partial r} \Big|_0 r \hat{r} \quad (63)$$

Da equação de conservação de massa obtemos que  $\partial u_x / \partial x = -\partial u_r / \partial r$ , logo, usando

$$\frac{\partial u_r}{\partial r} \Big|_0 = A \quad (64)$$

Temos:

$$\vec{V} = -Ax \hat{x} + Ar \hat{r} \quad (65)$$

Sendo  $A$  a taxa de estiramento, representando a taxa com a qual uma partícula de fluido se deforma linearmente. Tomando  $L_c = \sqrt{\alpha/A}$  e  $V_c = \sqrt{A\alpha}$ , temos  $Pe = 1$ . O campo de escoamento pode ser escrito como  $\vec{V}^* = r^* \hat{r} - x^* \hat{x}$ , sendo  $r^*$  e  $x^*$  as coordenadas  $r$  e

$x$  adimensionalizadas. Expandindo a equação de conservação das espécies, adotando coordenadas cilíndricas e considerando simetria ao redor do eixo  $x$ , obtemos:

$$-x^* \frac{\partial Y_i^*}{\partial x^*} + r^* \frac{\partial Y_i^*}{\partial r^*} = \frac{\partial^2 Y_i^*}{\partial x^{*2}} + \frac{1}{r^*} \frac{\partial Y_i^*}{\partial r^*} + \frac{\partial^2 Y_i^*}{\partial r^{*2}} + \frac{Y_{F_c}}{Y_{i_c}} \left( -s_i \omega^* + \frac{s_i - \nu}{1 - \nu} \delta^* \right) \quad (66)$$

Nas proximidades do plano de estagnação,  $x^* \ll 1$  de forma que devemos ter  $\partial Y_i^* / \partial x^* \gg 1$ . Assim, podemos desprezar os gradientes nas outras direções.

$$\frac{d^2 Y_i^*}{dx^{*2}} + x^* \frac{dY_i^*}{dx^*} = -\frac{Y_{F_c}}{Y_{i_c}} \left( -s_i \omega^* + \frac{s_i - \nu}{1 - \nu} \delta^* \right) \quad (67)$$

Da mesma forma, a equação de conservação de energia:

$$\frac{d^2 T^*}{dx^{*2}} + x^* \frac{dT^*}{dx^*} = -Y_{F_c} (Q^* \omega^* - \delta^* L^*) \quad (68)$$

As equações de conservação das espécies individuais são:

$$\frac{d^2 Y_F^*}{dx^{*2}} + x^* \frac{dY_F^*}{dx^*} = \omega^* - \delta^* \quad (69)$$

$$\frac{d^2 Y_O^*}{dx^{*2}} + x^* \frac{dY_O^*}{dx^*} = \frac{Y_{F_c}}{Y_{i_c}} \nu \omega^* \quad (70)$$

Utilizando como valores característicos  $T_c = \nu Q / c_p Y_{O_\infty}$ ,  $Y_{O_c} = Y_{O_\infty}$  e  $Y_{F_c} = Y_{O_\infty} / \nu$  obtemos:

$$\frac{d^2 T^*}{dx^{*2}} + x^* \frac{dT^*}{dx^*} = -\omega^* + \delta^* L^* \quad (71)$$

$$\frac{d^2 Y_F^*}{dx^{*2}} + x^* \frac{dY_F^*}{dx^*} = \omega^* - \delta^* \quad (72)$$

$$\frac{d^2 Y_O^*}{dx^{*2}} + x^* \frac{dY_O^*}{dx^*} = \omega^* \quad (73)$$

A consideração de que  $Da \gg 1$  leva, a partir da Eq.(51),  $Y_F^* Y_O^* \ll 1$ . Isto ocorre se  $Y_F^* \ll 1$  e  $Y_O^* \ll 1$  para todo o domínio, o que certamente não é verdade, ou se combustível e oxidante não coexistirem em nenhum ponto do domínio (limite de Burke-Schumann). Assim, considera-se que há apenas oxidante em  $x^* > x_f^*$  e que há apenas combustível em  $x^* < x_f^*$ .

As condições de contorno são:

$$Y_F^* = \nu \frac{Y_{F\infty}}{Y_{O\infty}} = \Phi, \quad Y_O^* = 0, \quad T^* = \frac{\nu c_p}{Y_{O\infty} Q} T_{-\infty} = T_{-\infty}^*, \quad \text{em } x^* \rightarrow -\infty \quad (74)$$

$$Y_F^* = 0, \quad Y_O^* = 1, \quad T^* = \frac{\nu c_p}{Y_{O\infty} Q} T_{\infty} = T_{\infty}^*, \quad \text{em } x^* \rightarrow \infty \quad (75)$$

$$Y_F^* = 0, \quad Y_O^* = 0, \quad T^* = T_f^*, \quad \text{em } x^* = x_f^* \quad (76)$$

Onde  $\Phi$  é a fração mássica de combustível. Os valores dos grupos adimensionais relevantes ao problema estão relacionados a seguir.

$$\begin{aligned} St = 1, \quad Re = \frac{\rho \alpha}{\mu} = \frac{1}{Pr}, \quad Ma \ll 1, \quad Pe = 1, \\ Le = 1, \quad Fr = A \sqrt{\frac{\sqrt{\alpha/A}}{g}}, \quad Da = \frac{BY_{O\infty}}{A} \gg 1 \end{aligned} \quad (77)$$

### 3.5. Formulação de Schvab-Zeldovich

A formulação de Schvab-Zeldovich visa eliminar o termo não linear  $\omega^*$  através da redução do número de equações [16]. Inicialmente, definimos o seguinte operador linear:

$$\mathcal{L}[f] = \frac{d^2 f}{dx^{*2}} + x^* \frac{df}{dx^*} \quad (78)$$

Assim, as Eq.(71), (72) e (73) podem ser reduzidas a:

$$\mathcal{L}[Y_F^*] = \omega^* - \delta^* \quad (79)$$

$$\mathcal{L}[Y_O^*] = \omega^* \quad (80)$$

$$\mathcal{L}[T^*] = -\omega^* + \delta^* L^* \quad (81)$$

Temos:

$$\mathcal{L}[T^* + L^* Y_F^*] = -(1 - L^*)\omega^* \quad (82)$$

Logo, vemos que:

$$\frac{\mathcal{L}[T^* + L^* Y_F^*]}{1 - L^*} + L[Y_O^*] = 0 \quad (83)$$

A partir das propriedades dos operadores lineares, definindo a função excesso de entalpia adimensional como:

$$H = \frac{T^* + L^* Y_F^*}{1 - L^*} + Y_O^* \quad (84)$$

Obtemos:

$$\frac{d^2 H}{dx^{*2}} + x^* \frac{dH}{dx^*} = 0 \quad (85)$$

Da mesma forma, vemos que:

$$\mathcal{L}[Y_F^*] - L[Y_O^*] = -\delta^* \quad (86)$$

Definindo  $Z = Y_F^* - Y_O^* + 1$  como a função fração de mistura:

$$\frac{d^2 Z}{dx^{*2}} + x^* \frac{dZ}{dx^*} = -\delta^* \quad (87)$$

### 3.6. Condições de contorno

As condições de contorno das funções  $Z$  e  $H$  são:

$$H = \frac{T_\infty^*}{1 - L^*} + 1, \quad Z = 0 \quad \text{em} \quad x^* \rightarrow \infty \quad (88)$$

$$H = \frac{T_{-\infty}^* + L^* \Phi}{1 - L^*}, \quad Z = \Phi + 1 \quad \text{em} \quad x^* \rightarrow -\infty \quad (89)$$

$$H = \frac{T_f^* + L^*}{1 - L^*}, \quad Z = 1 \quad \text{em} \quad x^* = x_f^* \quad (90)$$

### 3.7. Mudança de variável

As Eq.(85) e (87) são válidas para um domínio infinito, isto é, para  $-\infty < x^* < \infty$ . Entretanto, é computacionalmente inviável resolver equações diferenciais definidas para domínios infinitos, de forma que é conveniente utilizar  $\xi = f(x^*)$  como variável

independente para o problema. Portanto, pela regra da cadeia:

$$\frac{d}{dx^*} = \frac{d\xi}{dx^*} \frac{d}{d\xi} \quad (91)$$

$$\begin{aligned} \frac{d^2}{dx^{*2}} &= \frac{d}{dx^*} \left[ \frac{d\xi}{dx^*} \frac{d}{d\xi} \right] = \frac{d\xi}{dx^*} \frac{d}{d\xi} \left[ \frac{d\xi}{dx^*} \frac{d}{d\xi} \right] = \frac{d\xi}{dx^*} \left[ \frac{d\xi}{dx^*} \frac{d^2}{d\xi^2} + \frac{d}{d\xi} \left( \frac{d\xi}{dx^*} \right) \frac{d}{d\xi} \right] = \\ &= \frac{d\xi}{dx^*} \left[ \frac{d\xi}{dx^*} \frac{d^2}{d\xi^2} + \frac{dx^*}{d\xi} \frac{d^2\xi}{dx^{*2}} \frac{d}{d\xi} \right] \end{aligned} \quad (92)$$

$$\frac{d^2}{dx^{*2}} = \left( \frac{d\xi}{dx^*} \right)^2 \frac{d^2}{d\xi^2} + \frac{d^2\xi}{dx^{*2}} \frac{d}{d\xi} \quad (93)$$

Assim, a equação do excesso de entalpia se torna em:

$$\frac{d^2H}{d\xi^2} \left( \frac{d\xi}{dx^*} \right)^2 + \frac{dH}{d\xi} \left( \frac{d^2\xi}{dx^{*2}} + x^* \frac{d\xi}{dx^*} \right) = 0 \quad (94)$$

Escolhendo  $\xi = (\text{erf}(x^*/\sqrt{2}) + 1)/2$  o termo entre parênteses se anula, pois  $\mathcal{L}[\xi] = 0$ , levando a:

$$\frac{d^2H}{d\xi^2} = 0 \quad (95)$$

Efetuando o mesmo procedimento para a equação da fração de mistura, obtemos:

$$\frac{d^2Z}{d\xi^2} = -2\pi\delta^* \exp(x^{*2}) \quad (96)$$

Nesta nova variável, as condições de contorno são:

$$H = \frac{\theta_\infty}{1 - L^*} + 1, \quad Z = 0 \quad \text{em} \quad \xi = 1 \quad (97)$$

$$H = \frac{T_{-\infty}^* + L^*\Phi}{1 - L^*}, \quad Z = \Phi + 1 \quad \text{em} \quad \xi = 0 \quad (98)$$

$$H = \frac{T_f^* + L^*}{1 - L^*}, \quad Z = 1 \quad \text{em} \quad \xi = \xi_f \quad (99)$$

### 3.8. Descrição do termo fonte das gotas

Considera-se que a temperatura das gotas é constante e igual à sua temperatura de ebulição, enquanto que a temperatura ambiente é considerada como sendo maior ou igual que a temperatura das gotas, de forma que as gotas não necessitem ser aquecidas, sendo que o calor fornecido pela chama é utilizado somente para vaporizar as gotas.

A equação de conservação de massa para uma gota isolada é:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{V}) = 0 \quad (100)$$

Utilizando coordenadas esféricas e considerando simetria radial, temos:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \rho V) = 0 \quad (101)$$

Introduzimos as seguintes variáveis adimensionais:

$$r^* = \frac{r}{a_0}, \quad V^* = V \frac{a_0}{\alpha}, \quad t^* = \frac{t}{t_c}, \quad \rho^* = \frac{\rho}{\rho_l} \quad (102)$$

Levando à:

$$\varepsilon \frac{\partial \rho^*}{\partial t^*} + \frac{1}{r^{*2}} \frac{\partial}{\partial r^*} (r^{*2} \rho^* V^*) = 0 \quad (103)$$

Onde  $a_0$  é o raio inicial da gota,  $\varepsilon = \rho_\infty / \rho_l$  e  $t_c$  é o tempo característico de vida da gota dado por  $t_c = \frac{a_0^2}{\alpha_\infty \varepsilon}$ .

Na condição de baixa pressão no ambiente, a massa específica do líquido ( $\rho_l$ ) é muito

maior que a massa específica do gás ( $\rho_\infty$ ), de forma que  $\varepsilon \ll 1$ , levando a:

$$\frac{d}{dr^*}(r^{*2} \rho^* V^*) = 0 \quad (104)$$

Integrando, obtém-se:

$$a^{*2} \rho^* V^* = -\lambda \quad (105)$$

Sendo  $\lambda$  a taxa de vaporização adimensional e  $a$  o raio externo da gota. Realizando-se um balanço de massa na superfície da gota, obtém-se que:

$$-4\pi a^{*2} \rho_l \frac{da}{dt} = 4\pi a^2 \rho_l V = \dot{m} \quad (106)$$

Ou, de forma adimensional:

$$-\frac{da^*}{dt^*} = V^* = \frac{\dot{m}}{4\pi a_0 \alpha \rho_c} = \lambda \quad (107)$$

Portanto:

$$a^{*2} \frac{da}{dt^*} = -\lambda(t^*) \quad (108)$$

Definindo-se  $\beta = -\lambda/a^*$  como a função de vaporização da gota:

$$a^* \frac{da}{dt^*} = -\beta(t^*) \quad (109)$$

De onde obtém-se por integração que:

$$a^{*2} \Big|_0^{t^*} = -2 \int_0^{t^*} \beta(t^*) dt^* \quad (110)$$

$$a^{*2} = 1 - 2 \int_0^{t^*} \beta(t^*) dt^* \quad (111)$$

Portanto, o raio da gota depende do histórico de vaporização desta. Como a gota segue o escoamento, a variável  $t^*$  pode ser trocada pela variável  $x^*$  pela seguinte relação:

$$\frac{dx^*}{dt^*} = -x^* \quad (112)$$

Logo:

$$a^* = \sqrt{1 + 2 \int_{x_i^*}^{x^*} \frac{\beta(x^*)}{x^*} dx^*} \quad (113)$$

Sendo  $x_i^*$  o ponto de injeção de combustível líquido. A função de vaporização é dada por [4]:

$$\beta = \log \left[ 1 + c_p \frac{T_\infty - T_B}{L} \right] \quad (114)$$

Ou, de forma adimensional:

$$\beta = \log \left[ 1 + Y_{O_\infty} \frac{T^*(x^*) - T_B^*}{\nu L^*} \right] \quad (115)$$

$$\beta = \log \left[ 1 + \frac{T^*(x^*) - T_B^*}{l^*} \right] \quad (116)$$

Sendo o calor latente reduzido à  $l^* = \frac{\nu L^*}{Y_{O_\infty}}$ . Como  $\lambda = \beta a^*$ , o termo fonte  $\delta^*$  é dado por:

$$\delta^* = 4\pi \frac{a_0 \alpha N}{A Y_{F_\infty}} \beta a = M \beta a \quad (117)$$

Sendo  $M$  o parâmetro de vaporização, dado por:

$$M = 8\pi^2 \frac{\nu a_0 \alpha N}{A Y_{O_\infty}} \quad (118)$$

Define-se  $x_a^*$  como sendo a posição em que todas as gotas já evaporaram, i.e., em que  $a^* = 0$ . Devido à consideração de que  $Da \gg 1$ , não deve haver combustível em  $x^* > x_f^*$ ,

de forma que é necessário que  $x_a^* < x_f^*$ . Como  $a^* = 0$  em  $x^* < x_i^*$  e em  $x^* > x_a^*$ , temos:

$$\delta^* = \begin{cases} M\beta a^*, & x_i^* < x^* < x_a^* \\ 0, & x^* < x_i^* \text{ ou } x_i^* > x_a^* \end{cases} \quad (119)$$

Portanto, a equação para  $Z$  pode ser escrita como:

$$\frac{d^2 Z}{d\xi^2} = \begin{cases} -M \exp(x^{*2})\beta a, & \xi_i < \xi < \xi_a \\ 0, & 0 < \xi < \xi_i \text{ ou } \xi_a < \xi < 1 \end{cases} \quad (120)$$

### 3.9. Solução

A partir das Eq.(95) e (120) e das condições de contorno a solução para  $Z$  e  $H$  podem ser obtidas, permitindo o cálculo de  $Y_F^*$ ,  $Y_O^*$  e  $T^*$  em todo o domínio do problema. Como a equação para  $Z$  é não-homogênea em uma região e homogênea no restante do domínio, as soluções devem ser obtidas separadamente e então acopladas. Entretanto, a solução para a região não-homogênea não pode ser calculada analiticamente, devendo-se recorrer a métodos numéricos.

#### 3.9.1 Solução analítica

A solução para a função  $H$  pode ser obtida por integração direta da Eq.(95)

$$H = A_1 \xi + A_2 \quad (121)$$

Sendo  $A_1$  e  $A_2$  constantes de integração. Substituindo a condição de contorno para  $\xi = 0$ , obtemos:

$$A_2 = \frac{T_{-\infty}^* + L^* \Phi}{1 - L^*} \quad (122)$$

E substituindo a condição de contorno para  $\xi = 1$ :

$$A_1 = \frac{T_{\infty}^* - T_{-\infty}^* - L^* \Phi}{1 - L^*} + 1 \quad (123)$$

Este resultado mostra que a temperatura da chama é totalmente dependente da sua posição. Tomando a definição de  $H$  e lembrando que  $Y_F^* = Y_O^* = 0$  na chama, obtemos:

$$T_F^* = (1 - L^*)H = (T_\infty^* - T_{-\infty}^* + L^*(1 - \Phi) + 1)\xi_f + T_{-\infty}^* + L^*\Phi \quad (124)$$

No intervalo  $\xi_a < \xi < 1$ , isto é, a depois do ponto de evaporação total das gotas, o termo da Eq.(120) é nulo, de forma que a solução é:

$$Z = B_1\xi + B_2 \quad (125)$$

Como  $Z = 1$  na chama e  $Z = 0$  em  $\xi = 1$ , então:

$$Z = \frac{\xi - 1}{\xi_f - 1}, \quad \xi_a < \xi < 1 \quad (126)$$

### 3.9.2 Solução numérica

Inicialmente, são arbitrados valores para  $\Phi$ ,  $M$ ,  $x_i$  e  $T_{-\infty}^*$ . Assume-se inicialmente que o perfil de  $Z$  é dado pela Eq.(126), e estimam-se valores para a posição da chama. Através de  $Z$ ,  $H$  pode ser calculado pela Eq.(121) e, conseqüentemente, a temperatura pode ser obtida por  $H$  e  $Z$ . A seguir,  $\beta$  e  $a$  são calculados pelas Eq.(116) e (113). Então,  $Z$  é calculado numericamente no intervalo  $\xi_f > \xi > 0$  e no intervalo  $\xi_f < \xi < 1$  pela seguinte fórmula:

$$Z_{i+1} = h^2 Z_i'' + 2Z_i - Z_{i-1} \quad (127)$$

Onde  $h$  é o passo de integração e  $Z_i'' = -M \exp(x_i^{*2}) a_i^* \beta_i$ . Esta solução calculada para  $Z$  ainda não é a solução da equação diferencial, embora seja mais próxima da solução do que o perfil considerado inicialmente. Portanto, utiliza-se a solução obtida para recalcular  $H$ ,  $T^*$ ,  $\beta$  e  $a^*$ , até que a distância euclidiana entre duas soluções consecutivas, dada por  $d = \sum_i (Z_i^{(n)} - Z_i^{(n-1)})^2$  seja muito pequena.

Esta solução satisfaz à equação diferencial, mas não satisfaz a condição de contorno

em  $\xi = 0$ . Assim o valor estimado para  $\xi_f$  deve ser ajustado de modo que a condição de contorno seja satisfeita.

## 4. RESULTADOS

No presente modelo, vamos considerar uma chama difusiva na configuração de fluxos de reagentes contracorrentes de combustível etanol ( $C_2H_6O$ ) reagindo com oxigênio. As seguintes propriedades constantes são descritas por:  $Q = 29.700$  kJ/kg,  $L_h = 846$  kJ/kg,  $c_p = 1,0$  kJ/kgK,  $T_B = 351$  K e  $\nu = 2,087$ , assumindo a seguinte reação de passo único:

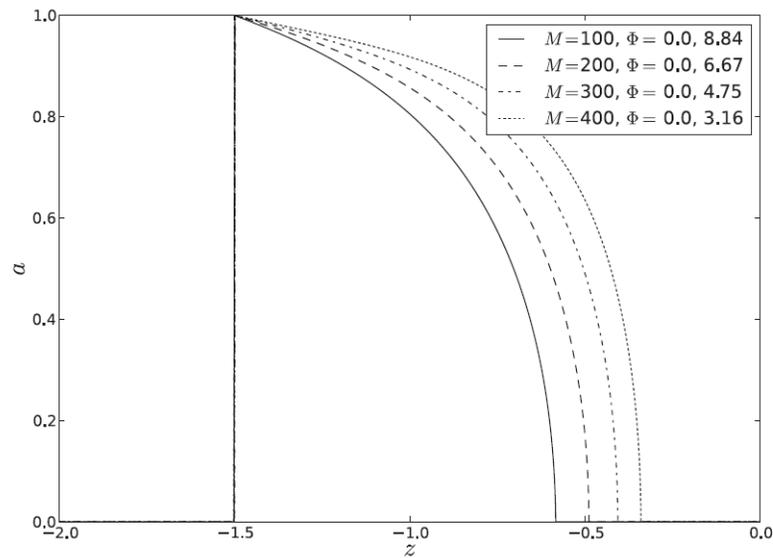


Além disso, utiliza-se  $Y_{O_\infty} = 0,21$  e  $T_\infty = 300$  K. Assim, as propriedades físicas adimensionais são  $T_B^* = 0,1174$ ,  $L^* = 0,02848$ ,  $l^* = 0,2831$  e  $T_\infty^* = 0,1004$ .

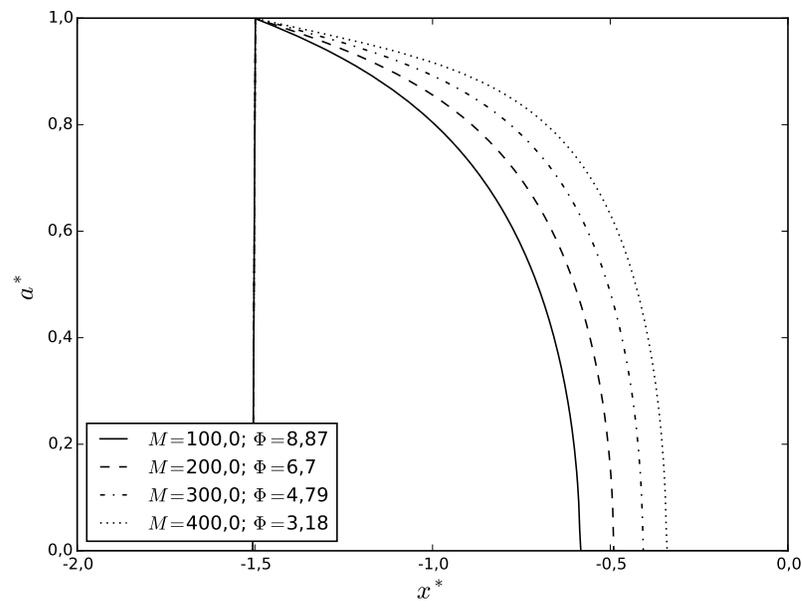
Devemos analisar a influência da fração mássica de combustível  $\Phi$ , do parâmetro de vaporização  $M$ , da posição de injeção  $x_i^*$  e da temperatura do gás  $T_{-\infty}^*$  sobre o comportamento dos perfis de temperatura e concentração. O valor de  $\Phi$  é limitado pela condição física de que  $Y_F < 1$ , logo,  $Y_F^* < \nu/Y_{O_\infty} = 9,938$ .

### 4.1. Validação dos resultados

O método descrito foi validado através da comparação dos resultados obtidos com os de Maionchi [16] e através da reprodução destes. Todos os resultados mostraram concordância, bem como a interpretação destes. Como exemplo, exibe-se na Fig.(9) a evolução do raio das gotas a partir da posição de injeção até a posição de evaporação para  $x_i^* = -1,5$ ,  $T_{-\infty}^* = 2T_B^*$  e  $M$  variando entre 100 e 400, para os casos correspondentes a  $\Phi_{max}$ . A Fig.(9(a)) exibe o resultado obtido por Maionchi e a Fig.(9(b)) exibe o resultado obtido neste trabalho.



(a) Resultado obtido por Maionchi (extraído de [16]).



(b) Resultado obtido através do método descrito.

Figura 9 – Raio das gotas ao longo do escoamento.

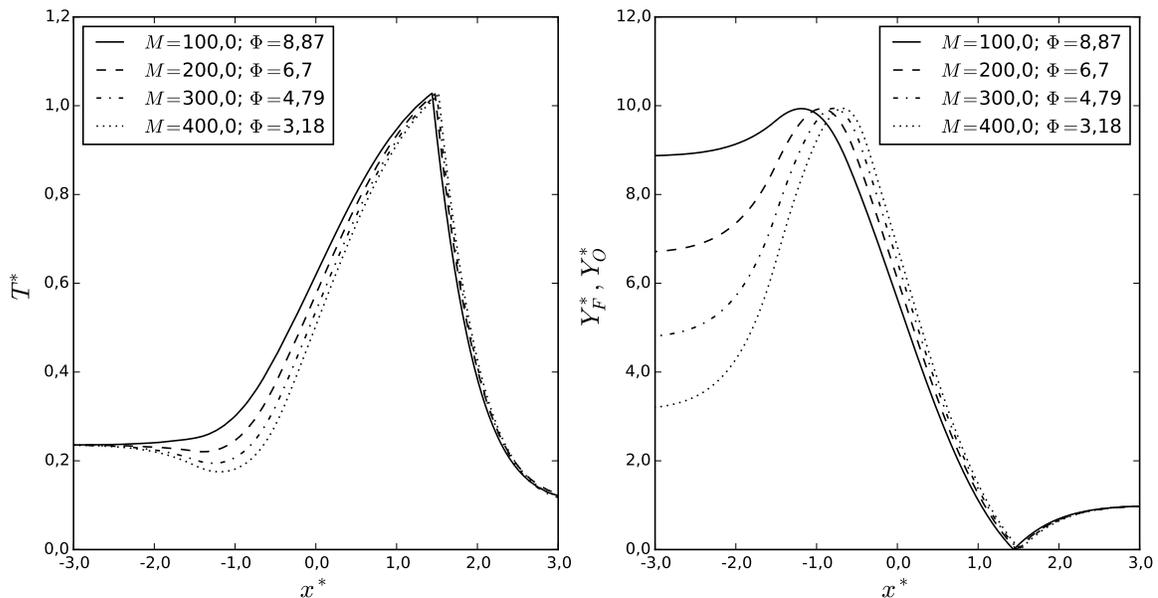
Percebe-se que os perfis obtidos para o raio das gotas são muito parecidos nos dois gráficos, bem como a posição de evaporação das gotas. Além disso, os valores obtidos para  $\Phi_{max}$  em cada caso, exibidos na legenda, são muito próximos. A similaridade entre os resultados obtidos neste trabalho e no de Maionchi mostram que o método adotado e descrito na metodologia é adequado.

Verificou-se que a evolução do raio das gotas apresenta comportamento bastante parecido em qualquer caso. Pode se perceber pela Fig.(9) que um aumento no parâmetro de vaporização retarda a evaporação total das gotas. Isto ocorre porque a quantidade de gotas é proporcional a  $M$ , de forma que um maior número de gotas vão necessitar de maior tempo para evaporar completamente, aumentando a distância percorrida por estas, como se verifica.

#### 4.2. Influência do parâmetro de vaporização $M$

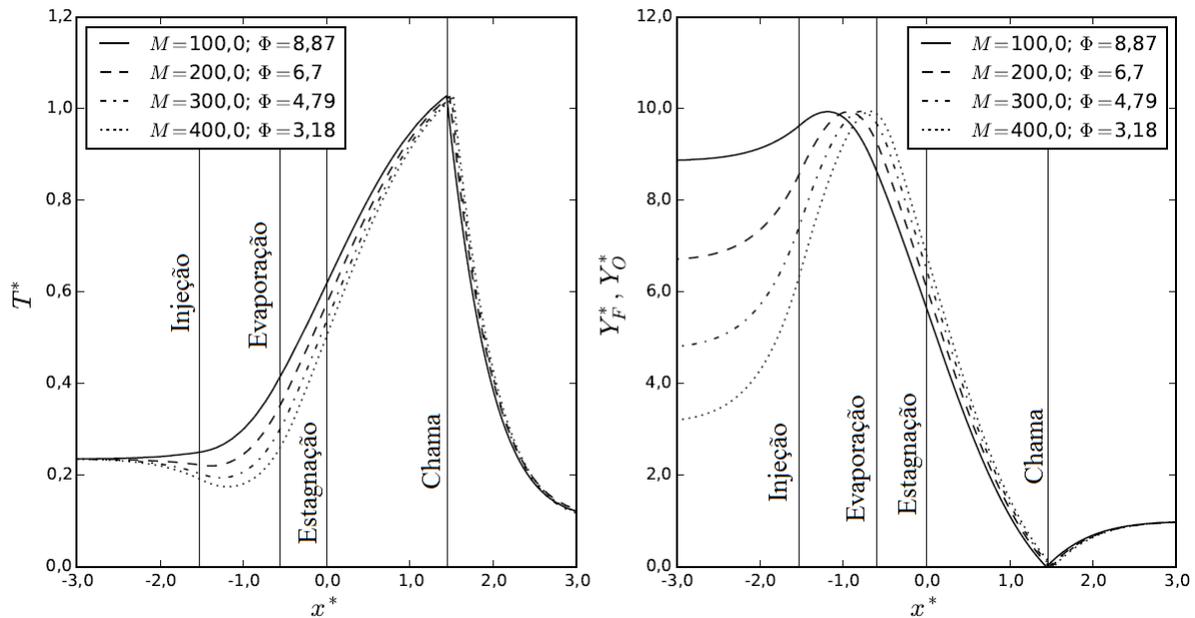
O problema foi resolvido para  $x_i^* = -1,5$ ,  $T_{-\infty}^* = 2T_B$  e  $M = 100; 200; 300; 400$ . Os perfis de temperatura e de concentração de combustível e oxidante estão exibidos na Fig.(10) para o caso  $\Phi = \Phi_{max}$ .

Figura 10 – Perfis de temperatura e de concentração de combustível para  $x_i^* = -1,5$ ,  $T_{-\infty}^* = 2T_B^*$  e  $\Phi = \Phi_{max}$ .



A Fig.(11) exibe a nomenclatura utilizada acerca das posições ao longo do campo de escoamento.

Figura 11 – Nomenclatura utilizada.



A posição de injeção, neste caso, é  $x^* = -1,5$ . A posição de evaporação é o ponto do domínio em que todas as gotas já evaporaram, neste caso,  $x^* = 0,58$  para  $M = 100$ . O ponto de estagnação coincide com a origem, como mostra a Fig.(7). A chama se estabelece no ponto em que a concentração de reagentes se anula, ou na região em que a temperatura é máxima. Na região correspondente a  $x^* < x_f^*$  o perfil de concentração se refere ao combustível, e na região correspondente a  $x^* > x_f^*$  o perfil de concentração se refere ao oxidante.

A Fig.(10) mostra que, quando  $\Phi = \Phi_{max}$ , o parâmetro  $M$  influencia fracamente a temperatura da chama e a sua posição, e que a temperatura na região de injeção de combustível diminui com o aumento de  $M$ . Isto ocorre porque  $M$  é proporcional ao número de gotas no spray e inversamente proporcional à taxa de estiramento. Assim, um aumento em  $M$  equivale a um aumento no número de gotas ou à uma diminuição na taxa de estiramento, ou seja, na taxa de dispersão das gotas. Assim, há mais combustível na fase líquida, requerendo maior quantidade de calor para evaporá-lo, e também uma concentração maior de combustível.

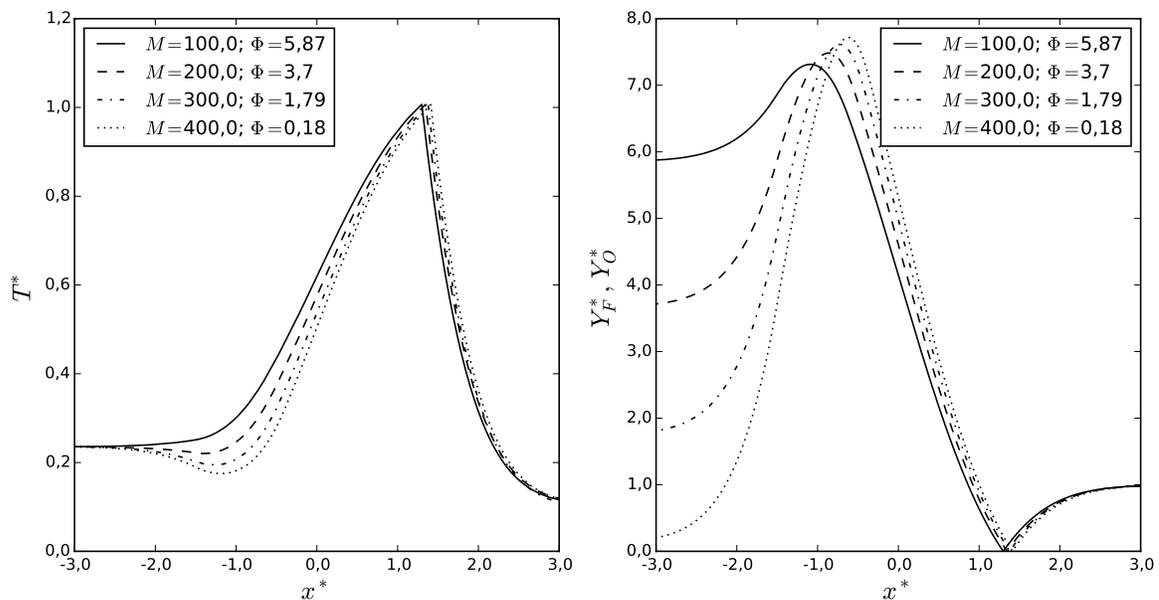
A influência de  $M$  sobre o perfil de temperatura pode ser explicada também observando-se que, pela Eq.(120), a medida que  $M$  cresce o produto  $\beta a$  deve diminuir, para que a

mesma ordem de grandeza seja mantida. Como  $a$  é função de  $\beta$ , e este é função da temperatura na região com gotas, a temperatura deve diminuir conforme  $M$  aumenta. No caso limite em que  $M \rightarrow \infty$ , ter-se-á  $T^* = T_B^*$  na região com gotas.

Também percebe-se pela Fig.(10) que  $\Phi_{max}$  é inversamente proporcional a  $M$ , pois quanto mais combustível gasoso for admitido juntamente com o gás, mais saturado de combustível estará o ambiente, inibindo a evaporação das gotas. Neste caso, a chama se estabeleceu entre  $x_f^* = 1,438$  e  $x_f^* = 1,523$  com temperatura entre  $T_f^* = 1,024$  e  $T_f^* = 1,028$ .

A Fig.(12) exhibe os perfis de temperatura e concentração para o caso  $\Phi = \Phi_{max} - 3$ .

Figura 12 – Perfis de temperatura e de concentração de combustível para  $x_i^* = -1,5$ ,  $T_{-\infty}^* = 2T_B^*$  e  $\Phi = \Phi_{max} - 3$ .



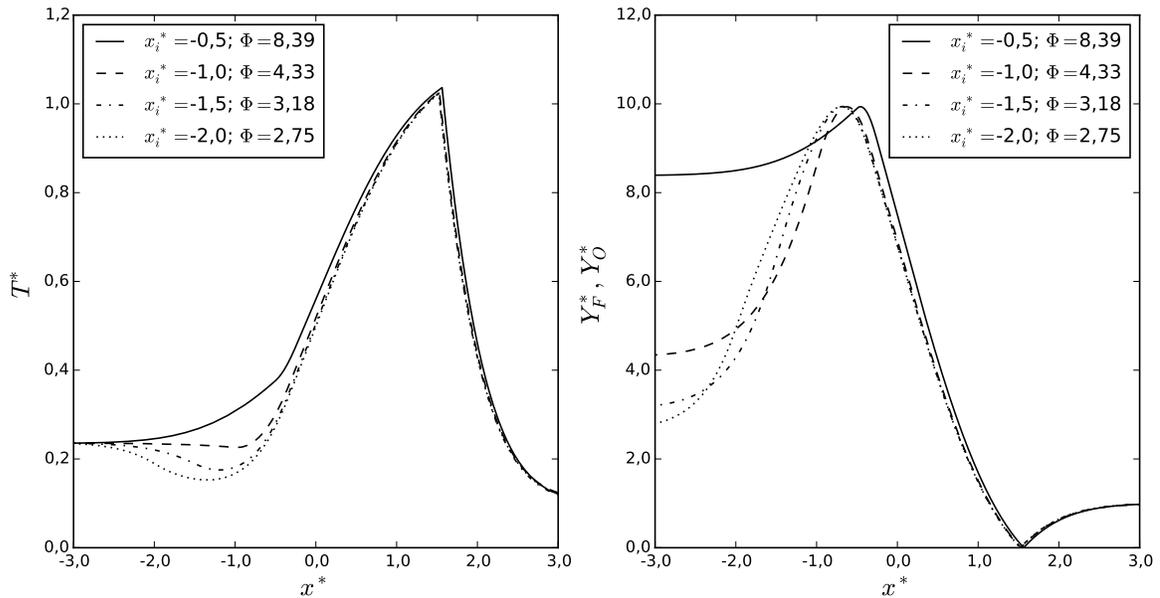
A Fig.(12) mostra que, também neste caso, o parâmetro  $M$  influencia fracamente as condições de chama, que se estabelece entre  $x_f^* = 1,297$  e  $x_f^* = 1,411$  com temperatura entre  $T_f^* = 1,006$  e  $T_f^* = 1,007$ . Percebe-se que a chama se aproxima do ponto de estagnação quando  $M$  diminui.

Por outro lado, as Fig.(10) e (12) mostram que os perfis de temperatura ou de concentração se alteraram 'juntos' quando  $\Phi$  foi alterado de  $\Phi_{max}$  para  $\Phi_{max} - 3$ . Isto mostra que  $\Phi_{max} - \Phi$  é um parâmetro importante sobre o problema.

### 4.3. Influência da posição de injeção $x_i^*$

O problema foi resolvido para  $T_{-\infty}^* = 2T_B$ ,  $M = 400$ . Adotou-se o valor máximo permitido para  $\Phi$  em cada caso. Os perfis de temperatura e de concentração de combustível e oxidante para o caso  $\Phi = \Phi_{max}$  estão exibidos na Fig.(13).

Figura 13 – Perfis de temperatura e de concentração de combustível para  $M = 400$ ,  $T_{-\infty}^* = 2T_B$  e  $\Phi = \Phi_{max}$ .

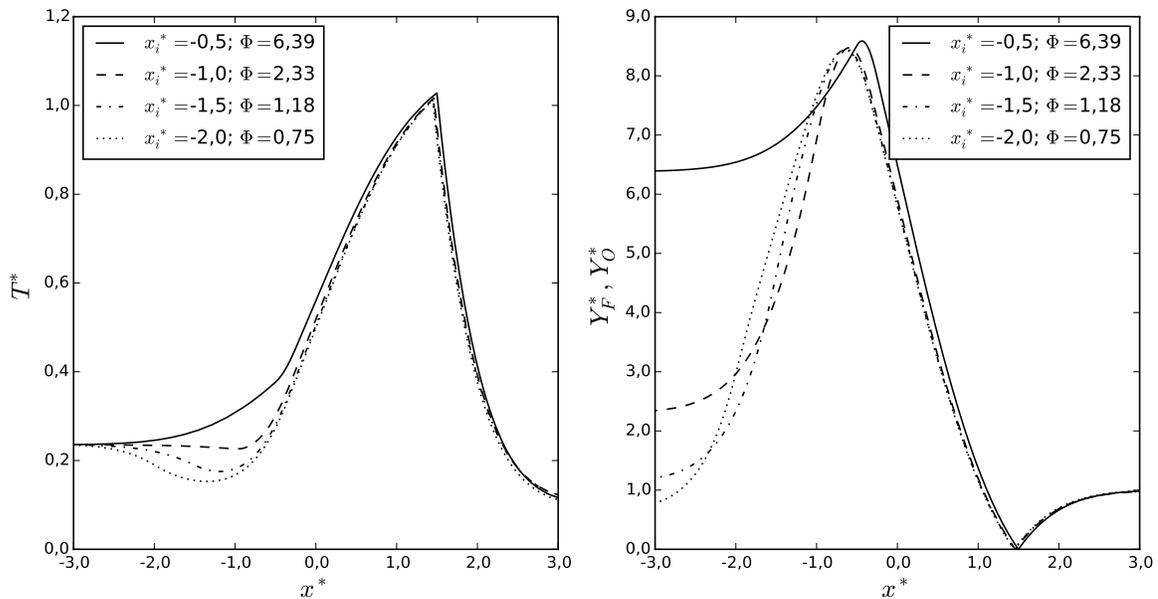


A Fig.(13) mostra que a posição da injeção de combustível influencia muito fracamente as condições da chama, que se estabelece entre  $x_f^* = 1,521$  e  $x_f^* = 1,564$ , com temperatura entre  $T_f^* = 1,037$  e  $T_f^* = 1,023$ . De forma similar à variação de  $M$ , o aumento da posição de injeção diminui a temperatura no ponto de injeção e deixa o perfil de concentração de combustível mais “largo”. Isto ocorre porque a mesma quantidade de combustível está sendo injetada em uma região mais distante da chama, isto é, a uma temperatura menor. Assim, as gotas necessitam de maior tempo para evaporar.

Quando o combustível é injetado muito próximo da chama, ele deve evaporar mais rapidamente, diminuindo o tempo necessário para que o combustível difunda para a região à montante do ponto de injeção. Assim,  $\Phi_{max}$  é inversamente proporcional a  $x_i^*$ .

Os perfis de temperatura e de concentração para o caso  $\Phi = \Phi_{max} - 2$  estão exibidos na Fig.(14).

Figura 14 – Perfis de temperatura e de concentração de combustível para  $M = 400$ ,  $T_{-\infty}^* = 2T_B^*$  e  $\Phi = \Phi_{max} - 2$ .



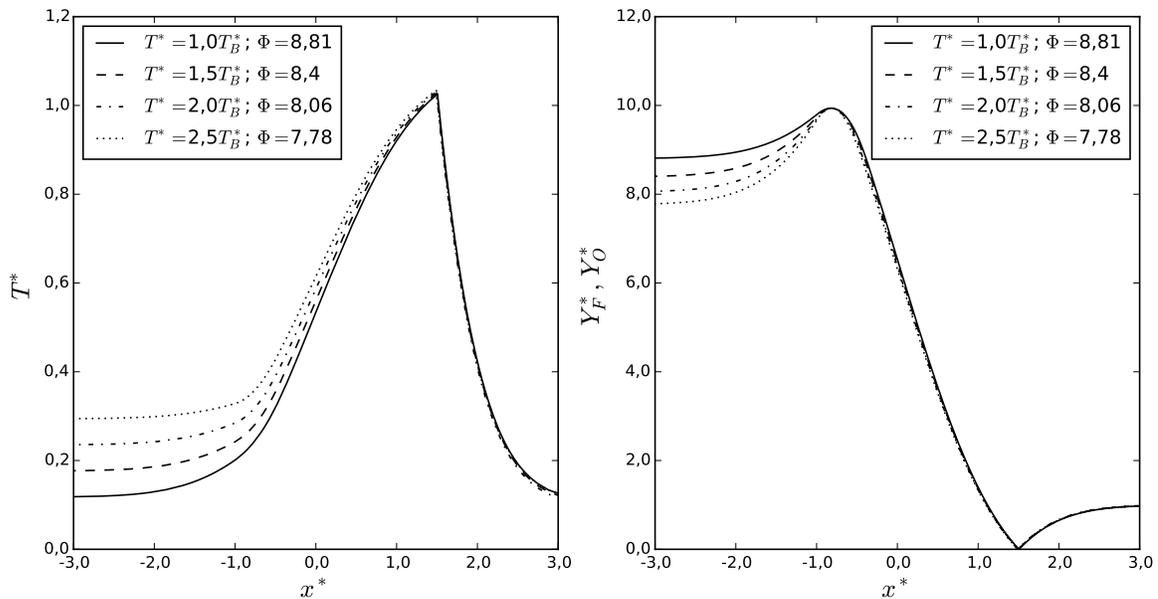
A Fig.(14) mostra que, neste caso, a posição de injeção também influencia fracamente as condições da chama, que se estabelece entre  $x_f^* = 1,450$  e  $x_f^* = 1,500$ , com temperatura entre  $T_f^* = 1,011$  e  $T_f^* = 1,028$ . Percebe-se que a chama se aproxima do ponto de estagnação conforme o ponto de injeção se distancia deste.

Da mesma forma que na subseção anterior, as Fig.(13) e (14) mostram que as condições da chama dependem de  $\Phi_{max} - \Phi$ .

#### 4.4. Influência da temperatura do gás com combustível $T_{-\infty}^*$

O problema foi resolvido para  $x_i^* = -1,0$ ,  $M = 200$  e  $T_{-\infty}^* = T_B^*$ ;  $1,5T_B^*$ ;  $2,0T_B^*$ ;  $2,5T_B^*$ . Adotou-se o valor máximo permitido para  $\Phi$  em cada caso. Os perfis de temperatura e de concentração de combustível e oxidante estão exibidos na Fig.(15).

Figura 15 – Perfis de temperatura e de concentração de combustível para  $M = 200$ ,  $x_i^* = -1,0$  e  $\Phi = \Phi_{max}$ .

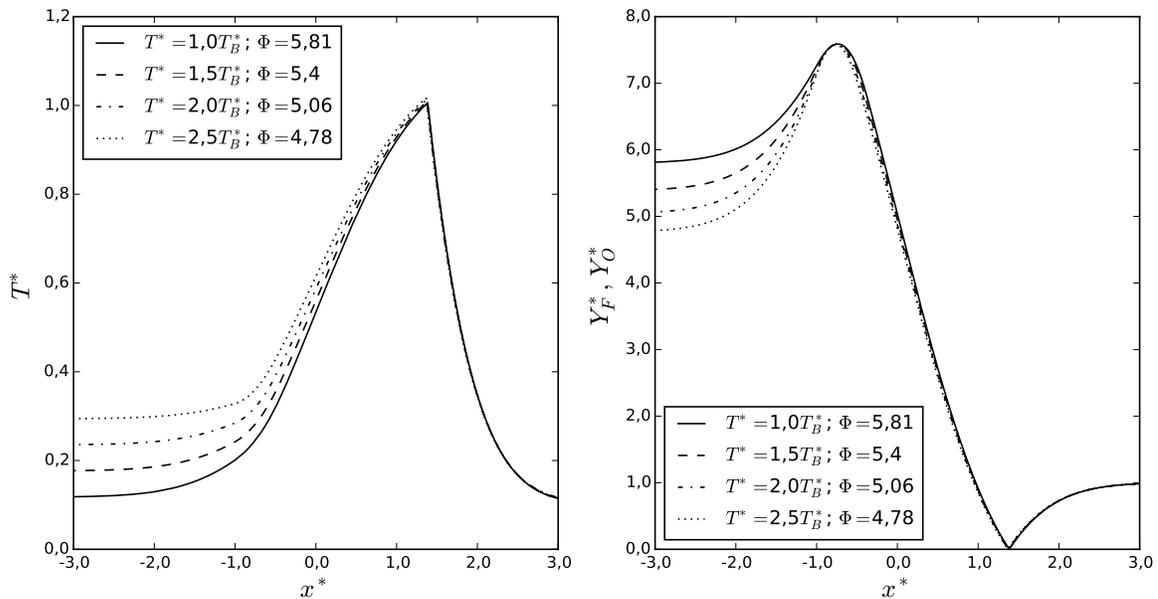


A Fig.(15) mostra que a temperatura do gás praticamente não influencia as condições da chama, que se estabelece entre  $x_f^* = 1,488$  e  $x_f^* = 1,503$ , com temperatura entre  $T_f^* = 1,025$  e  $T_f^* = 1,034$ , e não influencia os perfis de temperatura após a chama.

Pode se perceber que  $\Phi_{max}$  diminui conforme  $T_{-\infty}^*$  aumenta. Como a Fig.(15) mostra, a temperatura a montante do ponto de injeção aumenta conforme  $T_{-\infty}^*$  aumenta, naturalmente. Assim, a temperatura na região das gotas é mais elevada, de forma que estas evaporam mais rápido, havendo mais combustível em estado gasoso em uma região mais longe do ponto de estagnação, deixando o ambiente mais saturado de combustível e, conseqüentemente, diminuindo  $\Phi_{max}$ .

Os perfis de temperatura e de concentração para o caso  $\Phi = \Phi_{max} - 3$  estão exibidos na Fig.(16).

Figura 16 – Perfis de temperatura e de concentração de combustível para  $M = 200$  e  $x_i^* = -1,0$  e  $\Phi = \Phi_{max} - 3$ .

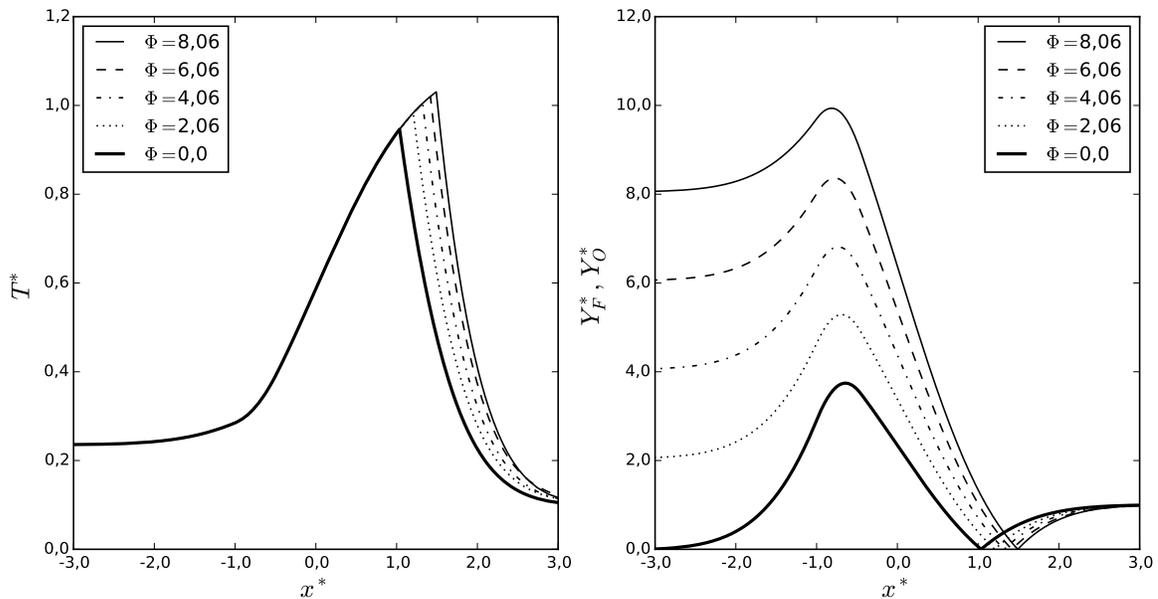


A Fig.(16) mostra que, novamente neste caso, a temperatura do gás praticamente não apresenta influência sobre as condições da chama, que se estabelece entre  $x_f^* = 1,365$  e  $x_f^* = 1,386$ , com temperatura entre  $T_f^* = 1,006$  e  $T_f^* = 1,0167$ . As Fig.(15) e (16) mostram que as condições da chama dependem de  $\Phi_{max} - \Phi$ .

#### 4.5. Influência da fração mássica de combustível $\Phi$

O problema foi resolvido para  $x_i^* = -1,0$ ,  $M = 200$ ,  $T_{-\infty}^* = 2T_B^*$  e  $\Phi = 8,06; 6,06; 4,06; 2,06; 0$ . Os perfis de temperatura e de concentração de combustível e oxidante estão exibidos na Fig.(17).

Figura 17 – Perfis de temperatura e de concentração de combustível para  $M = 200$ ,  $x_i^* = -1,0$  e  $T_{-\infty}^* = 2T_B^*$ .



A Fig.(17) mostra que, para um dado parâmetro de vaporização, posição de injeção e temperatura do gás, a razão  $\Phi$  apresenta influência significativa sobre as condições da chama, cuja posição varia entre  $x_f^* = 1,039$  e  $x_f^* = 1,493$  e cuja temperatura varia entre  $T_f^* = 0,946$  e  $T_f^* = 1,031$ . Percebe-se também que  $\Phi$  não apresenta influência alguma sobre o perfil de temperatura em  $x^* < x_f^*$ . Além disso, o formato do perfil de concentração de combustível varia muito pouco, apenas variando seus picos e gradientes; isto ocorre porque a razão  $\Phi$  não está relacionada ao processo de evaporação das gotas.

A Fig.(18) exhibe a variação da posição da chama como função de  $\Phi_{max} - \Phi$  para os quatro casos descritos na Tab.(2) e  $M = 100$ .

Figura 18 – Variação da posição da chama com  $\Phi_{max} - \Phi$  para os parâmetros dados pela Tab.(2) e  $M = 100$

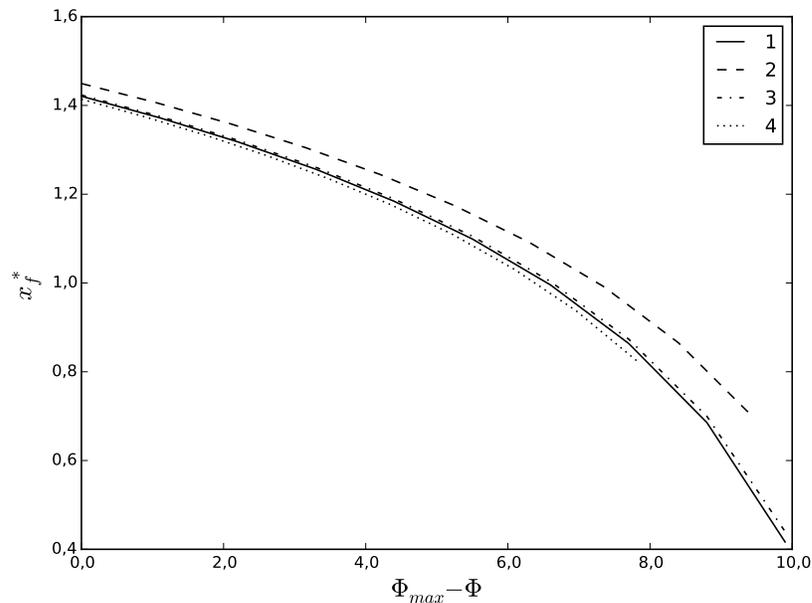


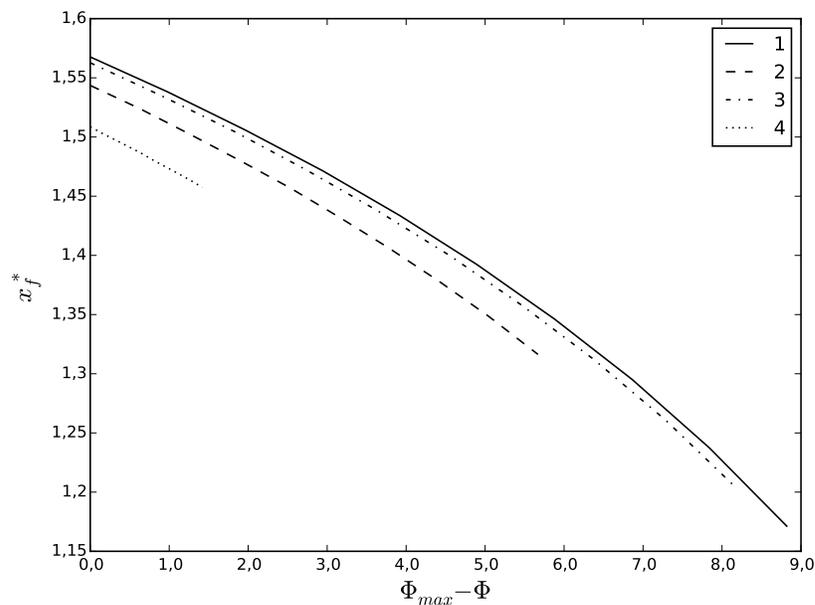
Tabela 2 – Valores dos parâmetros das soluções exibidas na Fig.(18)

Caso	$x_i^*$	$T_{-\infty}^*/T_B^*$
1	-0,5	1,0
2	-2,0	1,0
3	-0,5	2,5
4	-2,0	2,5

Para os casos da Tab.(2) foram selecionados os mais extremos considerados anteriormente para a posição de injeção e para a temperatura do gás. A Fig.(18) confirma que a posição da chama depende de todos os parâmetros considerados, mas especialmente de  $\Phi_{max} - \Phi$ . Percebe-se que há um comportamento muito uniforme, e que as quatro curvas são muito similares entre si. O comportamento mais anômalo ocorre no caso 2, isto é, para o caso de mais baixa temperatura e de injeção mais longe do ponto de estagnação, havendo um aumento entre a distância da chama ao ponto de estagnação.

A Fig.(19) exibe a variação da posição da chama como função de  $\Phi_{max} - \Phi$  para os quatro casos descritos na Tab.(2) e  $M = 400$ .

Figura 19 – Variação da posição da chama com  $\Phi_{max} - \Phi$  para os parâmetros dados pela Tab.(2) e  $M = 400$



Na Fig.(19) não se percebe o mesmo comportamento uniforme obtido para  $M = 100$ , mas o comportamento das curvas ainda é similar. Percebe-se que, quando  $M$  é alto, a influência da temperatura do gás e da posição de injeção são mais acentuadas. As curvas 1 e 3 mostram que, quando a injeção é próxima do ponto de estagnação, há pouca influência da temperatura do gás, mas percebe-se o oposto quando a injeção é distante do ponto de estagnação, de acordo com as curvas 2 e 4. Isto ocorre porque quando a injeção se dá próxima do ponto de estagnação, as gotas evaporam em menos tempo, e a maior parte do calor é retirado da chama, de modo que a temperatura a montante da injeção é menos influente.

As Fig.(18) e Fig.(19) mostram que é um comportamento global do problema estudado que a chama se aproxime do ponto de estagnação quando  $\Phi$  se aproxima de 0 (i.e., quando  $\Phi_{max} - \Phi$  se aproxima de  $\Phi_{max}$ ). Isto ocorre porque uma concentração menor de combustível leva a chama a se aproximar do lado do combustível. Pode-se perceber, entretanto, que esta aproximação é menos acentuada quando  $M$  é elevado; isto ocorre porque, neste caso, mais combustível é fornecido pela injeção e menos combustível é fornecido pelo fluxo de gás, de forma que  $\Phi$  se torna menos influente sobre a posição da

chama quando  $M$  é elevado.

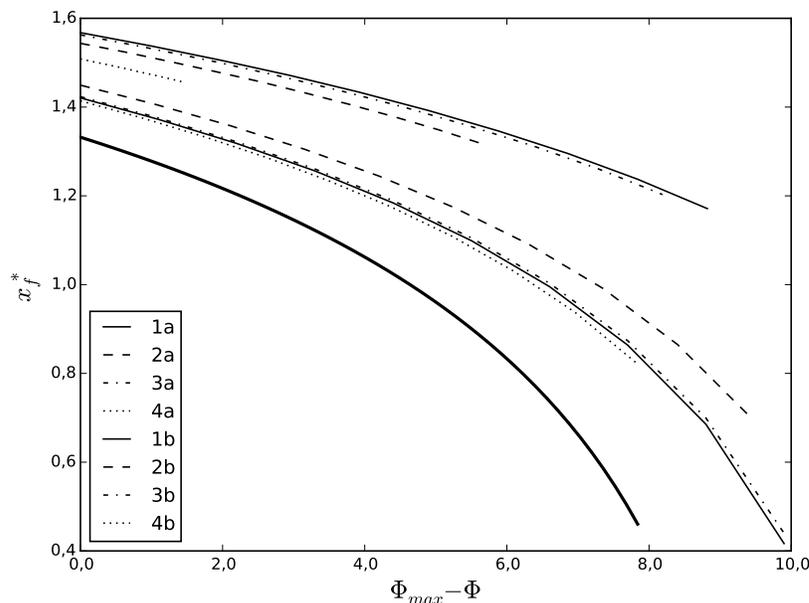
O caso limite em que  $M = 0$  pode ser estudado analiticamente considerando que, neste caso, a solução dada pela Eq.(126) vale em todo o domínio. Assim, tem-se:

$$\xi_f = 1 - \frac{1}{\Phi + 1} \quad (129)$$

Ou seja, a posição da chama, neste caso, depende apenas da concentração de combustível no gás, o que é esperado, já que não há nenhum fenômeno relacionado à injeção e a temperatura do gás não apresenta nenhuma influência direta sobre a concentração de combustível.

A Fig.(20) é a sobreposição dos dois gráficos anteriores, isto é, incluindo as curvas para  $M = 100$  e para  $M = 400$  e a solução analítica para  $M = 0$ , representada pela linha de maior espessura.

Figura 20 – Variação da posição da chama com  $\Phi_{max} - \Phi$  para os parâmetros dados pela Tab.(2) e  $M = 100$  (curvas 1a-4a) e  $M = 400$  (curvas 1b-4b)



A Fig.(20) exhibe claramente os resultados discutidos, especialmente a dependência de  $\Phi$  é mais acentuada quando  $M$  é pequeno. As curvas para  $M \neq 100$  podem ser

aproximadas pela seguinte família de funções:

$$\xi_f = 1 + a - \frac{1}{\nu/Y_{F\infty} - b(\Phi_{max} - \Phi) + 1} \quad (130)$$

Onde  $a$  é proporcional a  $M$  e  $b$  é inversamente proporcional a  $M$ .

#### 4.6. Transformação de Crocco

Uma transformação de Crocco [17] consiste em expressar as variáveis dependentes do problema como função de uma variável também dependente, eliminando as variáveis independentes, tais como as coordenadas espaciais. Em chamas difusivas laminares, é comum a adoção da função  $Z$  como variável independente, mas isto não seria possível neste caso, pois, devido à presença das gotas no escoamento, no lado do combustível, a função  $Z$  não é monotônica.

Uma função monotônica dependente de  $Z$  é o comprimento de arco de  $Z$ , dado por:

$$L = \int_0^{x^*} \sqrt{1 + \left(\frac{dZ}{dx^*}\right)^2} dx^* \quad (131)$$

Na região da chama,  $Z$  é dada pela Eq.(126), que pode ser escrita como:

$$Z = \frac{\operatorname{erf} \frac{x^*}{\sqrt{2}} - 1}{2(\xi_f - 1)} \quad (132)$$

Assim, temos:

$$\frac{dZ}{dx^*} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}(\xi_f - 1)} \exp -\frac{x^{*2}}{2} \quad (133)$$

Logo, a derivada da função comprimento de arco de  $Z$  é:

$$\frac{dL}{dx^*} = \sqrt{1 + \left(\frac{dZ}{dx^*}\right)^2} = \sqrt{1 + \frac{1}{2\pi(\xi_f - 1)^2} \exp -x^{*2}} \quad (134)$$

A solução desta equação diferencial não pode ser escrita em termos de funções elementares, então uma aproximação deve ser obtida. Quando  $x^* \gg 1$ ,  $\exp -x^{*2} \ll 0$ , de

modo que a expressão se torna constante. Assim, uma expressão que aproxime  $dL/dx^*$  nas proximidades de  $x^* = 0$  é suficiente. Primeiramente definimos  $g(X)$  como:

$$g(X) = \sqrt{1 + \alpha X} \quad (135)$$

Onde  $X = \exp -x^{*2}$ , sendo  $\alpha$  dado por:

$$\alpha = \frac{1}{2\pi(1 - \xi_f)^2} \quad (136)$$

Aproxima-se  $g(X)$  como  $g(X) \approx a\sqrt{X} + b$ . Como  $X$  assume valores entre 0 e 1, pode-se usar estes dois pontos para se obter  $a$  e  $b$ , levando a:

$$g(X) \approx (\sqrt{1 + \alpha} - 1)\sqrt{X} + 1 \quad (137)$$

Assim, temos:

$$\frac{dL}{dx^*} \approx (\sqrt{1 + \alpha} - 1) \exp -\frac{x^{*2}}{2} + 1 \quad (138)$$

Integrando esta equação, obtemos:

$$\int_0^{x^*} dL \approx \int_0^{x^*} 1 + (\sqrt{1 + \alpha} - 1) \exp -\frac{x^{*2}}{2} dx^* \quad (139)$$

$$L \approx x^* + \sqrt{\sqrt{2\pi}} \frac{\sqrt{1 + \alpha} - 1}{2} \operatorname{erf} \frac{x^*}{\sqrt{2}} \quad (140)$$

Logo:

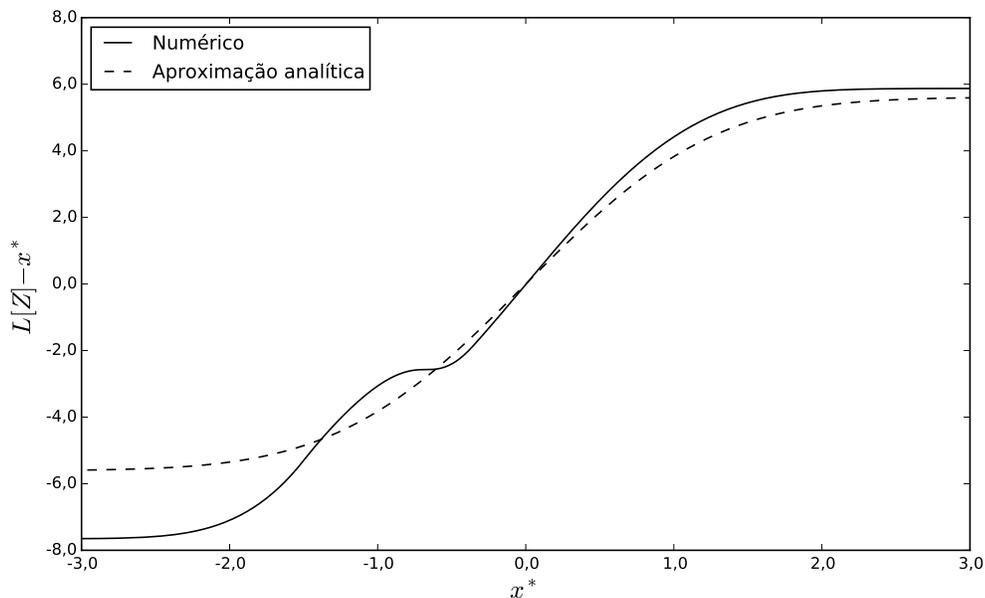
$$L - x^* \approx A \operatorname{erf} \frac{x^*}{\sqrt{2}} \quad (141)$$

Sendo:

$$A = \frac{\sqrt{\sqrt{2\pi}}}{2}(\sqrt{1+\alpha} - 1) \quad (142)$$

A Fig.(21) exibe a função  $L - x^*$  para o caso  $M = 400$ ,  $x_i^* = -1,5$ ,  $T_{-\infty}^* = 2T_B^*$  e  $\Phi = \Phi_{max} = 3,18$  calculada numericamente, a partir da solução das equações diferenciais, e calculada pela aproximação analítica obtida.

Figura 21 – Comparação entre a função  $L - x^*$  calculada numericamente e analiticamente



A Fig.(21) mostra que a expressão obtida aproxima a função  $L - x^*$  na região da chama. Esta aproximação permite que o problema da combustão de spray possa ser adaptada ao modelo flamelet através de uma transformação similar à apresentada por Franzelli [6]. Assim, o comportamento das variáveis do problema podem ser estudadas no interior da zona de reação, que neste trabalho foi considerada como possuindo espessura desprezível. O modelo flamelet permite que a espessura da chama, bem como a distribuição de temperatura e de reagentes em seu interior possa ser obtida.

## 5. CONSIDERAÇÕES FINAIS

Este trabalho apresentou uma análise do problema da combustão de um spray de combustível em uma configuração de reagentes em contra corrente. A partir de um desenvolvimento analítico baseado nas equações de conservação, mostrou-se que o fenômeno de combustão está relacionado à posição de injeção de combustível, à temperatura do gás, à concentração de combustível proveniente no gás  $\Phi$  e ao parâmetro de vaporização  $M$ , uma grandeza adimensional relacionada às condições do escoamento, às propriedades físicas do combustível e à atomização. Mostrou-se também que a posição e temperatura da chama dependem fortemente de  $\Phi_{max} - \Phi$ , e que esta dependência tende a diminuir conforme  $M$  aumenta. Um aumento em  $M$  também tende a diminuir a temperatura do gás na região com gotas e a distanciar a chama do ponto de estagnação. Também obteve-se uma descrição do problema de acordo com o modelo flamelet.

Em trabalhos futuros abordagens mais realistas serão utilizadas, considerando que a saturação de combustível no gás inibe a evaporação das gotas, além de se considerar que a temperatura do oxidante é superior à temperatura do combustível, tal como ocorre em aplicações práticas da combustão de spray, como em motores a Diesel ou motores a jato. O modelo flamelet será utilizado para um estudo da estrutura interna da chama, visando-se obter a distribuição de temperatura e de concentração de espécies químicas no interior da zona de reação.

## REFERÊNCIAS

- [1] J. Buckmaster. A new large Damköhler number theory of fuel droplet burning. *Combustion and flame*, pages 79–98, 1975.
- [2] S. P. Burke and T. E. W. Schumann. Diffusion Flames. *Industrial & Engineering Chemistry*, 20(10):998–1004, 1928.
- [3] César F. Cristaldo. Solução numérica de uma chama difusiva e sua validação. Master's thesis, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 2008.
- [4] Fernando F. Fachini. An analytical solution for the quasi-steady droplet combustion. *Combustion and flame*, 1999.
- [5] F. E. Fendell. Ignition and extinction in combustion of initially unmixed reactants. *Fluid Mechanics*, (21):281–303, 1965.
- [6] Benedetta Franzelli, Aymeric Vié, and Matthias Ihme. On the generalisation of the mixture fraction to a monotonic mixing-describing variable for the flamelet formulation of spray flames. *Combustion Theory and Modelling*, 2015.
- [7] G. A E Godsave. Studies of the combustion of drops in a fuel spray-the burning of single drops of fuel. *Symposium (International) on Combustion*, 4(1):818–830, 1953.
- [8] M. Goldsmith. The burning of a single drop in oxidizing atmosphere. Master's thesis, California Institute of Technology, 1955.
- [9] R.J. Heinschon, D.E. Wulfhurst, and P.M. Becker. The effects of an electric field on an opposed-jet diffusion flame. *Combustion and flame*, (11):788–296, 1967.
- [10] Luciano Hennemann and Fernando F. Fachini. An extended analysis of diffusion flames with fuel droplets in reaction zone. *Brazilian Congress of Thermal Sciences and Engineering*, 13, 2010.
- [11] F.L. Jones, , P.M. Becker, and R.J. Heinschon. A mathematical model of the opposed-jet diffusion flame: effect of an electric field on concentration and temperature profiles. *Combustion and flame*, (19):351–362, 1972.

- [12] Kenneth K. Kuo. *Principles of combustion*. John Willey & Sons, 2005.
- [13] C. K. Law. Recent advances in droplet vaporization and combustion. *Energy combustion science*, 8:171–201, 1982.
- [14] Chung K Law. *Combustion Physics*. Cambridge University Press, 2006.
- [15] A. Liñán. The asymptotic structure of counterflow diffusion flames for large activation energies. *Acta Astronautica*, 1(7-8):1007–1039, 1974.
- [16] Daniela Maionchi and Fernando F. Fachini. A simple spray–flamelet model: Influence of ambient temperature and fuel concentration, vaporisation source and fuel injection position. *Combustion Theory and Modelling*, 17:522–542, 2013.
- [17] N. Peters. Laminar diffusion flamelet models in non-premixed turbulent combustion. *Energy combustion science*, 10:319–339, 1984.
- [18] A. E. Potter and J. N. Butler. A novel combustion measurement based on the extinguishment of diffusion flames. *ARS Journal*, 29:54–56, 1959.
- [19] W.A. Sirignano. Fuel droplet vaporization and spray combustion theory. *Energy combustion science*, 9:291–322, 1983.
- [20] D. B. Spalding. The combustion of liquid fuels. *Symposium (International) on Combustion*, 4(1):847–864, 1953.
- [21] D. B. Spalding. Theory of mixing and chemical reaction in the opposed-jet diffusion flame. *ARS*, (11):763–771, 1961.
- [22] H. Tsuji. Counterflow diffusion flames. *Energy combustion science*, 8:93–119, 1982.
- [23] Stephen R Turns et al. *An introduction to combustion*, volume 287. McGraw-hill New York, 1996.
- [24] A. Umemura. Interactive droplet vaporization and combustion: approach from asymptotics. *Energy and combustion science*, 20:325–372, 1994.
- [25] Frank M. White. *Fluid Mechanics*. McGraw-Hill New York, 2000.