

Universidade Federal do Pampa

Anderson Lixinski Dalenogare

**Modelo teórico para combustão de gotas com
formação de fuligem e transferência de calor
por radiação**

Alegrete

2017

Anderson Lixinski Dalenogare

Modelo teórico para combustão de gotas com formação de fuligem e transferência de calor por radiação

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

Orientador: Dr. César Flaubiano Cristaldo

Alegrete

2017

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) .

D139m Dalenogare, Anderson

Modelo teórico para combustão de gotas com formação de fuligem e transferência de calor por radiação / Anderson Dalenogare.

61 p.

Trabalho de Conclusão de Curso(Graduação)-- Universidade Federal do Pampa, ENGENHARIA MECÂNICA, 2017.

"Orientação: César Cristaldo".

1. Combustão de gotas . I. Título.

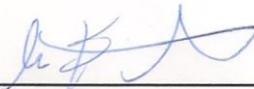
Anderson Lixinski Dalenogare

**Modelo teórico para combustão de gotas com formação
de fuligem e transferência de calor por radiação**

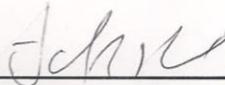
Trabalho de Conclusão de Curso apresentado
ao Curso de Graduação em Engenharia Mecânica da Universidade Federal do Pampa
como requisito parcial para a obtenção do
título de Bacharel em Engenharia Mecânica.

Trabalho de Conclusão de Curso defendido e aprovado em 29 de junho de 2017.

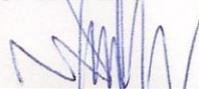
Banca examinadora:



Dr. César Flaubiano Cristaldo
Orientador



Dr. Adriano R. da Silva Carotenuto
UNIPAMPA



Dr. Wang Chong
UNIPAMPA

*Este trabalho é dedicado aos meus pais,
que sempre me apoiaram, mesmo quando eu mesmo não acreditava.*

Agradecimentos

Agradeço aos meus pais, Antonio Varlei e Alessandra, e ao meu irmão, Vagner, por todo apoio e principalmente paciência. Por acreditarem em meu potencial, acima de tudo.

Ao Professor Dr. César Flaubiano da Cruz Cristaldo, pelo apoio e incentivo no desenvolvimento deste trabalho principalmente pela compressão nos momentos mais difíceis.

Ao Professor Dr. Fernando Fachini Filho por todo apoio fornecido durante a execução deste trabalho.

A meus amigos, Alan Junior Vergutz, Fernando Hendges Lopes e Ismael Tonelo, pelas horas de estudo e de diversões vivenciadas.

Aos meus amigos e colegas em geral, que, de alguma forma, me auxiliaram a superar as dificuldades e me forneceram apoio.

Aos professores da Engenharia Mecânica da UNIPAMPA, por todo conhecimento transmitido.

*“Sonhos determinam o que você quer.
Ação determina o que você conquista.”*
(Aldo Novak)

Resumo

Devido ao grande consumo de combustíveis fósseis, cerca de 90% do consumo mundial, torna-se necessário o uso moderado de combustíveis em diferentes aplicações, desde o consumo doméstico até em aplicações aeroespaciais. Neste sentido torna-se necessário o conhecimento dos processos físicos decorrentes da combustão para estimar níveis de poluição ou até mesmo o seu controle. O presente trabalho apresenta um modelo teórico de chama difusiva no entorno de uma gota esférica de combustível. O modelo é uma extensão da formulação de Shvab-Zel'dovich com a inclusão de perda de calor por radiação e perda de calor devido a formação de fuligem. A metodologia empregada para a solução do problema consiste em uma formulação simplificada de chama infinitamente estreita, onde o problema físico é representado pelas equações de conservação e suas devidas condições de contorno no regime laminar. A grande dificuldade para modelar o processo de combustão é devido ao termo de reação química presente nas equações de conservação que é fortemente não linear. Seguindo o procedimento de Shvab-Zel'dovich, combinações entre as equações de conservação são usadas para eliminar a dependência do termo de reação química das equações reduzindo o problema a um sistema de equações diferenciais ordinárias. Este sistema de equações é integrado explicitamente pelo método conhecido por "Shooting Method". Os resultados mostram que é possível obter uma formulação simples que modela a combustão na presença de formação de fuligem e perda de calor por radiação. O presente modelo também permite descrever os processos já conhecidos experimentalmente, como a diminuição da taxa de vaporização e mudança da posição da chama em relação a superfície do combustível com o aumento da formação de fuligem.

Palavras-chave: Combustão de gotas, Shvab-Zel'dovich, Flamelet.

Abstract

Due to the high consumption of fossil fuels, around 90% of world consumption, it is necessary to use fuels in different applications, from domestic consumption to aerospace applications. In this sense it becomes necessary the knowledge of the physical processes resulting from the combustion to estimate levels of pollution or even its control. The present work presents a theoretical model of diffusive flame in the surroundings of a spherical drop of fuel. The model is an extension of the Shvab-Zel'dovich formulation with the inclusion of heat loss by radiation and loss of heat due to the formation of soot. The methodology used to solve the problem consists of a simplified formulation of infinitely narrow flame, where the physical problem is represented by the conservation equations and their due contour conditions in the laminar regime. The great difficulty in modeling the combustion process is due to the chemical reaction term present in conservation equations that is strongly nonlinear. Following the Shvab-Zel'dovich procedure, combinations of conservation equations are used to eliminate the dependence of the chemical reaction term from the equations by reducing the problem to a system of ordinary differential equations. This system of equations is explicitly integrated by the method known as "Shooting Method". The results show that it is possible to obtain a simple formulation that models the combustion in the presence of soot formation and heat loss by radiation. The present model also allows to describe the processes already known experimentally, as the reduction of the rate of vaporization and change of the position of the flame in relation to the surface of the fuel with the increase of the formation of soot.

Key-words: Combustion of Drops, Shvab-Zel'dovich, Flamelet.

Lista de ilustrações

Figura 1 – Aplicação de bico injetor na combustão	18
Figura 2 – Tipos de chamas: (A) Não Pré-misturada, (B) Pré-misturada	19
Figura 3 – Esquema chama de Bunsen	20
Figura 4 – Tipos de chama produzidas pelo queimador Bunsen	21
Figura 5 – Mudança no tipo de chama com aumento na velocidade do fluxo	22
Figura 6 – Diferentes regimes de queima na combustão de spray	23
Figura 7 – Modelo clássico de combustão de gotas	24
Figura 8 – Escape de combustível pela chama	24
Figura 9 – Esquema de exemplificação da transferência de calor por radiação na gota	26
Figura 10 – Fluxograma de atividades	29
Figura 11 – Esquema da chama	38
Figura 12 – Método para solução numérica	48
Figura 13 – Variação do perfil de temperatura sem a geração de fuligem para $\phi_q =$ $0.1, \phi_m = 0.1$	50
Figura 14 – Variação do perfil de temperatura com a geração de fuligem para $\phi_q =$ $0.1, \phi_m = 0.1$	50
Figura 15 – Comparação da variação do perfil de temperatura com e sem geração de fuligem	51
Figura 16 – Variação do perfil de temperatura com $\phi_m = 0.5$	52
Figura 17 – Variação do perfil de temperatura com $\phi_q = 0.3$	52
Figura 18 – Variação da fração mássica de H_2O com o aumento do calor necessário para geração de fuligem	53
Figura 19 – Variação da fração mássica de CO_2 com o aumento do calor necessário para geração de fuligem	53
Figura 20 – Variação da fração mássica de H_2O com o aumento da formação de fuligem	54
Figura 21 – Variação da fração mássica de CO_2 com o aumento da formação de fuligem	54
Figura 22 – Posição da chama x_f/a em função da massa de fuligem ϕ_m , para $\phi_q =$ $0.1, 0.2, 0.3$	55
Figura 23 – Constante de vaporização (β) em função da geração de fuligem (ϕ_m), para $\phi_q = 0.1, 0.2, 0.3$ e $a = 1$	56

Lista de símbolos

Q	Calor de combustão [J/kg]
c_p	Calor específico a pressão constante [J/kgK]
L	Calor latente de vaporização [J/kg]
Q_{soo}	Calor perdido pela fuligem [J/kg]
Q_{rad}	Calor perdido por radiação [J/kg]
ν	Coefficientes estequiométricos
k	Condutividade térmica [W/mK]
R_g	Constante dos gases [$J/mol.K$]
\dot{w}	Consumo de combustível por unidade de volume
r	Coordenada radial [m]
$D_{i\infty}$	Difusividade mássica da espécie $i = O, F, H, C$, sendo oxidante, combustível, água e gás carbônico [m^2/s]
E	Energia de ativação
\dot{q}	Energia gerada por unidade de volume
H	Excesso de entalpia ($H = (S + 1)L_F/Q + y_O + y_F$)
B	Fator de frequência
Y_F	Fração mássica de combustível
y_F	Fração mássica de combustível adimensional
Y_O	Fração mássica de oxidante
y_O	Fração mássica de oxidante adimensional
s	Fração mássica de oxidante necessária para reagir com uma unidade de massa de combustível consumida
Z	Fração de mistura ($Z = Sy_F - y_O + 1$)
Da	Número de Damköhler

Le	Número de Lewis [α_∞/D]
x_f	Posição da chama
x_s	Posição da superfície
x_{amb}	Posição do ambiente
x_{soot}	Posição inicial de formação de fuligem
\bar{a}	Raio da gota [m]
a_0	Raio inicial da gota [m]
T	Temperatura [K]
t	Tempo [s]
t_c	Tempo característico de vida da gota [s]
\dot{m}	Vazão mássica [kg/s]
\vec{V}	Velocidade radial [m/s]
V	Volume da gota [m^3]
v	Velocidade radial adimensional

LETRAS GREGAS

μ	Coeficiente de viscosidade
β	Constante de vaporização (λ/a)
α	Difusividade térmica [m^2/s]
Φ	Dissipação viscosa
ρ	Massa específica
ϱ	Massa específica adimensional
ϕ_m	Taxa de geração de fuligem
λ	Taxa de vaporização adimensional
θ	Temperatura adimensional
τ	Tempo adimensional

$$\varepsilon = \rho_{\infty} / \rho_l$$

$$\phi_q = Q_{so} / Q \text{ (Calor necessário para formação de fuligem)}$$

$$\gamma = L / R_g T_b$$

$$\varepsilon = \rho_{\infty} / \rho_l$$

SUBSCRITOS

f Chama (Flame)

∞ Condição ambiente (Região afastada da gota)

l Fase líquida

$-$ Lado do combustível

$+$ Lado do oxidante

i Oxidante ou combustível (O, F)

F Região da chama sem escape de combustível

s Região da superfície da gota

Sumário

1	Introdução	15
1.1	Contextualização do problema	15
1.2	Objetivos	16
1.3	Justificativa	16
1.4	Estrutura do trabalho	17
2	Fundamentação teórica	18
2.1	Combustão	18
2.2	Chama	18
2.2.1	Tipos de chamas	19
2.2.2	Classificação da chama quanto ao regime	21
2.3	Combustão de Spray	21
2.4	Combustão de gotas	23
2.4.1	Formação de fuligem	25
2.4.2	Transferência de calor por radiação	26
2.5	Revisão bibliográfica	27
3	Metodologia	29
3.1	Formulação matemática	29
3.1.1	Condições impostas para o problema	29
3.1.2	Fase líquida	30
3.1.3	Fase gasosa: Equações Governantes	30
3.2	Adimensionalização das equações	31
3.2.1	Conservação de Massa	32
3.2.1.1	Fase gasosa	32
3.2.2	Conservação de espécies	32
3.2.3	Conservação de energia	33
3.2.4	Equações governantes adimensionalizadas	33
3.3	Condições de contorno	35
3.4	Função Z e H	37
3.4.1	Formulação	37
3.4.2	Condições de contorno para as funções Z e H	40
3.5	Desenvolvimento das equações	42
3.5.1	Constante de vaporização (β) em função de Z	42
3.5.2	Excesso de entalpia (H) em função de Z	43
3.5.3	Fração mássica de H_2O em função de Z	44
3.5.4	Fração de mistura de CO_2 em função de Z	45
3.6	Discussão	46

3.7	Solução numérica	47
4	Resultados	49
4.1	Influência da temperatura ambiente	49
4.2	Influência de ϕ_m e ϕ_q no perfil de temperatura e nas concentrações de H_2O e CO_2	51
4.3	Influência da variação da taxa de geração de fuligem no comportamento da chama	55
5	Conclusão	57
	Referências	58

1 Introdução

Este capítulo é subdividido em contextualização do problema, objetivos do trabalho, justificativa de realizar este trabalho e por fim a estrutura do mesmo.

1.1 Contextualização do problema

Analisando o histórico da combustão, nota-se que a mesma sempre esteve presente no universo. Com o aprimoramento dos conhecimentos sobre combustão tornou-se possível o desenvolvimento de várias máquinas, produtos e processos ocasionando a revolução industrial no século XVIII, com o surgimento das máquinas a vapor.

No século XIX os motores de combustão interna começaram a ser desenvolvidos sendo de grande relevância os trabalhos de Lenoir, 1860, Otto, 1876, e Diesel, 1893, os quais deram origem aos ciclos padrão a ar que recebem, respectivamente, seus nomes.

Durante o século XX foi estabelecido como ciência a teoria de combustão, no qual foi agregado diversos conceitos de química, mecânica dos fluidos, termodinâmica e transferência de calor e massa.

Atualmente existem diversos equipamentos que utilizam estes conceitos, porém deve ser dada uma atenção em especial nas seguintes áreas de: turbinas a gás, fogões, motores de combustão interna, fornos, caldeiras, motores de foguetes. Vale ressaltar os serviços que possuem como base os processos de combustão, como por exemplo: aquecimento predial, geração de energia elétrica, enfatizando a necessidade de preservação do meio ambiente através de sua produção e utilização. Neste contexto, diariamente surgem desafios provocados pela ciência, tecnologia e engenharia, a desenvolver equipamentos e sistemas energeticamente eficientes, com baixo nível de agentes poluentes, garantindo o menor consumo de combustíveis fósseis, a segurança de seus usuários, como também, o menor custo de sua produção e aquisição. Além disso, um dos maiores desafios ambientais está relacionado ao combate dos incêndios florestais, industriais e de exploração controlada de fontes petrolíferas(CALDEIRA; LEIROZ; ORLANDE, 2004).

O processo de atomização do combustível é o mecanismo responsável por otimizar sua queima. A atomização aumenta a área de contato entre a superfície do combustível e o ambiente gasoso, aumentando a taxa de transferência de calor do ambiente para a gota que conseqüentemente resulta em aumento da taxa de vaporização melhorando sua taxa de queima. Devido à elevada complexidade associada à análise da transferência de calor e massa em sprays, o estudo da combustão de gotas isoladas, além de ter sua descrição relativamente simples, ele também contribui para descever o comportamento global de

uma nuvem de gotas na forma de spray.

Na combustão de sprays ocorre processos em várias escalas espaciais e temporais, tornando inviável a realização de uma simulação numérica do problema completo. Para contornar este obstáculo, os processos evolutivos em escalas menores devem ser incorporados na simulação através de modelos submalhas (FACHINI, 1999). Isto é, ao invés de modelar a nuvem de sprays através das equações de conservação, pode-se modelar uma gota isolada, estimar sua taxa de vaporização, temperatura e posição de chama, assim pode-se estender o modelo para interação entre duas gotas e numa análise mais completa, consegue-se estudar uma coluna de gotas e assim sucessivamente até chegar num modelo mais completo que descreva os processo na escala do spray. Como cada modelo possui uma escala diferente, o modelo da escala grande é "alimentado" por informações dos modelos simplificados de escalas menores (modelos submalhas) e o acoplamento das soluções entre modelos é obtido assintoticamente por condições de contorno.

No presente trabalho, a combustão de uma gota isolada é analisada através das equações de conservação de massa, espécies e energia. Porém, a grande dificuldade para modelar o processo de combustão da gota isolada está relacionada com o termo de reação química presente nas equações de conservação de espécies e energia que é fortemente não linear. Para contornar este problema, utilizaremos a hipótese de chama estreita, isto é, a chama está localizada numa região muito estreita separando o domínio entre "lado do combustível" e "lado do oxidante" através do procedimento de Shvab-Zel'dovich, que consiste em combinações entre as equações de conservação para eliminar o termo de reação química das equações, simplificando a sua solução.

1.2 Objetivos

Este trabalho tem como objetivo geral apresentar um modelo para resolver o problema de combustão de gotas, através do modelo clássico de combustão de gotas de Shvab-Zel'dovich com a inclusão da taxa de formação de fuligem e perda de calor por radiação e perda de calor para a formação de fuligem.

Os objetivos específicos deste trabalho são: Desenvolver um modelo simples com baixo custo computacional capaz de representar parametricamente a influência da taxa de geração de fuligem na temperatura e posição de uma chama difusiva.

1.3 Justificativa

O conhecimento dos mecanismos de transferência de calor e massa associados a combustão em spray, é de fundamental importância para o aprimoramento tecnológico de injetores e câmaras de combustão. O uso da energia proveniente da combustão de forma

eficiente e com máximo de desempenho de equipamentos e máquinas com o mínimo de consumo de nossas reservas naturais e com o mínimo de emissões de poluentes é um fator crucial para o desenvolvimento tecnológico, atendendo à novas legislações ambientais.

Devido a essa demanda, o conhecimento prévio dos processos físicos presentes na combustão torna-se necessário para que se possa estimar a formação de fuligem. Porém devido à complexidade dos mecanismos envolvidos na combustão torna-se impraticável uma simulação numérica completa do problema. Atualmente muitas técnicas de redução de mecanismos químicos são utilizadas. Por exemplo, o mecanismo de oxidação do combustível n-heptano que será o combustível utilizado pro presente trabalho, envolve dezenas de espécies e centenas de etapas de reações químicas. Neste caso muitos dias de tempo computacional são necessários para recolher uma única simulação. A fim de reduzir o custo computacional nessas simulações, empregam-se mecanismos reduzidos de cinética química. Esses mecanismos reduzidos levam em consideração somente os que possuem os principais aspectos do processo de combustão em análise, neste caso tanto espécies químicas como reações são eliminadas da simulação (KUO, 1986; TURNS, 2013).

Uma maneira de contornar este obstáculo, de simular as reações químicas, recorrem-se a modelos simplificados de reação de passo único com baixo custo computacional que demanda um tempo computacional da ordem de minutos. Neste caso, algumas hipóteses simplificadoras devem ser impostas ao problema. Neste trabalho utiliza-se o procedimento de Shvab-Zel'dovich citado anteriormente, onde, os termos de reação química são suprimidos da equação após algumas manipulações algébricas nas equações.

1.4 Estrutura do trabalho

O trabalho está dividido em quatro seções: introdução, fundamentação teórica, metodologia e resultados preliminares. A introdução irá mostrar uma visão geral do trabalho a partir da contextualização do tema, situando o leitor com o problema em estudo. Na fundamentação teórica, é exposto todo o embasamento teórico necessário para o desenvolvimento do trabalho, também é realizado uma revisão bibliográfica sobre combustão de gotas. A metodologia deste trabalho fornece etapas e os métodos utilizados para resolver as equações que descrevem o problema de combustão de gotas. E por fim, os resultados são apresentados e discutidos.

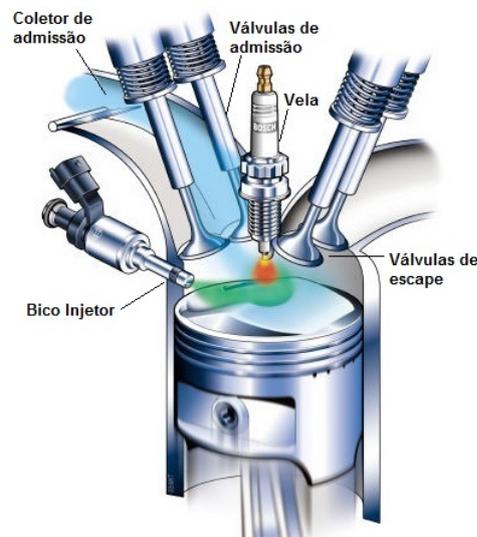
2 Fundamentação teórica

Este capítulo uma fundamentação teórica sobre o tema deste trabalho e está subdividido em combustão, chama, combustão de spray, combustão de gotas e revisão bibliográfica.

2.1 Combustão

Combustão é definida como um processo de reação química exotérmica que libera uma quantidade de energia substancial na forma de calor. Os parâmetros essenciais para a validação dos sistemas e combustão são temperatura e composição dos produtos da combustão. Se todo o calor gerado pela reação química for empregado unicamente para aumentar a temperatura dos produtos da combustão, então essa temperatura é chamada de temperatura de chama adiabática (ou temperatura de chama) (GLASSMAN; YETTER; GLUMAC, 2014; EL-MAHALLAWY; HABIK, 2002). Na Fig. 1 é demonstrada uma aplicação de bico injetor no motor de combustão interna.

Figura 1 – Aplicação de bico injetor na combustão



Fonte:(MARTINS, 2006)

2.2 Chama

Chama é definida como o lugar geométrico onde ocorre a reação química com a capacidade de propagação através de um meio adequado.

2.2.1 Tipos de chamas

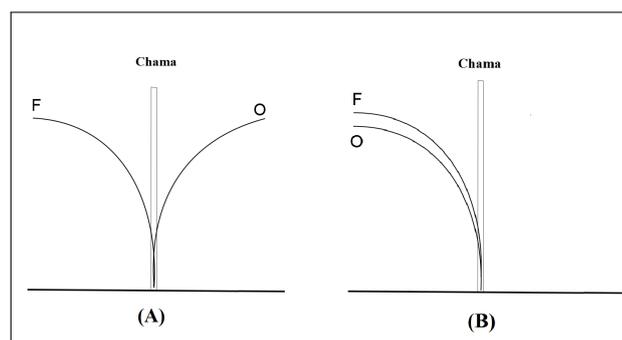
A chamas podem ser classificadas quanto ao tipo de mistura, sendo dividida em duas classes:

Chama não pré-misturada ou difusiva pode ser definida como uma chama em que combustível e oxidante estão inicialmente separados, neste caso a reação química ocorre numa zona estreita que pode ser aproximada como uma superfície que separa o combustível do oxidante. São exemplos de chamas difusivas, a queima de uma vela de parafina, a chama de motores a diesel, queima de gotas e spray (conjunto de gotas) e "flares" de poços de petróleo (KUO, 1986).

Chama pré-misturada, caracterizada pela pré-mistura entre o combustível e oxidante antes da ignição, neste caso após sua ignição, uma frente de chama é formada e se propaga com uma determinada velocidade característica até consumir toda pré-mistura. São exemplos de chamas pré-misturadas, a chama do fogão de cozinha, as chamas de motores a gasolina e álcool entre outros. (TURNS, 2013).

A nível global, um sistema de combustão frequentemente consiste de dois reagentes: um combustível e um oxidante. Estes dois reagentes devem ser reunidos e misturados a nível molecular antes da reação química, como mencionado. Portanto, os mecanismos de mistura são elementos essenciais influenciando a combustão. A exigência da mistura também implica que pelo menos um dos reagentes deve estar na fase gasosa ou na fase líquida de modo que a suas moléculas podem "se espalhar" em torno das do outro reagente. Na Fig. 2 é exemplificado as duas classes de mistura que classificam uma chama.

Figura 2 – Tipos de chamas: (A) Não Pré-misturada, (B) Pré-misturada



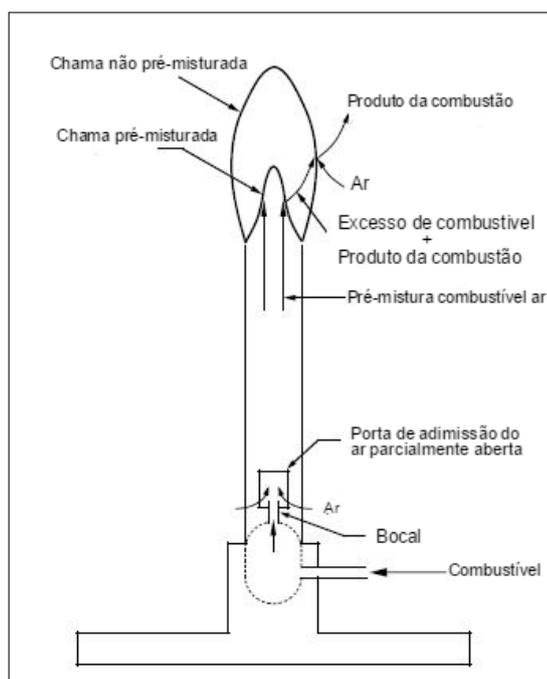
Devido à importância da mistura molecular, os sistemas de combustão apresentam comportamento diferente, dependendo da pré-mistura dos reagentes ou não.

Uma chama Bunsen, mostrada na figura 3, fornece uma ilustração dos dois tipos de chamas, à medida que o gás combustível sai do orifício do combustível, a entrada de ar é ajustada e então misturado com o gás combustível à medida que eles viajam ao longo do tubo do queimador. A reação subsequente entre o combustível e o oxigênio nesta forma uma chama pré-misturada. Assumindo que a taxa de fluxo de ar pode ser

manipulada, então a chama resultante pode ser rica ou pobre em combustível, dependendo se o oxigênio ou combustível pode ser completamente consumido. Se esta mistura de combustível for pobre, na sequência o excesso de oxigênio permanecerá sem reagir após passar pela chama e será eliminado para o ambiente. No entanto, se a mistura for rica em combustível, depois de passar pela chama pré-misturada o combustível em excesso, ou seja, as espécies intermediárias relacionadas com o combustível, podem ainda reagir com oxigênio no ambiente.

Uma vez que o oxigênio e as espécies encontram-se inicialmente separados, eles precisam ser transportados para uma região que ocorram as reações. Isto resulta numa chama não pré-misturada quase que completa. Quando a entrada de ar está completamente fechada, a mistura de queimadores não contém qualquer oxigênio, assim vai existir apenas uma chama difusiva.

Figura 3 – Esquema chama de Bunsen

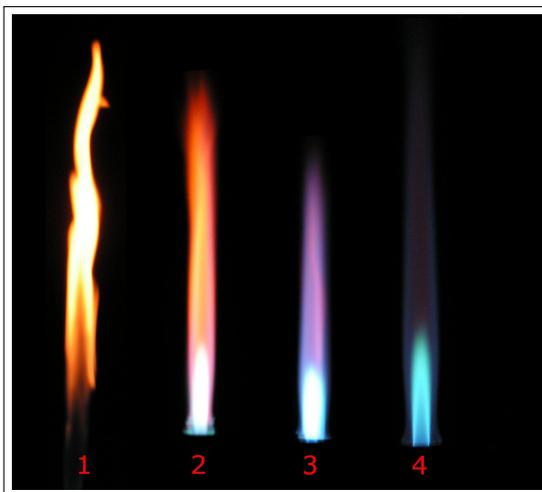


Fonte:(LAW, 2010)

Pode-se analisar na figura 4 os tipos de chamas produzidos pelo bico de bunsen dependendo do fluxo de ar através do bocal, no caso 1 tem-se o bocal totalmente fechado, onde se produz uma chama não pré-misturada, a chama 2 é produzida com uma pequena abertura no bocal para a passagem do ar, já na chama 3 o bocal está com uma passagem de ar maior e na chama 4 o bocal está totalmente aberto, resultando em uma chama pré-misturada (FOGAÇA, 2016).

A chama não pré-misturada, chamada de "Chama Difusiva" pelos autores Burke e Schumann que desenvolveram uma solução analítica em 1928 com a comprovação experi-

Figura 4 – Tipos de chama produzidas pelo queimador Bunsen



Fonte:(FOGAÇA, 2016)

mental. Nessa solução os autores consideraram que o tempo de mistura é muito pequeno, o que implica em uma cinética muito rápida, ou seja, a escala de tempo para cinética química é muito mais curta do que as escalas de tempo para a convecção e difusão, assim caracterizando uma chama muito fina (BURKE; SCHUMANN, 1928).

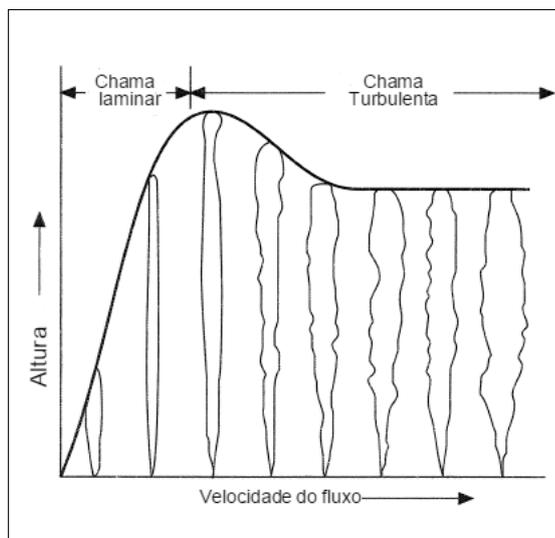
2.2.2 Classificação da chama quanto ao regime

Uma chama também é caracterizada pela natureza do fluxo, seja ele laminar ou turbulento. Em um fluxo laminar existem distintas linhas de fluxo, geradas pelo movimento de convecção, enquanto que em um fluxo turbulento essas linhas não existem, de modo que em qualquer ponto no espaço as quantidades de fluxo flutuam aleatoriamente no tempo. A existência de turbulência geralmente facilita o processo de mistura entre combustível e oxidante, portanto, tem uma influência particularmente forte em sistemas não pré-misturados nos quais a mistura dos reagentes é essencial. A mistura final antes da reação pode ter lugar, no entanto, deve ainda ocorrer através do processo de difusão molecular se o fluxo é laminar ou turbulento (LAW, 2010). A figura 5 demonstra o processo de transição de uma chama, com o aumento da velocidade do fluxo, convertendo-se do regime laminar para o turbulento.

2.3 Combustão de Spray

Uma vez que a queima de combustíveis líquidos ocorre na fase gasosa, o combustível é aquecido e vaporizado pela transferência de calor do ambiente gasoso pela superfície do combustível. Logo a taxa de vaporização é diretamente proporcional com a área superficial de contato do combustível líquido com o ambiente gasoso. Neste sentido, a atomização é

Figura 5 – Mudança no tipo de chama com aumento na velocidade do fluxo



Fonte:(LEES, 2012)

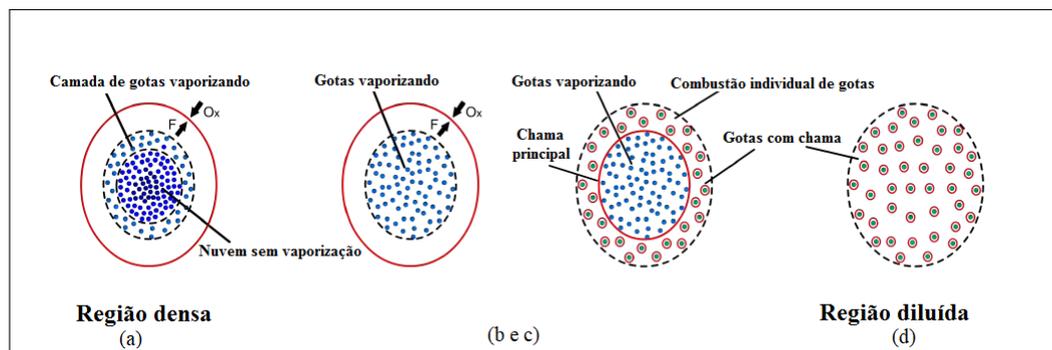
principal mecanismo de aumento de área superficial entre combustível e ambiente gerando um significativo aumento na transferência de calor e taxa de vaporização. O combustível, uma vez atomizado antes de sua queima dá origem à combustão de uma nuvem de gotas chamada de combustão de spray (LORELL; WISE; CARR, 1956).

Geralmente a atomização pode ser gerada de diversos modos como por exemplo a turbulência no jato líquido ou até mesmo pelo cisalhamento entre o jato e o ambiente envolvente. Nas proximidades do bico injetor há uma densa região de gotas de diversos tamanhos, enquanto que em um local mais afastado há a formação de uma região de gotas diluídas de tamanhos mais uniformes (BIROUK; GÖKALP, 2006; WARNATZ et al., 2001).

Uma tentativa de modelar a combustão do spray é considerar o spray como uma nuvem esférica de gotas. Neste contexto, podem ocorrer diferentes regimes de queima, desde uma região de nuvens densas até uma região de pulverização diluída, conforme ilustrado na Fig. 6. Na região densa, uma nuvem de gotas é cercada por uma chama (a). Esta nuvem pode conter uma região interna (Região fria) de gotas que não estão evaporando. Na configuração intermediária, ocorre a combustão de gotas isoladas na região externa da nuvem de gotas vaporizando (b e c). Dentro da nuvem, uma gota não pode ser tratada como se fosse uma gota isolada. Nesse caso a gota é influenciada por gotas vizinhas e, até certo ponto, por todas as gotas no spray (WARNATZ et al., 2001).

Em uma região diluída (d), as gotas encontram-se distantes entre si, conseqüentemente a influência das gotas vizinhas torna-se negligenciável. Nessa configuração, as chamas enclausuram cada gota, como mostrado na Fig. 6.

Figura 6 – Diferentes regimes de queima na combustão de spray



Fonte: Adaptado (CRISTALDO, 2013)

2.4 Combustão de gotas

O estudo da combustão de gotas isoladas, além de ter sua descrição relativamente simples, ela também contribui no problema da combustão de uma nuvem de gotas (spray). Sua importância pode ser medida pela sua vasta gama de aplicações, que vão desde a geração de energia elétrica ao transporte aeroespacial.

A teoria clássica de combustão de gotas é baseada em número de Reynolds baixos, quando os efeitos do movimento das gotas em relação à atmosfera ambiente podem ser negligenciados (GODSAVE, 1953; SPALDING, 1953; WISE; ABLOW, 1957). A negligência do movimento relativo é perfeitamente justificada para gotas em dispositivos práticos, por exemplo, motores diesel, onde as gotas de combustíveis são tão pequenas que elas acompanham o escoamento tornando-se estáticas em relação ao escoamento, além disso o efeito da gravidade é desprezível devido ao tamanho reduzido das gotas. Sob estas condições, os processos que ocorrem na fase líquida e gasosa da gota possuem simetria esférica. Através destas suposições, uma chama difusiva esférica em volta da gota é estabelecida com a transferência de dois reagentes com direções opostas.

Um destes reagentes (combustível) é proveniente na superfície da gota, enquanto que a fonte do outro(oxidante) está localizada na fase gasosa a uma distância "infinita" em relação à gota líquida. Como resultado da reação química exotérmica entre os dois reagentes, a difusão é estabelecida a uma certa distância da superfície da gota. O modelo clássico de combustão de gotas foi formulado por (GODSAVE, 1953) e (SPALDING, 1953) para a queima de uma única gota de combustível em um ambiente oxidante estagnado (Fig.

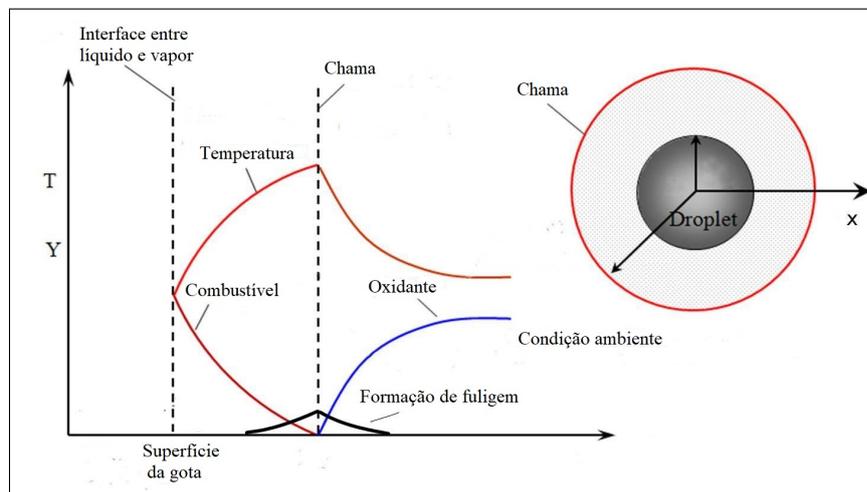
Com o desenvolvimento dos estudos na combustão de gotas foi possível criar um modelo clássico, mostrado na figura 7, este modelo considera que a zona de reação química é muito estreita, ou seja, a combustão ocorre numa zona de mistura infinitesimal, portanto, sob estas condições a chama divide o domínio físico como lado do combustível e lado do

oxidante. Esta hipótese resulta num modelo simplificado sem a necessidade de resolver as equações com o termo de reação química que é fortemente não linear (exponencial de Arrhenius).

No modelo clássico de combustão de gotas, a posição da chama é onde se tem a maior temperatura e as concentrações de combustível e oxidante vão a zero, ou seja, não tem escape de combustível e nem de oxidante pela chama durante o processo de combustão (GODSAVE, 1953).

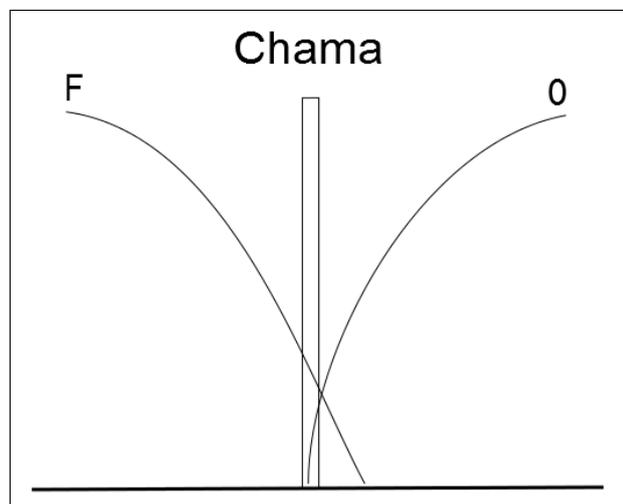
Na figura 7 é mostrado o escape de combustível pela chama formando fuligem (soot), representada pela linha preta. Essa formação de fuligem gerada pelo escape de combustível (Combustível que não sofre oxidação) faz com que ocorra uma redução na temperatura da chama.

Figura 7 – Modelo clássico de combustão de gotas



Essa formação de fuligem pode ser melhor representada na Fig. 8, onde se tem um escape de combustível na chama, gerando fuligem.

Figura 8 – Escape de combustível pela chama



No processo de combustão de gotas isoladas, uma vez que a reação de combustão ocorre na fase gasosa, o calor é transferido do ambiente para a gota fornecendo energia térmica suficiente para vaporizar o líquido e formar um vapor na superfície da mesma, difundindo com o oxidante. Essa vaporização causa uma redução no tamanho do raio da gota até que a mesma seja evaporada por completo (TURNS, 2013).

2.4.1 Formação de fuligem

O processo de formação de fuligem ou de partículas de carbono é um fenômeno que ocorre na combustão de hidrocarbonetos, o combustível não queimado na chama é o responsável pela formação a fuligem. Modelar o processo de formação de fuligem envolve um complicado mecanismo de cinética química envolvendo a transformação de moléculas de combustível em zona ricas de combustível sobre a influência de calor (chamado de pirólise) para produzir novas moléculas de combustível que contém mais moléculas de carbono e menor moléculas de hidrogênio em relação ao combustível original. No entanto, é possível caracterizar estes complexos processos em termos de pequenas quantidades de taxa de processos dependentes de concentrações de espécies predominantes e temperatura de tal maneira que a formação de fuligem pode ser representada por um termo fonte de reação química (LAW, 2010).

Para a combustão de uma gota de combustível isolada, considera-se uma reação global de passo único, conforme Eq. (2.1), onde,



No presente modelo considera-se um modelo simplificado de reação, onde $F \rightarrow Soot(-Q_{so})$ representa que, o combustível não queimado F pela chama gera uma certa quantidade de fuligem $Soot(-Q_{so})$ que é representada como uma função de uma pequena quantidade de perda de calor $-Q_{so}$ necessária para gerar a fuligem.

O termo de reação química que representa a geração de fuligem é representada por

$$\dot{\omega}_{so} = \lambda_{so} \Delta(x - x_{so}) \quad (2.2)$$

onde $\dot{\omega}_{so}$ é a taxa de reação na sua forma adimensional da pirólise, x é a coordenada espacial e x_{so} é a posição onde a fuligem é produzida, λ_{so} é a taxa de produção de fuligem que é aproximada por $\lambda_{so} = \phi_m(\lambda/S)$, onde ϕ_m é uma constante adimensional que relaciona a taxa de produção de fuligem com a taxa de vaporização da gota de combustível (λ). O modelo admite ϕ_m como um valor conhecido, assim, a formação total de fuligem é determinada conforme

$$\int_a^x \frac{S\dot{\omega}_{so}}{\lambda} x^2 dx = \begin{cases} 0, & x < x_{so} \\ \phi_m x_{so}^2, & x \geq x_{so} \end{cases} \quad (2.3)$$

A posição da zona de formação de fuligem x_{so} é determinada a partir da temperatura de formação de fuligem $\theta(x_{so}) = \theta_{so}$. O valor de θ_{so} corresponde a uma temperatura específica $T_{so} = 1400K$ que é temperatura de formação de fuligem (MIKAMI et al., 1994).

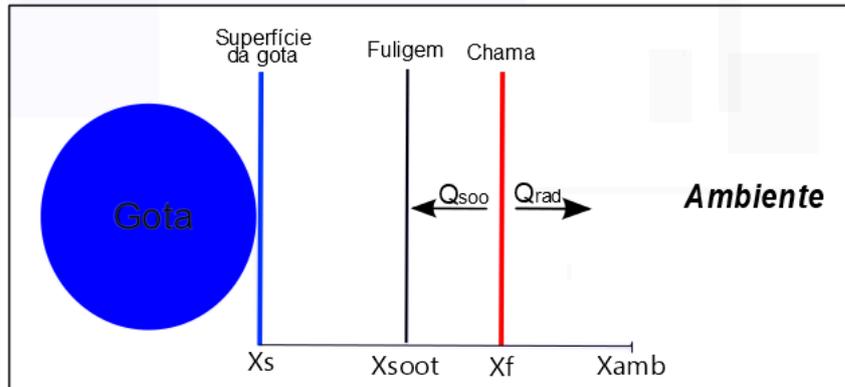
Além disso, é admitido que o calor necessário para realizar a formação de fuligem Q_{so} é uma valor conhecido, portanto $Q_{so}/Q \equiv \phi_q$, onde Q é o calor de combustão na condição adiabática.

2.4.2 Transferência de calor por radiação

O processo de transferência de calor por radiação consiste no transporte de energia através de ondas eletromagnéticas, nesse processo não é necessário um meio material para a energia se propagar. Além da transferência de calor ocorrer nos sólidos e nos líquidos ela também pode ocorrer nos gases, como é o caso da combustão (BERGMAN, 2011).

A figura 9 apresenta um esquema para demonstrar a perda de calor que ocorre na combustão de uma gota isolada. Como a chama, que está situada ao redor da gota, está em uma temperatura elevada, tem-se uma transferência de calor da chama para o ambiente. A chama está perdendo calor de duas maneiras, por radiação Q_{rad} e pela formação de fuligem Q_{so} , que fazem com que ocorra uma redução na temperatura da chama.

Figura 9 – Esquema de exemplificação da transferência de calor por radiação na gota



A radiação é tratada de forma opticamente fina, uma aproximação de gás, com o comprimento de absorção médio de Planck a ser calculado a partir das bandas espectrais conhecidas de CO_2 and H_2O e das partículas de fuligem, que podem ser aproximadas por um corpo negro (LAW, 2010). Assim, Q_{rad} pode ser estimado por

$$\frac{S+1}{Q} Q_{rad} = \sigma \frac{\theta^4 - 1}{\theta_{af}^4 - 1} \quad (2.4)$$

em que a emissividade normalizada σ é definida como $\sigma = [4\bar{a}_0^2 \sigma_B T_\infty^3 (S+1)(\theta_{af}^4 - 1)] / (l_{Paf} c_{p\infty} \rho_\infty \alpha_\infty Q)$, l_P é o comprimento médio de absorção de Planck e σ_B é a constante

de Stefan-Boltzmann. l_{Paf} é o comprimento médio de absorção de Planck determinado na temperatura de referência da chama ($\phi_m = 0$), onde θ é a temperatura adimensionalizada.

2.5 Revisão bibliográfica

No seção será apresentada uma uma breve revisão dos modelos de chama estreita utilizados para resolver o problema de combustão de uma gota isolada.

A descrição do problema de combustão de gotas é relativamente simples para a condição de baixa pressão, porque a fase gasosa próxima da gota se comporta em regime quase estacionário quando analisada na escala de tempo de vida da gota. Neste caso, o problema da combustão de gotas apresenta uma solução analítica para o caso em que as propriedades termodinâmicas e térmicas são consideradas constantes (SPALDING, 1953; GODSAVE, 1953).

Para evitar a integração das equações de conservação com o termo de reação química, foi imposta a condição de chama infinitamente fina, que permite dividir o domínio em duas zonas (zona de combustível e zona de oxigênio) sem a necessidade do termo de reação química, já que mesma encontra-se colapsada numa região estreitamente fina e realizar a integração das equações de conservação separadamente em lado do combustível e lado da chama e o acoplamento das equações são obtidas pelas condições de contorno na chama, neste caso, a continuidade e conservação de fluxo.

Uma melhoria no modelo ocorreu impondo uma variação linear dos coeficientes termodinâmicos e de transporte sobre a temperatura (GOLDSMITH, 1954).

Ao invés de integrar as equações evitando cruzar a chama, foi utilizado o procedimento de Shvab-Zel'dovich para eliminar o termo de reação química, o que permitiu a integração contínua de um limite para outro.

O próximo passo na melhoria do modelo de combustão de gotas foi feita pela incorporação da dependência dos coeficientes de transporte sobre a energia da temperatura (KASSOY; WILLIAMS, 1968) e a dependência completa da composição e temperatura dos coeficientes de transporte (RAGHUNANDAN; MUKUNDA, 1977; WILLIAMS, 1985).

Mais recentemente, foram apresentadas extensões para o modelos combustão de gotas. O problema, no qual os coeficientes de transporte foram considerados dependentes de uma potência da temperatura e do calor específico constante, foi resolvido analiticamente (FACHINI, 1999). Este modelo foi capaz de tratar o número de Lewis para o combustível e constante de oxigênio diferente da unidade. Para evitar a integração do termo de reação química, empregou-se a formulação de Shvab-Zel'dovich, mas mesmo com isso a integração só foi possível com a partição do domínio na zona de combustível

e na zona de oxigênio. A integração contínua em todo o domínio só é possível em termos numéricos. Este procedimento numérico foi utilizado para analisar a influência da fuligem na combustão de gotas (FACHINI, 2006).

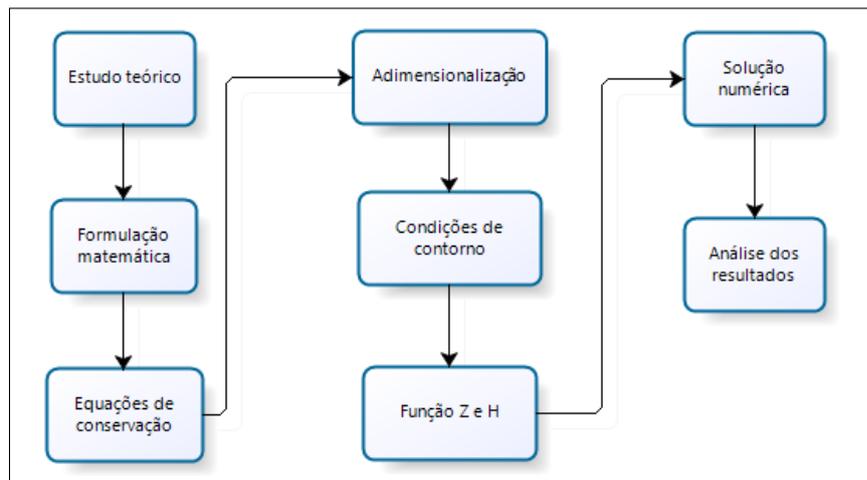
Este trabalho é uma extensão do modelo de gotas proposto por (FACHINI, 2006). Na presente análise, além da formação de fuligem, a perda de calor devido a formação de fuligem e perda de calor radiativa são considerados. A inclusão desses processos no modelo impõe que as funções de Shvab-Zel'dovich (frações de mistura e excesso de entalpia) não sejam conservadas. Mesmo eliminando o termo de reação química, as equações de equilíbrio para essas funções apresentam termos fonte devido à diferença de difusividade de massa entre as espécies, formação de fuligem e perda de energia radiativa (SIRIGNANO, 2002).

A característica mais importante revelada pelo presente modelo é a forte dependência da posição da chama na formação de fuligem. Por muitas décadas, a discrepância da posição da chama determinada teórica e experimentalmente motivou muitas análises teóricas (JACKSON; AVEDISIAN, 1994; MIKAMI et al., 1994; JACKSON; AVEDISIAN, 1996; NAYAGAM et al., 1998; MANZELLO et al., 2000; KUMAR; RAY; KALE, 2002). O trabalho anterior mostrou que a formação de fuligem é o processo mais importante para estabelecer a posição da chama (FACHINI, 2006). Além de melhorar o modelo anterior, o presente modelo é capaz de destacar facilmente a influência dos outros processos sobre as propriedades de combustão das gotas.

3 Metodologia

Neste capítulo será apresentado a metodologia utilizada para alcançar os objetivos específicos e conseqüentemente o objetivo geral do trabalho. A figura 10 apresenta o fluxograma de atividades a serem desenvolvidas durante a realização desse trabalho.

Figura 10 – Fluxograma de atividades



3.1 Formulação matemática

Nesta seção será apresentado todas as considerações para o desenvolvimento das equações que modelam o problema da combustão de uma gota isolada.

O desenvolvimento de soluções de interesse técnico na área de mecânica dos fluídos geralmente requer um desenvolvimento teórico e também resultados experimentais. Realizando um agrupamento de grandezas significativas obtém-se parâmetros adimensionais, assim consegue-se reduzir o número de variáveis que descreve o problema, deixando os resultados mais compactos para que os mesmos possam ser aplicados a situações semelhantes.

3.1.1 Condições impostas para o problema

- Considera-se que o problema possui simetria esférica;
- Escoamento unidimensional (Direção radial);
- Dissipação viscosa (Φ) desprezível;
- O processo de combustão ocorre em regime de baixa pressão ($\frac{\rho_g}{\rho_l} \ll 1$, onde ρ_g e ρ_l representam massa específica na fases gasosa e fase líquida, respectivamente).

- **Fase líquida:** Propriedades como massa específica ρ_l , o calor específico c_l e a condutividade térmica k_l da fase líquida são considerados constantes.;
- **Fase gasosa:** Em região afastada da gota, o gás possui propriedades constantes: massa específica ρ_∞ , condutividade térmica k_∞ , calor específico a pressão constante c_p . No ambiente gasoso, numa região afastada da chama, a temperatura e fração de massa do oxidante são constantes representadas por T_∞ e Y_{O_∞} respectivamente.

3.1.2 Fase líquida

No presente modelo é considerado que a gota encontra-se numa temperatura uniforme igual à sua temperatura de ebulição, assim o calor da chama que é transferido para a gota é utilizado somente para vaporizar a gota. Neste caso não é necessário resolver a fase líquida, já que o fluxo de calor dentro da gota é nulo. Também é assumido que o raio da gota é constante, ou seja, o problema é representado por uma esfera porosa injetando vapor de combustível na fase gasosa.

3.1.3 Fase gasosa: Equações Governantes

Para descrever a fase gasosa utilizam-se três equações; conservação da massa, de espécies e a equação da conservação de energia.

A equação geral da conservação da massa é representada por

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (\rho r^2 V) = 0 \quad (3.1)$$

onde ρ , t , r e V representam, massa específica, tempo, coordenada radial e velocidade média da mistura da massa de gases, respectivamente.

A equação de conservação de espécies é expressa por

$$\rho \frac{\partial Y_i}{\partial t} + \rho V \frac{\partial Y_i}{\partial r} - \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \rho D_i \frac{\partial Y_i}{\partial r} \right) = -S_i \rho B Y_i^{\nu_1} Y_{i^c}^{\nu_2} e^{-E/(RT)} \quad (3.2)$$

onde D representa o coeficiente de difusão mássica, B é o fator de frequência, Y_i a fração mássica das espécies ($i = F$ combustível, $i = O$ oxidante, $i = H_2O$ água e $i = CO_2$ gás carbônico e i^c é a espécie que reage com a i espécie para gerar a reação química), ν_1 e ν_2 são constantes que dependem da massa da i espécie. Definindo $S = Le_O \nu_O / Y_{O_2\infty}$, então têm-se que $S_F = 1$, $S_O = \nu / Y_{O,\infty}$, $S_{H_2O} = le_{H_2O} \nu_{H_2O} / Le_F$ e $S_{CO_2} = le_{CO_2} \nu_{CO_2} / Le_F$.

A equação que descreve a conservação de energia pode ser escrita como

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} + \rho V c_p \frac{\partial T}{\partial r} - \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 k \frac{\partial T}{\partial r} \right) = S_i q \rho B Y_i^{\nu_1} Y_{i^c}^{\nu_2} e^{-E/(RT)} \quad (3.3)$$

onde c_p , k e T , representam respectivamente, o calor específico à pressão constante, condutividade térmica e temperatura.

3.2 Adimensionalização das equações

O problema é resolvido com as equações na forma adimensional, pois assim é possível resolver o problema de forma universal para qualquer combustível e oxidante, além de simplificar as equações fazendo análise de escalas.

As variáveis utilizadas nesta análise são definidas como: a^* - raio da gota; ρ_l^* - massa específica da fase líquida; k_l^* - condutividade térmica da fase líquida; c_l^* - calor específico da fase líquida; ρ_∞^* - massa específica do ambiente; k_∞^* - condutividade térmica do ambiente; c_p^* - calor específico a pressão constante; T_∞^* - temperatura ambiente; $Y_{O_\infty}^*$ - fração mássica de oxidante no ambiente; α_∞^* - difusividade térmica ambiente; $D_{i_\infty}^*$ - difusividade mássica da espécie $i = O, F, H_2O, CO_2$, sendo oxidante, combustível, água e gás carbônico; $L_i = \alpha_\infty/D_i$ - número de Lewis; a_0^* - raio inicial da gota; t_c^* - ordem de magnitude do tempo de vida da gota. O sobrescrito * representa as variáveis dimensionais.

$$\theta = \frac{T^*}{T_\infty^*}, \quad \varrho = \frac{\rho^*}{\rho_\infty^*}, \quad y_f = Y_F^*, \quad y_o = \frac{Y_O^*}{Y_{O_\infty}^*}, \quad y_{CO_2} = Y_{CO_2}^*$$

$$y_{H_2O} = Y_{H_2O}^*, \quad v = \frac{V^* a_0^*}{\alpha_\infty^*}, \quad p = \frac{p^*}{R_g \rho_\infty^* T_\infty^*}, \quad x = \frac{r^*}{a_0^*}, \quad \tau = \frac{t^*}{t_c^*}. \quad (3.4)$$

$$v = \frac{V^*}{V_\infty^*}, \quad V_\infty = \frac{\alpha_\infty^*}{a_0^*}, \quad Q = \frac{q^*}{c_p^* T_\infty^*}, \quad a = \frac{a^*}{a_0^*}$$

onde θ é a temperatura, ϱ é a massa específica, v é a velocidade radial adimensional, y_f , y_o , y_{H_2O} e y_{CO_2} são as frações mássicas de combustível, oxidante, H_2O e CO_2 , Q é o calor da combustão, R_g é a constante específica dos gases, x é a coordenada radial adimensionalizada pelo raio inicial da gota, $t_c^* = a_0^{*2}/(\alpha_\infty^* \varepsilon)$ é o tempo adimensionalizado definido pela razão entre o tempo e a ordem de magnitude do tempo de vida da gota, e $\alpha_\infty = k_\infty/c_p \rho_\infty$ é a difusividade térmica e $\varepsilon = \rho_\infty/\rho_l$.

A condutividade térmica (k) e os coeficientes de difusão do combustível e oxidante (D_F e D_O), são funções da temperatura T , conforme a relação expressa na Eq. (3.5). O expoente "n" vai depender de cada combustível utilizado, normalmente em modelos de combustão considera-se $n = 0, 5$.

$$\frac{\rho D_F}{\rho_\infty D_{F_\infty}} = \frac{\rho D_O}{\rho_\infty D_{O_\infty}} = \frac{k}{k_\infty} = \theta^n \quad (3.5)$$

3.2.1 Conservação de Massa

Nesta subseção será apresentada a adimensionalização da equação da conservação de massa para a fase gasosa.

3.2.1.1 Fase gasosa

Substituindo as variáveis adimensionais na equação de conservação da massa Eq. (3.1), resulta em

$$\frac{\partial(\varrho\rho_\infty)}{\partial(\tau t_c)} + \frac{1}{(x^2 a_0^2)} \frac{\partial}{\partial(x a_0)} (\varrho\rho_\infty x^2 a_0^2 \frac{v\alpha_\infty}{a_0}) = 0 \quad (3.6)$$

Com o intuito de eliminar o ρ_∞ e t_c do primeiro termo da equação, divide-se todos os termos da equação por ρ_∞ e multiplica a mesma por t_c , lembrando que $t_c^* = a_0^{*2}/(\alpha_\infty^* \varepsilon)$.

$$\frac{\partial(\varrho)}{\partial(\tau)} + \frac{\alpha_\infty t_c}{(x^2 a_0^2)} \frac{\partial}{\partial(x)} (\varrho x^2 v) = 0 \quad (3.7)$$

Substituindo a variável t_c e multiplicando toda Eq. (3.7) por ε , resulta em

$$\varepsilon \frac{\partial \varrho}{\partial \tau} + \frac{1}{x^2} \frac{\partial}{\partial x} (\varrho x^2 v) = 0 \quad (3.8)$$

onde $\varepsilon \equiv \rho_g/\rho_l$

3.2.2 Conservação de espécies

Nesta seção é realizada a adimensionalização da equação de espécie combustível, para as espécies oxidante, água e gás carbônico os passos são análogos.

Substituindo as variáveis adimensionais na equação de conservação do combustível (Eq.3.2) resulta em

$$\begin{aligned} \rho \frac{\partial(\varrho\rho_\infty)}{\partial(\tau t_c)} + \frac{(\varrho\rho_\infty v)}{(a_0)} \frac{\partial y_F}{\partial x} - \frac{1}{x^2 a_0^2} \frac{\partial}{\partial x} (x^2 \varrho\rho_\infty) \left(\frac{\rho_\infty D_{F_\infty} \theta^n}{\rho} \right) \frac{\partial y_F}{\partial x} = \\ = -s_F \varrho\rho_\infty \frac{Da\alpha_\rho}{a_0^2 Y_{O_\infty}^{\nu_1}} Y_{O_\infty}^{\nu_1} Y_F^{\nu_2} e^{\frac{-E}{RT_\infty\theta}} \end{aligned} \quad (3.9)$$

Multiplicando os dois lados da Eq. (3.9) por t_c e ε e dividindo por ρ_∞ obtém-se

$$\begin{aligned} \varepsilon \varrho \frac{\partial(y)}{\partial(\tau)} + \frac{(\varepsilon \varrho \alpha_\infty v)}{(a_0^2)} \frac{\partial y_F}{\partial x} - \frac{\varepsilon t_c}{x^2 a_0^2} \frac{\partial}{\partial x} \left(x^2 \frac{\rho_\infty D_{F_\infty} \theta^n}{\rho} \frac{\partial y_F}{\partial x} \right) = t_c s_F \varrho \frac{Da\alpha_\rho}{a_0^2 Y_{O_\infty}^{\nu_1}} (y_O Y_{O_\infty})^{\nu_1} Y_F^{\nu_2} e^{\frac{-E}{RT_\infty\theta}} \\ = -\varepsilon t_c s_F \varrho \frac{Da\alpha_\rho}{a_0^2 Y_{O_\infty}^{\nu_1}} (y_O Y_{O_\infty})^{\nu_1} Y_F^{\nu_2} e^{\frac{-E}{RT_\infty\theta}} \end{aligned} \quad (3.10)$$

Sabendo que o número de Lewis é igual a (α_∞/D_F) e eliminando os termos em comum na Eq. (3.10) obtém-se a equação adimensionalizada da conservação de espécie de combustível.

$$\varepsilon \varrho \frac{\partial y_F}{\partial \tau} + \varrho v \frac{\partial y_F}{\partial x} - \frac{1}{x^2} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{x^2 \theta^n}{L_F} \frac{\partial y_F}{\partial x} \right) = -s_F \varrho D a y_O^{\nu_1} y_F^{\nu_2} e^{-\Sigma/\theta} \quad (3.11)$$

3.2.3 Conservação de energia

Substituindo as variáveis adimensionais na equação de conservação de energia (Eq.3.3), resulta em

$$\rho_\infty \varrho c_p \frac{\partial(T_\infty \theta)}{\partial(\tau t_c)} + \rho_\infty \varrho v V_\infty c_p \frac{\partial(T_\infty \theta)}{\partial(x a_0)} - \frac{1}{x^2 a_0^2} \frac{\partial}{\partial(x a_0)} \left(x^2 a_0^2 k_\infty \theta^n D_F \frac{\partial(T_\infty \theta)}{\partial(x a_0)} \right) = s_F Q c_p T_\infty \rho_\infty \varrho B y_O^{\nu_1} Y_{O_\infty}^{\nu_1} y_F^{\nu_2} e^{-E/(RT_\infty \theta)} \quad (3.12)$$

Substituindo as variáveis t_c e V_∞ , pode-se reescrever a equação como

$$\rho_\infty \varrho c_p \frac{\partial(T_\infty \theta)}{\partial(\tau t_c)} + \rho_\infty \varrho v V_\infty c_p \frac{\partial(T_\infty \theta)}{\partial(x a_0)} - \frac{1}{x^2 a_0^2} \frac{\partial}{\partial(x a_0)} \left(x^2 a_0^2 k_\infty \theta^n D_F \frac{\partial(T_\infty \theta)}{\partial(x a_0)} \right) = s_F Q c_p T_\infty \rho_\infty \varrho B y_O^{\nu_1} Y_{O_\infty}^{\nu_1} y_F^{\nu_2} e^{-E/(RT_\infty \theta)} \quad (3.13)$$

Rearranjando os termos reescreve pode reescrever a equação adimensionalizada da conservação de energia.

$$\varepsilon \varrho \frac{\partial \theta}{\partial \tau} + \varrho v \frac{\partial \theta}{\partial x} - \frac{1}{x^2} \frac{\partial}{\partial x} \left(x^2 \theta^n \frac{\partial \theta}{\partial x} \right) = s_F Q \varrho D a y_O^{\nu_1} y_F^{\nu_2} e^{-\Sigma/\theta} \quad (3.14)$$

3.2.4 Equações governantes adimensionalizadas

Portanto as equações que descrevem a fase gasosa, ou seja para um $x > a(\tau)$ na forma adimensional estão descritas nas Eqs. (3.15 a 3.20).

$$\varepsilon \varrho \frac{\partial \varrho}{\partial \tau} + \frac{1}{x^2} \frac{\partial}{\partial x} (x^2 \varrho v) = 0 \quad (3.15)$$

$$\varepsilon \varrho \frac{\partial y_O}{\partial \tau} + \varrho v \frac{\partial y_O}{\partial x} - \frac{1}{x^2} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{x^2 \theta^n}{L_O} \frac{\partial y_O}{\partial x} \right) = -s_O \varrho D a y_O^{\nu_1} y_F^{\nu_2} e^{-\Sigma/\theta} \quad (3.16)$$

$$\varepsilon \varrho \frac{\partial y_F}{\partial \tau} + \varrho v \frac{\partial y_F}{\partial x} - \frac{1}{x^2} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{x^2 \theta^n}{L_F} \frac{\partial y_F}{\partial x} \right) = -s_F \varrho D a y_O^{\nu_1} y_F^{\nu_2} e^{-\Sigma/\theta} \quad (3.17)$$

$$\varepsilon \rho \frac{\partial y_{CO_2}}{\partial \tau} + \rho v \frac{\partial y_{CO_2}}{\partial x} - \frac{1}{x^2} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{x^2 \theta^n}{L_{CO_2}} \frac{\partial y_{CO_2}}{\partial x} \right) = s_{CO_2} \rho Da y_O^{\nu_1} y_F^{\nu_2} e^{-\Sigma/\theta} \quad (3.18)$$

$$\varepsilon \rho \frac{\partial y_{H_2O}}{\partial \tau} + \rho v \frac{\partial y_{H_2O}}{\partial x} - \frac{1}{x^2} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{x^2 \theta^n}{L_{H_2O}} \frac{\partial y_{H_2O}}{\partial x} \right) = s_{H_2O} \rho Da y_O^{\nu_1} y_F^{\nu_2} e^{-\Sigma/\theta} \quad (3.19)$$

$$\varepsilon \rho \frac{\partial \theta}{\partial \tau} + \rho v \frac{\partial \theta}{\partial x} - \frac{1}{x^2} \frac{\partial}{\partial x} \left(x^2 \theta^n \frac{\partial \theta}{\partial x} \right) = Q \rho Da y_O^{\nu_1} y_F^{\nu_2} e^{-\Sigma/\theta}, \quad (3.20)$$

onde $Da = Ba_0^2 Y_{O_\infty}^{\nu_1} / \alpha_\infty$ é o número de Damköhler (B é o fator de frequência), ν_1 e ν_2 são os coeficientes estequiométricos, s_O é a massa de oxidante queimada na condição estequiométrica por unidade de massa de combustível, $Q = q/c_p T_\infty$ onde q é a calor de combustão, isto é, a quantidade de calor liberada por unidade de massa de combustível consumido), $\Sigma = E/RT_\infty$ (onde E é a energia de ativação), $\gamma = c_p/c_v$ (onde c_v é o calor específico a volume constante).

Considerando que no regime de baixa pressão, massa específica do gás é relativamente pequena em comparação a massa específica do líquido, ε pode ser desprezível ($\varepsilon \ll 1$). Portanto o termo transiente das Eqs. (3.15, 3.16, 3.17, 3.18, 3.19 e 3.20) podem ser desprezados.

Então a equação da conservação da massa (Eq. 3.15) simplificada é mostrada na Eq. (3.21).

$$\frac{1}{x^2} \frac{\partial}{\partial x} (x^2 \rho v) = 0, \quad (3.21)$$

Realizando a integração da Eq. (3.21) resulta em,

$$(x^2 \rho v) = \text{constante} = \lambda \quad (3.22)$$

Essa constante é conhecida como a taxa de vaporização, que não apresenta variação no espaço, apenas com o tempo, por isso que o problema é considerado quase estático, variando com o fluxo de calor imposto pela chama. Onde $\lambda = \dot{m} c_p / 4\pi a_0 k_\infty$.

Portanto pode-se rescrever as equações de conservação sem o termo transiente, conforme Eqs. (3.23 a 3.28).

$$x^2 \rho v = \lambda(\tau) \quad (3.23)$$

$$\frac{\lambda}{x^2} \frac{\partial (Le_F y_F)}{\partial x} - \frac{1}{x^2} \frac{\partial}{\partial x} (x^2 f \frac{\partial y_F}{\partial x}) = -\dot{\omega}_F - \dot{\omega}_{so} \quad (3.24)$$

$$\frac{\lambda}{x^2} \frac{\partial(Le_{O}y_O)}{\partial x} - \frac{1}{x^2} \frac{\partial}{\partial x} \left(x^2 f \frac{\partial y_O}{\partial x} \right) = -s_O \dot{\omega}_F \quad (3.25)$$

$$\frac{\lambda}{x^2} \frac{\partial(Le_{H_2O}y_{H_2O})}{\partial x} - \frac{1}{x^2} \frac{\partial}{\partial x} \left(x^2 f \frac{\partial y_{H_2O}}{\partial x} \right) = s_{H_2O} \dot{\omega}_F \quad (3.26)$$

$$\frac{\lambda}{x^2} \frac{\partial(Le_{CO_2}y_{CO_2})}{\partial x} - \frac{1}{x^2} \frac{\partial}{\partial x} \left(x^2 f \frac{\partial y_{CO_2}}{\partial x} \right) = s_{CO_2} \dot{\omega}_F \quad (3.27)$$

$$\frac{\lambda}{x^2} \frac{\partial(\theta)}{\partial x} - \frac{1}{x^2} \frac{\partial}{\partial x} \left(x^2 f \frac{\partial \theta}{\partial x} \right) = Q \dot{\omega}_F - Q_{so} \dot{\omega}_{so} - Q_{rad} \quad (3.28)$$

Onde as equações 3.26 e 3.27 representam as espécies de H_2O e CO_2 respectivamente. O termo direito das equações 3.23, 3.24, 3.25, 3.26, 3.27 e 3.28 é um termo fonte que representa o consumo ou geração de espécies por unidade de volume, conforme a Eq. (3.29).

$$\dot{\omega} = \rho D a y_O^{\nu_1} y_F^{\nu_2} e^{-\Sigma/\theta} \quad (3.29)$$

Desde que as espécies de combustível são consumidas por reações químicas, este termo de fonte que é geralmente negativo. Para fechar o sistema de equações de conservação é empregado a equação de estado adimensionalizada do gás, escrita como:

$$1 = \rho \theta, \quad x > a. \quad (3.30)$$

3.3 Condições de contorno

Integrando a equação de conservação das espécies (Eq. 3.11) através da interface líquido-gás, onde $a+$ é a região do gás e $a-$ é a região do líquido, e considerando que não há reação química, obtém-se:

$$\int_{a-}^{a+} \lambda \frac{\partial y_F}{\partial x} dx - \int_{a-}^{a+} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\theta^n x^2}{L_F} \frac{\partial y_F}{\partial x} \right) dx = 0 \quad (3.31)$$

$$\left[\lambda y_F - \frac{\theta^n x^2}{L_F} \frac{\partial y_F}{\partial x} \right]_{a-}^{a+} = 0 \quad (3.32)$$

Considerando que a fração mássica de combustível no interior da gota é igual a unidade e que na superfície é $y_{Fs} = \exp \gamma (1 - \theta_B / \theta_S)$, proveniente da expressão de Clausius-Clapeyron, e que o gradiente de concentração na gota é nulo, então

$$\lambda y_{Fs} - 1 - \frac{\theta^n x^2}{L_F} \frac{\partial y_F}{\partial x} = 0 \quad (3.33)$$

$$-\frac{\theta^n x^2}{L_F} \frac{\partial y_F}{\partial x} = \lambda(1 - y_{Fs}) \quad (3.34)$$

Integrando a equação de conservação de energia (Eq. 3.14) através da interface líquido-gás, considerando que não há geração de calor, e que toda a gota se encontra na temperatura de ebulição, obtém-se

$$\int_{a^-}^{a^+} \lambda \frac{\partial \theta}{\partial x} dx - \int_{a^-}^{a^+} \frac{\partial}{\partial x} \left(\theta^n x^2 \frac{\partial \theta}{\partial x} \right) dx = 0 \quad (3.35)$$

$$\left[\lambda \theta - \theta^n x^2 \frac{\partial \theta}{\partial x} \right]_{a^-}^{a^+} = 0 \quad (3.36)$$

$$\left(\theta^n x^2 \frac{\partial \theta}{\partial x} \right)_{x=a^+} = \lambda(\theta^+ - \theta^-) + \left(\theta^n x^2 \frac{\partial \theta}{\partial x} \right)_{x=a^-} \quad (3.37)$$

Portanto as condições de contorno para as Eqs. (3.23 a 3.28), são:

- Superfície da gota ($x = a$)

O fluxo de massa que entra é igual ao fluxo de massa que evapora na superfície.

$$-\left(\frac{x^2 \theta^n}{L_F} \frac{\partial y_F}{\partial x} \right)_{x=a} = \lambda(1 - y_{Fs}), \quad (3.38)$$

O fluxo de calor é igual a quantidade de calor para vaporizar mais a quantidade de calor para aquecer.

$$\left(x^2 \theta^n \frac{\partial \theta}{\partial x} \right)_{x=a} = \lambda L + Q^- = \lambda L', \quad (3.39)$$

Onde Q^- é o calor no interior da gota, $L' = L + Q^-/\lambda$ e L' é obtida pela solução do problema térmico na fase líquida.

- Condição da chama ($x = x_F$)

A temperatura é igual a temperatura na condição da chama e as frações mássicas de combustível e oxidante são totalmente consumidos.

$$\theta = \theta_f, \quad y_F = y_O = 0 \quad (3.40)$$

- Ao $x \rightarrow \infty$

A temperatura da chama se iguala a temperatura ambiente, logo $T/T_\infty = 1$, e o combustível é totalmente consumido resultando apenas oxidante.

$$\theta = \theta_\infty = 1, \quad y_F = 0, \quad y_O = 1 \quad (3.41)$$

3.4 Função Z e H

Para resolver o sistema de equações 3.23, 3.24, 3.25, 3.26, 3.27 e 3.28, torna-se difícil devido aos termos fonte que tornam o sistema não linear. O objetivo é transformar este sistema de três equações em duas equações lineares em função de Z e H , que representam a fração de mistura e o excesso de entalpia respectivamente.

3.4.1 Formulação

Assumindo que o processo de combustão ocorra no limite de Burke-Schumann, isto é, o Número da Damköler ($Da = \frac{\text{Tempo mecânico}}{\text{Tempo cinética química}}$) é infinitamente grande, em outras palavras, o tempo característico da reação é infinitamente menor que qualquer tempo característico mecânico. O tempo de residência dos reagentes é infinitamente pequeno na zona de reação e a chama tem uma zona de reação infinitamente estreita.

O problema da combustão de gota é descrito utilizando a formulação de Schavab-Zel'dovich generalizada. Esta nova formulação não faz distinção da região que contém combustível, daquela que contém o oxigênio. Esta formulação é obtida pela combinação das Eqs. (3.24, 3.25 e 3.26). Assim obtém-se o seguinte sistema:

$$\frac{\lambda}{x^2} \frac{\partial}{\partial x} \begin{pmatrix} \theta \\ y_O \\ y_F \end{pmatrix} - \frac{1}{x^2} \frac{\partial}{\partial x} \left(x^2 \theta^n \frac{\partial}{\partial x} \begin{pmatrix} \theta \\ y_O/L_O \\ y_F/L_F \end{pmatrix} \right) = \begin{pmatrix} Q \\ -s_O \\ -s_F \end{pmatrix} \dot{w} \quad (3.42)$$

Por definição tem que $s_F = 1$, e realizando a multiplicação da segunda linha por L_O e a terceira por L_F , resulta em

$$\frac{\lambda}{x^2} \frac{\partial}{\partial x} \begin{pmatrix} \theta \\ L_O y_O \\ L_F y_F \end{pmatrix} - \frac{1}{x^2} \frac{\partial}{\partial x} \left(x^2 \theta^n \frac{\partial}{\partial x} \begin{pmatrix} \theta \\ y_O \\ y_F \end{pmatrix} \right) = \begin{pmatrix} Q/L_F \\ -s_O L_O/L_F \\ -1 \end{pmatrix} \dot{w} L_F \quad (3.43)$$

Definindo $S = s_O L_O/L_F$ e multiplicando a terceira linha da Eq. (3.43) por S e realizando a subtração da segunda linha, chega-se em

$$\frac{\lambda}{x^2} \frac{\partial}{\partial x} (L_F S y_F - L_O y_O) - \frac{1}{x^2} \frac{\partial}{\partial x} \left[x^2 \theta^n \frac{\partial}{\partial x} (S y_F - y_O) \right] = 0 \quad (3.44)$$

Os termos que estão dentro das derivadas acrescenta-se uma constante, sem alterar o resultado, portanto uma unidade (1) é adicionada, como mostra a Eq. (3.45):

$$\frac{\lambda}{x^2} \frac{\partial}{\partial x} (L_F S y_F - L_O y_O + 1) - \frac{1}{x^2} \frac{\partial}{\partial x} \left[x^2 \theta^n \frac{\partial}{\partial x} (S y_F - y_O + 1) \right] = 0 \quad (3.45)$$

Agora defini-se $Z = Sy_F - y_O + 1$ e chega-se em;

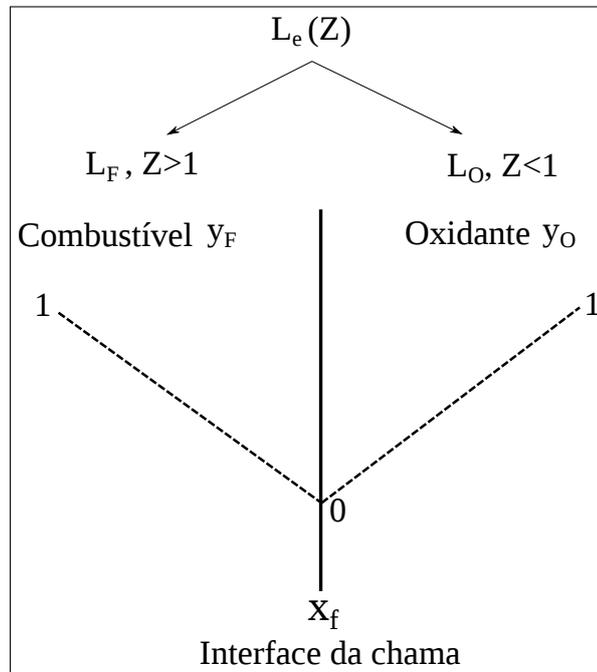
$$L_e(Z) \frac{\lambda}{x^2} \frac{\partial Z}{\partial x} - \frac{1}{x^2} \frac{\partial}{\partial x} \left(x^2 \theta^n \frac{\partial Z}{\partial x} \right) = 0 \quad (3.46)$$

Onde:

$$L_e(Z) = \begin{cases} L_F, & \text{para } Z > 1 \\ L_O, & \text{para } Z < 1 \end{cases}, \quad (3.47)$$

A Fig.11 apresenta uma simplificação para o melhor entendimento das condições apresentada na Eq. (3.47).

Figura 11 – Esquema da chama



Já para obter a equação da conservação de energia em função de H e Z , deve-se multiplicar a primeira linha do Eq. (3.43) por $(S + 1)L_F/Q$ e soma a segunda e a terceira linha, conforme

$$\frac{\lambda}{x^2} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{(S + 1)L_F}{Q} \theta + L_O y_O + L_F y_F \right) - \frac{1}{x^2} \frac{\partial}{\partial x} \left[x^2 \theta^n \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{(S + 1)L_F}{Q} \theta + y_O + y_F \right) \right] = 0 \quad (3.48)$$

O próximo passo é somar $y_O - y_O + y_F - y_F$ no primeiro termo da Eq. (3.48) e realizando a substituição da variável H , definida anteriormente como $H = (S + 1)L_F/Q +$

$y_O + y_F$, resultando em

$$\frac{\lambda}{x^2} \frac{\partial}{\partial x} [H + (L_F - 1)y_F + (L_O - 1)y_O] - \frac{1}{x^2} \frac{\partial}{\partial x} \left[x^2 \theta^n \frac{\partial}{\partial x} H \right] = 0 \quad (3.49)$$

Para $a \leq x \leq x_f$ tem-se que $y_F = (Z - 1)/S$, logo

$$\frac{\lambda}{x^2} \frac{\partial}{\partial x} \left[H + (L_F - 1) \frac{(Z - 1)}{S} \right] - \frac{1}{x^2} \frac{\partial}{\partial x} \left[x^2 \theta^n \frac{\partial}{\partial x} H \right] = 0 \quad (3.50)$$

Sem perda de generalidade, elimina-se a constante $(-1/S)(L_F - 1)$ na derivada, e reescrevendo obtém-se:

$$\frac{\lambda}{x^2} \frac{\partial}{\partial x} H + \frac{\lambda}{x^2} \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{(L_F - 1)}{S} Z \right] - \frac{1}{x^2} \frac{\partial}{\partial x} \left[x^2 \theta^n \frac{\partial}{\partial x} H \right] = 0 \quad (3.51)$$

Para $x \geq x_f$ temos que $-y_O = Z - 1$, logo

$$\frac{\lambda}{x^2} \frac{\partial}{\partial x} [H + (1 - L_O)(Z - 1)] - \frac{1}{x^2} \frac{\partial}{\partial x} \left[x^2 \theta^n \frac{\partial}{\partial x} H \right] = 0 \quad (3.52)$$

Ao eliminar a constante $-1(L_O)$ da derivada da Eq. (3.52), resulta em

$$\frac{\lambda}{x^2} \frac{\partial}{\partial x} H + \frac{\lambda}{x^2} \frac{\partial}{\partial x} [(1 - L_O)Z] - \frac{1}{x^2} \frac{\partial}{\partial x} \left[x^2 \theta^n \frac{\partial}{\partial x} H \right] = 0 \quad (3.53)$$

As equações 3.51 e 3.53 podem ser escritas como

$$\frac{\lambda}{x^2} \frac{\partial}{\partial x} H - \frac{1}{x^2} \frac{\partial}{\partial x} \left(x^2 \theta^n \frac{\partial}{\partial x} H \right) + N(Z) \frac{\lambda}{x^2} \frac{\partial}{\partial x} Z = 0 \quad (3.54)$$

Onde,

$$N(Z) = \begin{cases} (L_F - 1)/S, & \text{para } Z > 1 \\ (1 - L_O), & \text{para } Z < 1 \end{cases} \quad (3.55)$$

O termo θ^n não é escrito como uma função de H e Z porque o mesmo será eliminado mais adiante por uma expressão adicional relacionando H e Z .

A partir da definição das funções H e Z , as variáveis originais são definidas conforme a Eq. (3.56)

$$\theta = \begin{cases} [H - (Z - 1)/S]Q/(S + 1), & Z > 1 \\ [H + (Z - 1)]Q/(S + 1), & Z < 1 \end{cases}, \quad \begin{matrix} y_F = (Z - 1)/S, & Z > 1 \\ y_O = (1 - Z), & Z < 1 \end{matrix} \quad (3.56)$$

As frações de mistura de combustível, H_2O e CO_2 são encontradas da mesma maneira como as funções anteriores H e Z .

$$\frac{\lambda}{x^2} \frac{\partial}{\partial x} (Le_{H_2O} y_{H_2O} + S_{H_2O} Le_F y_F) - \frac{1}{x^2} \frac{\partial}{\partial x} \left[x^2 f \frac{\partial}{\partial x} (y_{H_2O} + S_{H_2O} y_F) \right] = -(S_{H_2O}/S) S \dot{\omega}_{so} \quad (3.57)$$

$$\frac{\lambda}{x^2} \frac{\partial}{\partial x} (Le_{CO_2} y_{CO_2} + S_{CO_2} Le_F y_F) - \frac{1}{x^2} \frac{\partial}{\partial x} \left[x^2 f \frac{\partial}{\partial x} (y_{CO_2} + S_{CO_2} y_F) \right] = -(S_{CO_2}/S) S \dot{\omega}_{so} \quad (3.58)$$

3.4.2 Condições de contorno para as funções Z e H

Através da Eq. (3.54) realiza-se a integração de todos os termos e elimina x^2 que está presente em todos os termos. A integração é realizada de a_- , fase líquida, até a_+ , fase gasosa, sendo assim chega-se na Eq. (3.59).

$$\int_{a_-}^{a_+} \frac{\lambda}{x^2} \frac{\partial H}{\partial x} - \int_{a_-}^{a_+} \frac{1}{x^2} \frac{\partial}{\partial x} \left(x^2 \theta^n \frac{\partial H}{\partial x} \right) + \int_{a_-}^{a_+} N(Z) \frac{\lambda}{x^2} \frac{\partial Z}{\partial x} = 0 \quad (3.59)$$

Realizando as simplificações na Eq. (3.59) obtém-se

$$\lambda(H_{a_+} - H_{a_-}) - \left[\left(x^2 \theta^n \frac{\partial H}{\partial x} \right)_{a_+} - \left(x^2 \theta^n \frac{\partial H}{\partial x} \right)_{a_-} \right] + \lambda N(Z_{a_+} - Z_{a_-}) = 0 \quad (3.60)$$

Substituindo Z e H , que foram definidos anteriormente, na Eq. (3.60), resulta em

$$\lambda \left[(SQ\theta_{a_+} y_{Fs_+}) - (SQ\theta_{a_-} y_{Fs_-}) \right] - \left(x^2 \theta^n \frac{\partial H}{\partial x} \right)_{a_+} + \lambda N \left[(Sy_{Fs_+} + 1) - (Sy_{Fs_-} + 1) \right] = 0 \quad (3.61)$$

Utilizando a Eq. (3.55) e sabendo que na região do combustível $y_{Fs_-} = 1$, substitui-se na Eq. (3.61) e rearranjando os termos chega-se em

$$\lambda SQ(\theta_{a_+} - \theta_{a_-}) + \lambda y_{Fs_+} - \lambda - \left(x^2 \theta^n \frac{\partial H}{\partial x} \right)_{a_+} + \lambda (Le_F - 1)(y_{Fs_+} - 1) = 0 \quad (3.62)$$

Eliminando os termos iguais na Eq. (3.62), pode-se reescrever a equação conforme a Eq. (3.63)

$$\lambda SQ(\theta_{a_+} - \theta_{a_-}) - \lambda - \left(x^2 \theta^n \frac{\partial H}{\partial x} \right)_{a_+} + \lambda Le_F (y_{Fs_+} - 1) = 0 \quad (3.63)$$

Substituindo $(\theta_{a_+} - \theta_{a_-})$ por L' , tem-se a condição de contorno para superfície da gota.

$$F_H \equiv x^2 \theta^n \frac{\partial H}{\partial x} \Big|_{x=a} = \lambda S Q L' + \lambda L e_F (y_{F_s} - 1) \quad (3.64)$$

Para a função Z , realiza-se a integração de todos os termos da Eq. (3.46) e multiplica todos os termos da mesma por x^2 . A integração é realizada de a_- , fase líquida, até a_+ , fase gasosa, assim chega-se na Eq. (3.65).

$$\int_{a_-}^{a_+} \lambda L_e + \frac{\partial H}{\partial x} - \int_{a_-}^{a_+} \frac{\partial}{\partial x} \left(x^2 \theta^n \frac{\partial Z}{\partial x} \right) = 0 \quad (3.65)$$

Realizando as simplificações na Eq. (3.65) obtém-se

$$\lambda L_e (Z_{a_+} - Z_{a_-}) - \left[\left(x^2 \theta^n \frac{\partial Z}{\partial x} \right)_{a_+} - \left(x^2 \theta^n \frac{\partial Z}{\partial x} \right)_{a_-} \right] = 0 \quad (3.66)$$

Substituindo Z na Eq. (3.66) resulta em

$$\lambda L_e \left[(S y_{F_{s_+}} + 1) - (S y_{F_{s_-}} + 1) \right] - \left(x^2 \theta^n \frac{\partial Z}{\partial x} \right)_{a_+} = 0 \quad (3.67)$$

Sabendo que $y_{F_{s_-}} = 1$ (fase líquida), pode-se reescrever a condição de contorno conforme a Eq. (3.68)

$$F_Z \equiv x^2 \theta^n \frac{\partial Z}{\partial x} \Big|_{x=a} = -\lambda L_e S (1 - y_{F_s}) \quad (3.68)$$

Portanto as condições de contorno para as funções Z e H são:

- Superfície da gota $x = a$

$$H_s \equiv \frac{(S+1)}{Q} \theta_s + y_{F_s}, \quad Z_s \equiv S y_{F_s} + 1, \quad (3.69)$$

$$F_H \equiv x^2 \theta^n \frac{\partial H}{\partial x} \Big|_{x=a} = \lambda S Q L' + \lambda L e_F (y_{F_s} - 1) \quad (3.70)$$

$$F_Z \equiv x^2 \theta^n \frac{\partial Z}{\partial x} \Big|_{x=a} = -\lambda L_e S (1 - y_{F_s}) \quad (3.71)$$

- Posição da chama $x = x_f$

Onde $y_F = y_O = 0$, e a fração de mistura (Z) seja zero.

$$H(x_f) = (S+1)\theta_f/Q, \quad Z(x_f) = 1, \quad (3.72)$$

- Região afastada da gota

Onde a temperatura adimensional (θ) é igual a 1 e $y_O = 1$.

$$H(\infty) = (S+1)/Q + 1, \quad Z(\infty) = 0 \quad (3.73)$$

3.5 Desenvolvimento das equações

Nesta seção será apresentada a simplificação das quatro equações que modelam o problema, a primeira é a constante de vaporização (β) em função de Z a segunda descreve o excesso de entalpia (H) em função de Z , a terceira representa a fração mássica de H_2O em função de Z e a última representa a fração de mistura de CO_2 em função de Z .

3.5.1 Constante de vaporização (β) em função de Z

Multiplicando a Eq.(3.46) por x^2 e dividindo por λ , resulta na Eq. (3.74)

$$\frac{\partial}{\partial x} \int_{Z_s}^Z L(Z) dZ - \frac{1}{\lambda} \frac{\partial}{\partial x} \left(x^2 f \frac{\partial Z}{\partial x} \right) = -\frac{x^2}{\lambda} S \dot{\omega}_{so} \quad (3.74)$$

Na sequência realiza-se a integração de todos os termos da Eq. (3.74).

$$\int_{Z_s}^Z L(Z) dZ - \left[\left(\frac{x^2 f}{\lambda} \frac{\partial Z}{\partial x} \right) - \left(\frac{x^2 f}{\lambda} \frac{\partial Z}{\partial x} \right)_{x=a} \right] = - \int_a^x \frac{S \dot{\omega}_{so}}{\lambda} x^2 dx \quad (3.75)$$

Sabendo que $F_Z \equiv \frac{x^2 f}{\lambda} \frac{\partial Z}{\partial x} \Big|_{x=a} = -S L e_F (1 - y_{F_s})$, tem-se:

$$\frac{x^2 f}{\lambda} \frac{\partial Z}{\partial x} = \int_{Z_s}^Z L(Z) dZ + F_Z + \int_a^x \frac{S \dot{\omega}_{so}}{\lambda} x^2 dx \quad (3.76)$$

Ajustando a Eq (3.76) para que $\frac{x^2}{\lambda}$, no primeiro termo, fique dentro da derivada tem-se,

$$-f \frac{\partial Z}{\partial(\lambda/x)} = \int_{Z_s}^Z L(Z) dZ + F_Z + \int_a^x \frac{S \dot{\omega}_{so}}{\lambda} x^2 dx \quad (3.77)$$

Através da Eq. (2.3), pode substituir $\int_a^x \frac{S \dot{\omega}_{so}}{\lambda} x^2 dx$ por $\phi_m x_{so}^2 \Big|_{x \geq x_{so}}$ resultando em

$$-f \frac{\partial Z}{\partial(\lambda/x)} = \int_{Z_s}^Z L(Z) dZ + F_Z + \phi_m x_{so}^2 \Big|_{x \geq x_{so}} \quad (3.78)$$

Sabendo que $\lambda/x = \beta$, pode-se reorganizar a Eq. (3.78), de modo que a constante de vaporização esteja em função de Z .

$$\frac{d\beta}{dZ} = \frac{-f}{\int_{Z_s}^Z L(Z) dZ + F_Z + \phi_m x_{so}^2 \Big|_{x \geq x_{so}}} \quad (3.79)$$

Lembrando que $f = \theta^n$, onde $n \approx 0,5$ para o n-heptano.

3.5.2 Excesso de entalpia (H) em função de Z

Realizando as substituições na Eq. (3.54), tem-se a Eq. (3.80).

$$\begin{aligned} & \frac{\lambda}{x^2} \frac{\partial}{\partial x} \left(H + \int_{Z_s}^Z N(Z) dZ \right) - \frac{1}{x^2} \frac{\partial}{\partial x} \left(x^2 f \frac{\partial H}{\partial x} \right) \\ &= -\frac{\lambda}{x^2} \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{(S+1)}{Q} (h - \theta) \right] - \left(\frac{S+1}{Q} Q_{so} + 1 \right) \dot{\omega}_{so} - \frac{S+1}{Q} Q_{rad} \end{aligned} \quad (3.80)$$

Na sequência multiplica-se a Eq. (3.80) por x^2 e divide por λ

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial x} \left(H + \int_{Z_s}^Z N(Z) dZ \right) - \frac{1}{\lambda} \frac{\partial}{\partial x} \left(x^2 f \frac{\partial H}{\partial x} \right) = \\ & -\frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{(S+1)}{Q} (h - \theta) \right] - \dot{\omega}_{so} \frac{x^2}{\lambda} \left(\frac{S+1}{Q} Q_{so} + 1 \right) - \frac{x^2}{\lambda} \frac{S+1}{Q} Q_{rad} \end{aligned} \quad (3.81)$$

Após deve-se integrar todos os termos, adotando como limites de integração a superfície da gota (a) até uma posição qualquer denominada de (x).

$$\begin{aligned} & \int_a^x H + \int_{Z_s}^Z N(Z) dZ - \left[\left(\frac{x^2 f}{\lambda} \frac{\partial H}{\partial x} \right) - \left(\frac{x^2 f}{\lambda} \frac{\partial H}{\partial x} \right)_{x=a} \right] = -\frac{(S+1)}{Q} \\ & \left[(h - \theta) - (h_S - \theta_S) \right] - \int_a^x \dot{\omega}_{so} \frac{x^2}{\lambda} \left(\frac{S+1}{Q} Q_{so} + 1 \right) - \int_a^x \frac{x^2}{\lambda} \frac{S+1}{Q} Q_{rad} \end{aligned} \quad (3.82)$$

Sabendo que $F_H \equiv \frac{x^2 f}{\lambda} \frac{\partial H}{\partial x} \Big|_{x=a}$, tem-se.

$$\begin{aligned} & \frac{x^2 f}{\lambda} \frac{\partial H}{\partial x} = H - H_s + F_H + \int_{Z_s}^Z N(Z) dZ - \frac{(S+1)}{Q} \left[(h - \theta) - (h_S - \theta_S) \right] \\ & - \left(\frac{S+1}{S} \frac{Q_{so}}{Q} + \frac{1}{S} \right) \int_a^x \frac{S \dot{\omega}_{so}}{\lambda} x^2 dx + \frac{S+1}{Q} \int_a^x \frac{Q_{rad}}{\lambda} x^2 dx \end{aligned} \quad (3.83)$$

No primeiro termo da Eq (3.83), pode-se aplicar a seguinte relação:

$$\frac{\partial H}{\partial x} = \frac{\partial H}{\partial Z} \frac{\partial Z}{\partial x} \quad (3.84)$$

E assim é possível isolar $\frac{\partial H}{\partial Z}$:

$$\begin{aligned} & \frac{dH}{dZ} = \left\{ H - H_s + F_H + \int_{Z_s}^Z N(Z) dZ - \frac{(S+1)}{Q} \left[(h - \theta) - (h_S - \theta_S) \right] \right. \\ & \left. - \left(\frac{S+1}{S} \frac{Q_{so}}{Q} + \frac{1}{S} \right) \int_a^x \frac{S \dot{\omega}_{so}}{\lambda} x^2 dx + \frac{S+1}{Q} \int_a^x \frac{Q_{rad}}{\lambda} x^2 dx \right\} \left[-f \frac{\partial Z}{\partial(\lambda/x)} \right]^{-1} \end{aligned} \quad (3.85)$$

Conforme a relação $Q_{so}/Q = \phi_q$ e com as equações (2.3 e 2.4), tem-se:

$$\frac{dH}{dZ} = \left\{ H - H_s + F_H + \int_{Z_s}^Z N(Z)dZ - \frac{(S+1)}{Q} \left[(h - \theta) - (h_s - \theta_s) \right] \right. \\ \left. \left(\frac{S+1}{S} \phi_q + \frac{1}{S} \right) \phi_m x_{so}^2 \Big|_{x \geq x_{so}} + \frac{\sigma}{\lambda} \int_a^x \frac{\theta^4 - 1}{\theta_{af}^4 - 1} x^2 dx \right\} \left[-f \frac{\partial Z}{\partial(\lambda/x)} \right]^{-1} \quad (3.86)$$

Portanto substitui-se $x_{so} = a\beta/(\lambda/x_{so})$ e reescalando a equação, onde $\bar{x} = x/a$ tem-se a Eq. (3.87).

$$\frac{dH}{dZ} = \left\{ H - H_s + F_H + \int_{Z_s}^Z N(Z)dZ - \frac{(S+1)}{Q} \left[(h - \theta) - (h_s - \theta_s) \right] \right. \\ \left. \left(\frac{S+1}{S} \phi_q + \frac{1}{S} \right) \phi_m x_{so}^2 \Big|_{x \geq x_{so}} + \frac{a^2 \sigma}{\lambda/a} \int_1^{x/a} \frac{\theta^4 - 1}{\theta_{af}^4 - 1} \bar{x}^2 d\bar{x} \right\} \left[-f \frac{\partial Z}{\partial(\lambda/x)} \right]^{-1} \quad (3.87)$$

3.5.3 Fração mássica de H_2O em função de Z

A partir da Eq. (3.57), multiplica-se todos os termos da equação por x^2 e divide por λ .

$$\frac{\partial}{\partial x} (Le_{H_2O} y_{H_2O} + S_{H_2O} Le_F y_F) - \frac{1}{\lambda} \frac{\partial}{\partial x} \left[x^2 f \frac{\partial}{\partial x} (y_{H_2O} + S_{H_2O} y_F) \right] = \\ - \frac{x^2}{\lambda} \left(\frac{S_{H_2O}}{S} \right) S \dot{\omega}_{so} \quad (3.88)$$

Considerando que $y_F|_{x=a} = 1$, $y_F = \frac{Z-1}{S}|_{Z>1}$, e integrando todos os termos da Eq. (3.88), chega-se em

$$\frac{x^2 f}{\lambda} \left[\frac{\partial y_{H_2O}}{\partial x} + \frac{S_{H_2O}}{S} \frac{\partial(Z-1)}{\partial x} \Big|_{z>1} \right] = Le_{H_2O} y_{H_2O} + S_{H_2O} Le_F \left[\frac{(Z-1)}{S} \Big|_{Z>1} - 1 \right] \\ + \frac{S_{H_2O}}{S} \int_a^x \frac{S \dot{\omega}_{so}}{\lambda} x^2 dx \quad (3.89)$$

Substituindo a relação demonstrada na Eq. (3.84), resulta em

$$\frac{x^2 f}{\lambda} \left[\left(\frac{\partial Z}{\partial x} \right) \frac{\partial y_{H_2O}}{\partial Z} + \frac{S_{H_2O}}{S} \frac{\partial(Z-1)}{\partial x} \Big|_{z>1} \right] = Le_{H_2O} y_{H_2O} + S_{H_2O} Le_F \left[\frac{(Z-1)}{S} \Big|_{Z>1} - 1 \right] \\ + \frac{S_{H_2O}}{S} \int_a^x \frac{S \dot{\omega}_{so}}{\lambda} x^2 dx \quad (3.90)$$

Através da Eq. (2.3), pode substituir $\int_a^x \frac{S \dot{\omega}_{so}}{\lambda} x^2 dx$ por $\phi_m x_{so}^2 \Big|_{x \geq x_{so}}$.

$$\frac{\partial y_{H_2O}}{\partial Z} = \left\{ Le_{H_2O} y_{H_2O} + S_{H_2O} Le_F \left[\frac{(Z-1)}{S} \Big|_{Z>1} - 1 \right] + \frac{S_{H_2O}}{S} \phi_m x_{so}^2 \Big|_{x \geq x_{so}} \right\}$$

$$\left[-f \frac{\partial Z}{\partial(\lambda/x)} \right]^{-1} - \frac{S_{H_2O}}{S} \Big|_{z>1} \quad (3.91)$$

E assim substituindo $x_{so} = a\beta/(\lambda/x_{so})$, tem-se a Eq. (3.92)

$$\frac{dy_{H_2O}}{dZ} = \left\{ Le_{H_2O} y_{H_2O} + S_{H_2O} Le_F \left[\frac{(Z-1)}{S} \Big|_{z>1} - 1 \right] + \frac{S_{H_2O}}{S} \frac{a^2 \beta^2 \phi_m}{(\lambda/x_{so})^2} \Big|_{x \geq x_{so}} \right\} \left[-f \frac{\partial Z}{\partial(\lambda/x)} \right]^{-1} - \frac{S_{H_2O}}{S} \Big|_{z>1} \quad (3.92)$$

3.5.4 Fração de mistura de CO_2 em função de Z

A partir da Eq. (3.58), multiplica-se todos os termos da equação por x^2 e divide por λ .

$$\frac{\partial}{\partial x} (Le_{CO_2} y_{CO_2} + S_{CO_2} Le_F y_F) - \frac{1}{\lambda} \frac{\partial}{\partial x} \left[x^2 f \frac{\partial}{\partial x} (y_{CO_2} + S_{CO_2} y_F) \right] = -\frac{x^2}{\lambda} \left(\frac{S_{CO_2}}{S} \right) S \dot{\omega}_{so} \quad (3.93)$$

Considerando que $F|_{x=a} = 1, y_F = \frac{Z-1}{S}|_{z>1}$, e integrando todos os termos da Eq. (3.93) o obtém-se

$$\frac{x^2 f}{\lambda} \left[\frac{\partial y_{CO_2}}{\partial x} + \frac{S_{CO_2}}{S} \frac{\partial(Z-1)}{\partial x} \Big|_{z>1} \right] = Le_{CO_2} y_{CO_2} + S_{CO_2} Le_F \left[\frac{(Z-1)}{S} \Big|_{z>1} - 1 \right] + \frac{S_{CO_2}}{S} \int_a^x \frac{S \dot{\omega}_{so}}{\lambda} x^2 dx \quad (3.94)$$

Substituindo a relação demonstrada na Eq. (3.84), chega-se em

$$\frac{x^2 f}{\lambda} \left[\left(\frac{\partial Z}{\partial x} \right) \frac{\partial y_{CO_2}}{\partial Z} + \frac{S_{CO_2}}{S} \frac{\partial(Z-1)}{\partial x} \Big|_{z>1} \right] = Le_{CO_2} y_{CO_2} + S_{CO_2} Le_F \left[\frac{(Z-1)}{S} \Big|_{z>1} - 1 \right] + \frac{S_{CO_2}}{S} \int_a^x \frac{S \dot{\omega}_{so}}{\lambda} x^2 dx \quad (3.95)$$

Através da Eq. (2.3), pode substituir $\int_a^x \frac{S \dot{\omega}_{so}}{\lambda} x^2 dx$ por $\phi_m x_{so}^2 \Big|_{x \geq x_{so}}$.

$$\frac{\partial y_{CO_2}}{\partial Z} = \left\{ Le_{CO_2} y_{CO_2} + S_{CO_2} Le_F \left[\frac{(Z-1)}{S} \Big|_{z>1} - 1 \right] + \frac{S_{CO_2}}{S} \phi_m x_{so}^2 \Big|_{x \geq x_{so}} \right\} \left[-f \frac{\partial Z}{\partial(\lambda/x)} \right]^{-1} - \frac{S_{CO_2}}{S} \Big|_{z>1} \quad (3.96)$$

E assim substituindo $x_{so} = a\beta/(\lambda/x_{so})$ na Eq. (3.96), tem-se a equação que representa a fração mássica de CO_2 em função de Z .

$$\frac{dy_{CO_2}}{dZ} = \left\{ Le_{CO_2} y_{CO_2} + S_{CO_2} Le_F \left[\frac{(Z-1)}{S} \Big|_{Z>1} - 1 \right] + \frac{S_{CO_2}}{S} \frac{a^2 \beta^2 \phi_m}{(\lambda/x_{so})^2} \Big|_{x \geq x_{so}} \right\} \left[-f \frac{\partial Z}{\partial(\lambda/x)} \right]^{-1} - \frac{S_{CO_2}}{S} \Big|_{Z>1} \quad (3.97)$$

3.6 Discussão

As equações (3.78, 3.87, 3.92 e 3.97) representam um problema de contorno. A taxa de geração de fuligem, calor para formação e fuligem e σ são valores conhecidos e as propriedades de combustão das gotas (temperatura de superfície da gota, β e a temperatura da chama) são funções destes parâmetros. A solução da Eq. (3.87) determina o perfil de temperatura e a temperatura da superfície da gota (θ_s).

Com uma parte da solução da Eq. (3.87), é obtida a temperatura da chama $\theta(Z=1) = \theta_s$. Uma vez que H está em função de H_2O e de CO_2 , as equações para as frações mássicas de y_{H_2O} e y_{CO_2} (Eqs. 3.92 e 3.97) devem ser integradas juntamente com as Eqs. (3.78, 3.87). A integração da equação para a fração de mistura (Z) determina a dependência das variáveis dependentes no espaço físico x . A posição da chama x_f é encontrada por $x(Z=1) = x_f$.

O segundo, terceiro, quarto e quinto termos da Eq. (3.87) influenciam o perfil de temperatura em fase gasosa em torno da gota. O segundo termo ($\int N(Z)dZ$), representa a diferença das difusividades de massa e calor. Para os números de Lewis do combustível e do oxidante igual à unidade, a condição adiabática é alcançada. Uma análise da função $N(Z)$ mostra que os efeitos de Le_F e Le_O sobre o perfil de temperatura da fase gasosa não são semelhantes. Para $Le_F > 1$, o perfil de temperatura está acima da condição adiabática porque $\int N(Z)dZ < 0$ em $Z_s < Z < 1$. No entanto, para $Le_O > 1$, o perfil de temperatura está abaixo da condição adiabática porque $\int N(Z)dZ > 0$ em $1 < Z < 0$.

O terceiro termo da Eq. (3.87) ($[(S+1)/Q][(h-\theta) - (h_s - \theta_s)]$), corresponde à diferença entre o modelo para propriedades termodinâmicas variáveis e com as propriedades termodinâmicas constantes ($h = \theta$). Uma vez que $h > \theta$, o perfil de temperatura é inferior ao de $h = \theta$.

O quarto termo da Eq. (3.87) juntamente com $\partial Z/\partial(\lambda/x)$ são as contribuições da formação de fuligem na equação da conservação de energia. Uma vez que o quarto termo é positivo e aumenta com ϕ_m e ϕ_q o $\partial Z/\partial(\lambda/x)$ diminui com ϕ_m , a formação de fuligem causa uma redução da temperatura da fase gasosa.

Já o quinto termo da Eq. (3.87) representa a perda de energia radiativa, produz o mesmo efeito que a formação de fuligem, quando se tem um acréscimo no valor de σ , ocorre a redução no perfil de temperatura, causado pela perda de calor na chama através da radiação.

3.7 Solução numérica

A solução das equações (3.78, 3.87, 3.92 e 3.97) que modelam o problema da combustão de uma gota isolada é realizada numericamente utilizando códigos computacionais escritos na linguagem de programação FORTRAN. Para realizar a compilação do código utiliza-se o "GFORTRAN". Após gerar os resultados utiliza-se o software gnuplot (Linux) para gerar os gráficos que irão auxiliar na interpretação dos resultados.

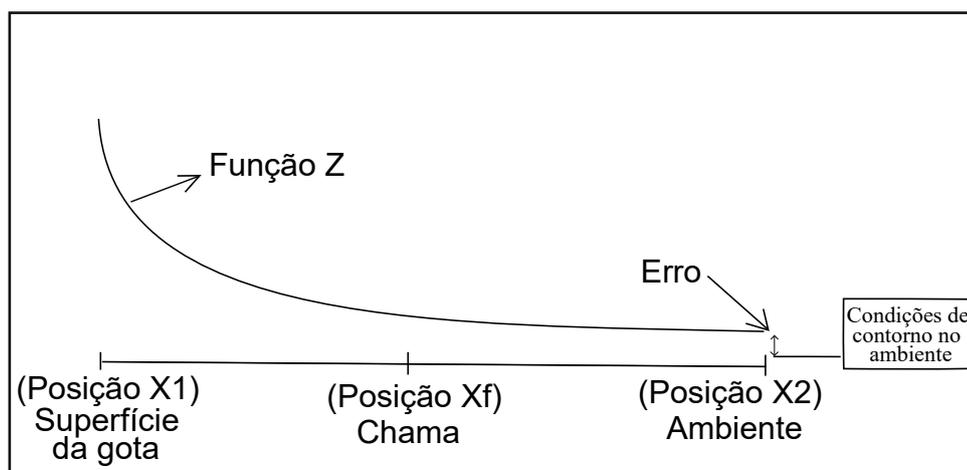
No sistema abaixo é realizado uma simplificação das quatro equações que modelam o problema as mesmas estão em função da fração de mistura (Z), eliminou-se a dependência de " x ", nesse caso é necessário realizar a integração da primeira equação do sistema onde vai ser conhecido o termo $(\frac{d\beta}{dZ})$, esse termo está presente nas outras três equações equações. A variável β é imposta como uma condição inicial do problema.

$$\left\{ \begin{array}{l} d\beta/dZ = f_1(Z) \quad \text{Conforme a Eq. (3.79)} \\ dH/dZ = f_2(Z) \quad \text{Conforme a Eq. (3.87)} \\ d_{H_2O}/dZ = f_3(Z) \quad \text{Conforme a Eq. (3.92)} \\ d_{CO_2}/dZ = f_4(Z) \quad \text{Conforme a Eq. (3.97)} \end{array} \right.$$

As condições de contorno no infinito (ambiente) são conhecidas, assim é aplicado o método do shooting, no qual as condições de contorno na superfície da gota são determinadas através de "chutes iniciais". Com a estipulação inicial das propriedades na superfície da gota é realizada a integração das equações de uma posição x_1 (superfície da gota) até a posição x_2 (ambiente), conforme mostrada na figura 12.

As integrações devem corresponder à condição de contorno para o ambiente, caso a condição não seja satisfeita é realizada várias iterações até que ocorra a convergência.

Figura 12 – Método para solução numérica



Para realizar a nova iteração, torna-se necessário determinar as novas condições de contorno, que são determinadas pelo método de Newton-Raphson, ele verifica o erro e calcula as novas condições de contorno, isso se repete até que a condição de continuidade na posição da chama seja satisfeito.

4 Resultados

Os resultados deste trabalho estão divididos em três seções, a primeira apresenta a influência da temperatura ambiente no comportamento da chama, na segunda é apresentada a influência das variáveis ϕ_q e ϕ_m no perfil de temperatura, e na última seção é analisada as características da chama em relação a taxa de geração de fuligem (ϕ_m).

4.1 Influência da temperatura ambiente

Para analisar a influência da temperatura ambiente na característica considerou-se uma gota de combustível de n-heptano sob repouso. A tabela 1 apresenta algumas propriedades do n-heptano e também alguns valores adotados para realizar a simulação do modelo.

Tabela 1 – Propriedades do combustível n-heptano

Propriedades constantes	
Calor de combustão (Q)	4464,7 kJ/mol
Calor latente de vaporização (L_v)	42,619 kJ/mol
Calor específico a pressão constante (C_p)	80 J/K.mol
Temperatura de ebulição (T_b)	371 K
Temperatura de formação de fuligem (T_{soot})	1400 K

Para analisar a influência da temperatura do ambiente no comportamento da chama, utilizou-se valores estipulados para ϕ_q e ϕ_m , sendo ambos igual a 0.1, e considerou-se as seguintes temperaturas para o ambiente: 298, 500 e 1000K.

O modelo adota que a formação de fuligem inicia quando a temperatura for de 1400K, portanto não é necessário definir a posição em que começa a formar fuligem (X_{soot}).

O ponto de descontinuidade na primeira derivada demonstrado na Fig. 13 é a posição da chama, onde se tem pico de temperatura, está situado entre 15 e 20 raios da gota, geralmente quando se utiliza o modelo simplificado a posição da chama fica próximo a 20 raios da gota. Em geral o modelo da chama estreita representa valores super estimados para a posição da chama, que na prática a chama se encontra de 5 a 6 vezes o raio da gota.

Ao analisar os resultados percebe-se que a variação da temperatura ambiente não tem muita influência na posição da chama, ocorre apenas uma aumento na temperatura da chama, esse aumento na prática não acontece, pois não é o ambiente que vai interferir na temperatura da chama, visto que a chama se encontra em uma temperatura muito

superior. Essa alteração na temperatura de chama é aceitável sabendo que se trata de um modelo simplificado.

Figura 13 – Variação do perfil de temperatura sem a geração de fuligem para $\phi_q = 0.1$, $\phi_m = 0.1$.

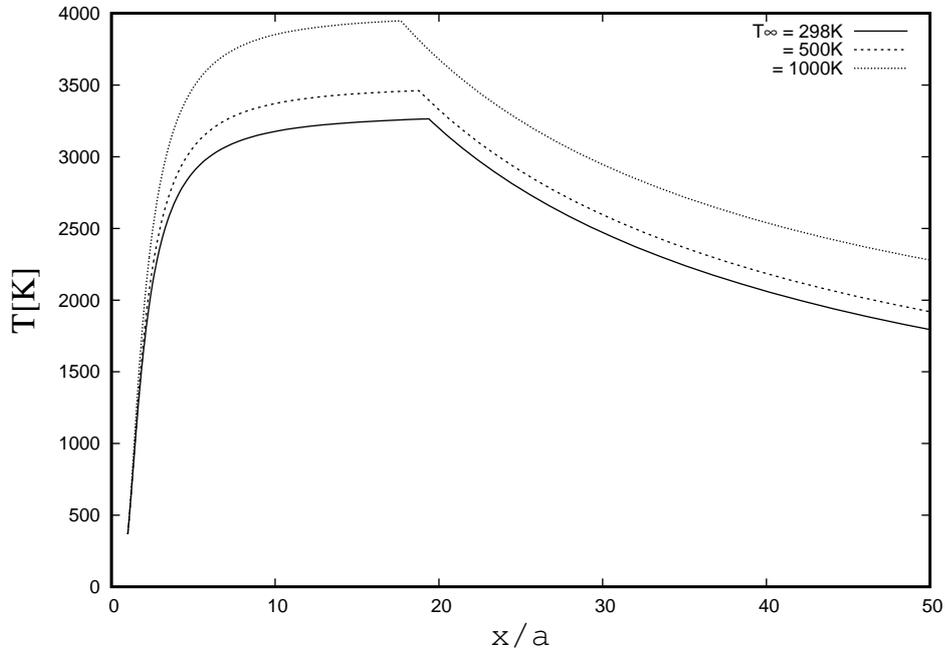
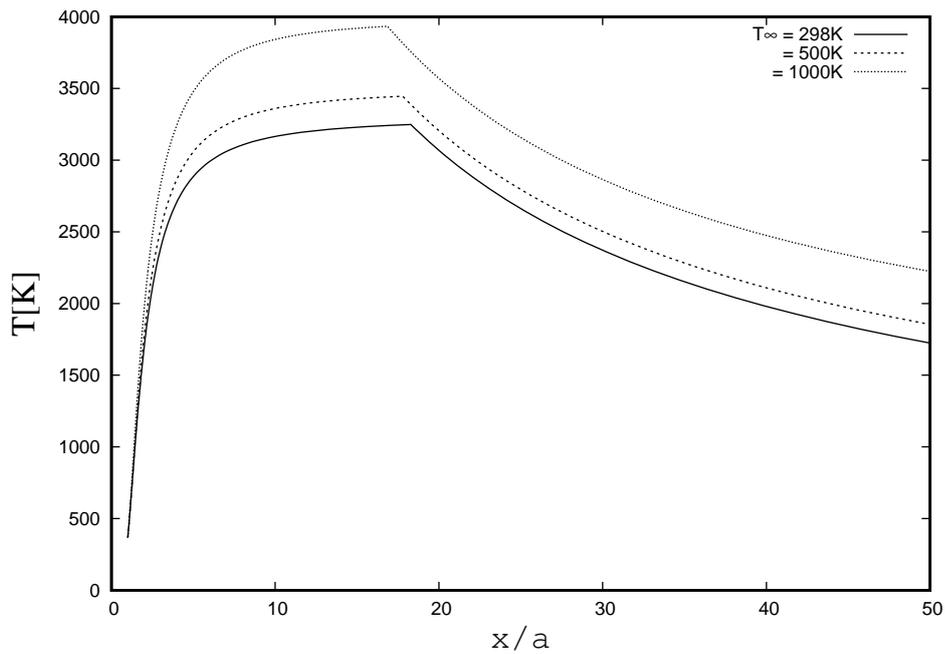


Figura 14 – Variação do perfil de temperatura com a geração de fuligem para $\phi_q = 0.1$, $\phi_m = 0.1$.

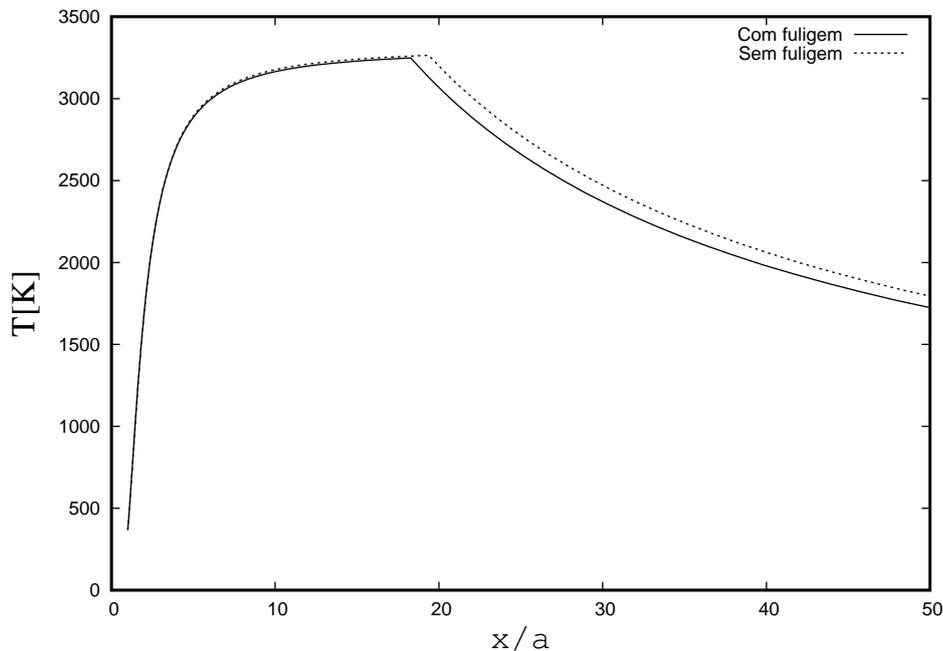


Na Fig. 15 é ilustrado uma comparação do modelo clássico (sem geração de fuligem) em relação ao modelo com uma taxa de geração de fuligem (ϕ_m) de 0.3 e com

uma calor necessário para a formação de fuligem (ϕ_q) de 0.3. Para realizar a comparação utilizou-se uma temperatura ambiente de 298K. Sendo com a variação dos parâmetros (ϕ_m) e (ϕ_q) o perfil de temperatura tem um comportamento semelhante.

Ao analisar percebe-se um decréscimo na temperatura da chama, mas a característica mais relevante é o deslocamento da chama para a esquerda quando se tem formação de fuligem, isso ocorre devido ao combustível que não é queimado, escape de combustível pela chama, então a chama precisa de mais combustível para realizar a queima e se aproxima da gota.

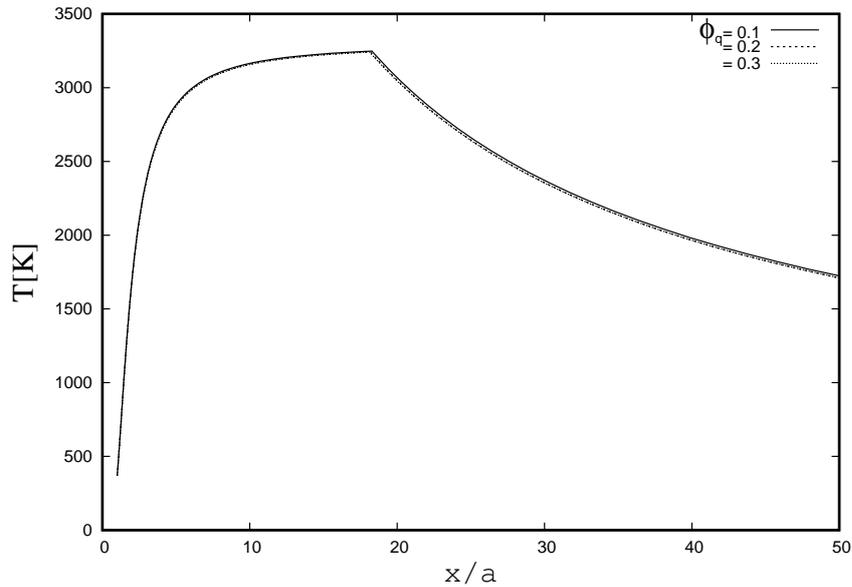
Figura 15 – Comparação da variação do perfil de temperatura com e sem geração de fuligem



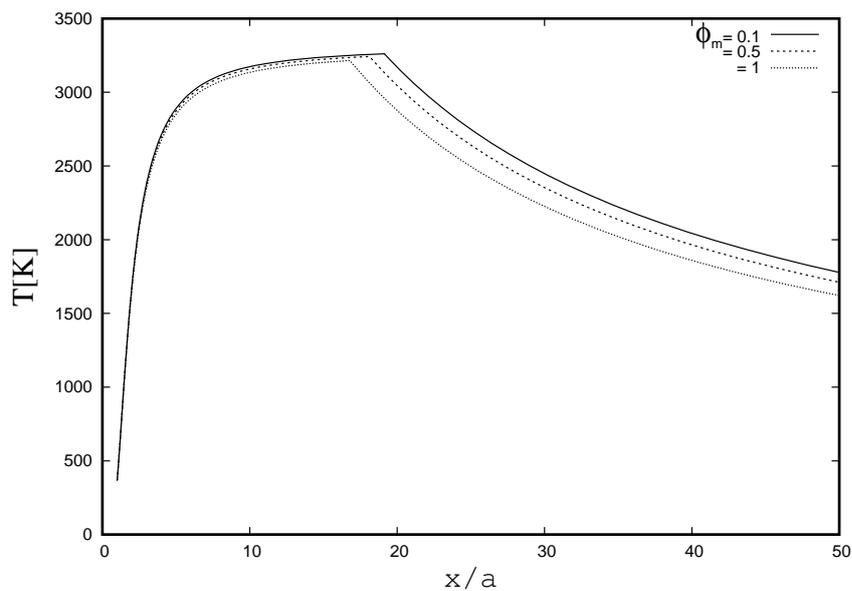
4.2 Influência de ϕ_m e ϕ_q no perfil de temperatura e nas concentrações de H_2O e CO_2

Para analisar o comportamento do perfil de temperatura da chama em função dos parâmetros ϕ_m e ϕ_q considerou-se que o ambiente esteja em uma temperatura de 298K, que a formação de fuligem comece a ocorrer em uma temperatura de 1400K.

Uma forma de avaliar o comportamento da chama foi de fixar o ϕ_m e ir variando o ϕ_q , mas quando se analisou o perfil de temperatura para diferentes variações do ϕ_q , notou-se que os mesmos apresentavam uma variação muito pequena, tendo em vista que o calor necessário para a geração de fuligem é muito baixa, por esse motivo que o mesmo não alterou o perfil de temperatura, conforme ilustrado na Fig. 16.

Figura 16 – Variação do perfil de temperatura com $\phi_m = 0.5$ 

Para analisar o perfil de temperatura variando o ϕ_m considera um $\phi_q = 0.3$ e uma temperatura ambiente de 298K. Na Fig. 17 verifica-se a forte dependência do comportamento da chama quando se tem uma variação na taxa de geração de fuligem. Quando se consideram valores altos de ϕ_m ocorre uma aproximação entre a chama e superfície da gota; essa proximidade pode ser associada à perda de calor pela formação de fuligem e também devido à perda de combustível para geração da fuligem.

Figura 17 – Variação do perfil de temperatura com $\phi_q = 0.3$ 

Ao analisar a influência da geração de fuligem (ϕ_m) nas frações mássica de H_2O e CO_2 verificou-se que a variação no calor necessário para geração de fuligem (ϕ_q) podia ser desprezado ao analisar o deslocamento da posição da chama, pois o mesmo é um valor muito pequeno, não causando alteração nas frações mássicas, isto é apresentado nas Figs. 18, e 19, onde percebe-se que a influência de ϕ_q na mudança nas frações mássicas de H_2O e CO_2 é quase desprezível.

Figura 18 – Variação da fração mássica de H_2O com o aumento do calor necessário para geração de fuligem

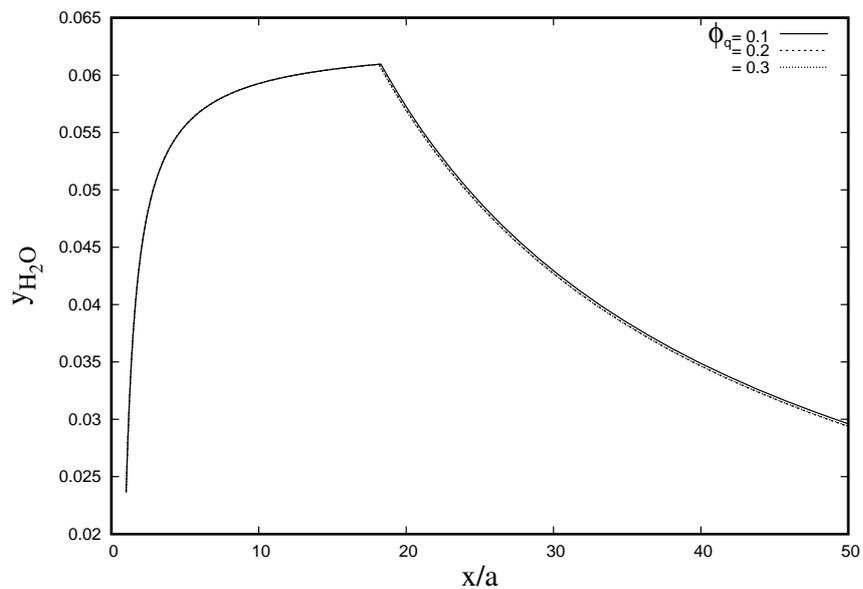
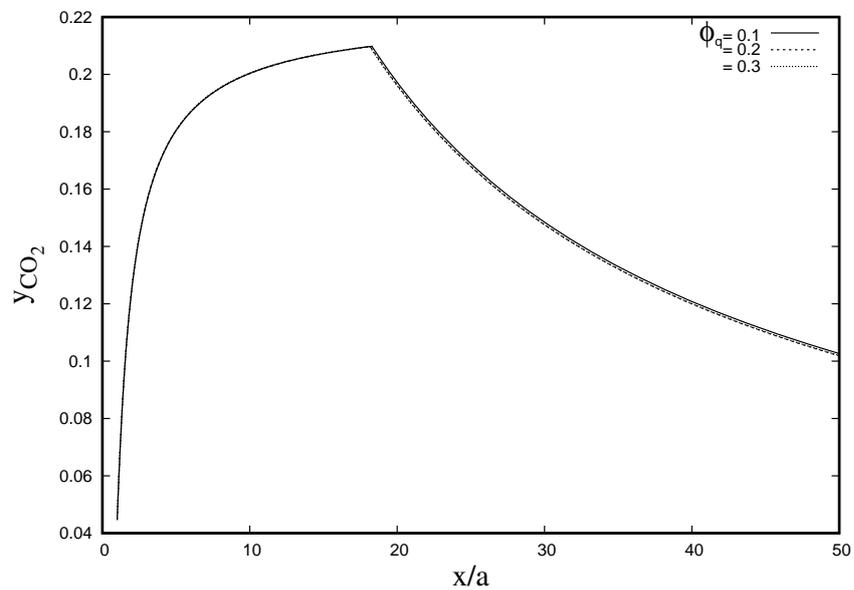


Figura 19 – Variação da fração mássica de CO_2 com o aumento do calor necessário para geração de fuligem



Mas o mesmo não ocorre quando se tem uma variação na taxa de geração de fuligem (ϕ_m), que conforme as Figs. 20 e 21 ocorre uma diminuição nas frações mássicas de ambas. Isso acontece devido essa perda de calor para formação de fuligem, pois quando se tem uma combustão sem formação de fuligem o calor para a geração de H_2O e CO_2 é maior, por isso a formação da fuligem reduz a fração mássica de ambos.

Figura 20 – Variação da fração mássica de H_2O com o aumento da formação de fuligem

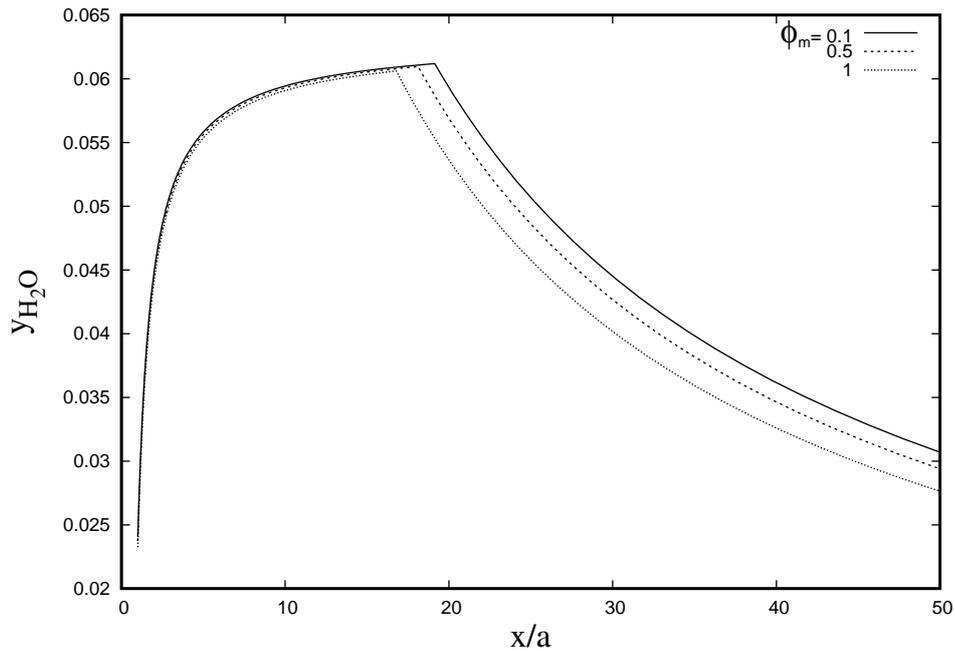
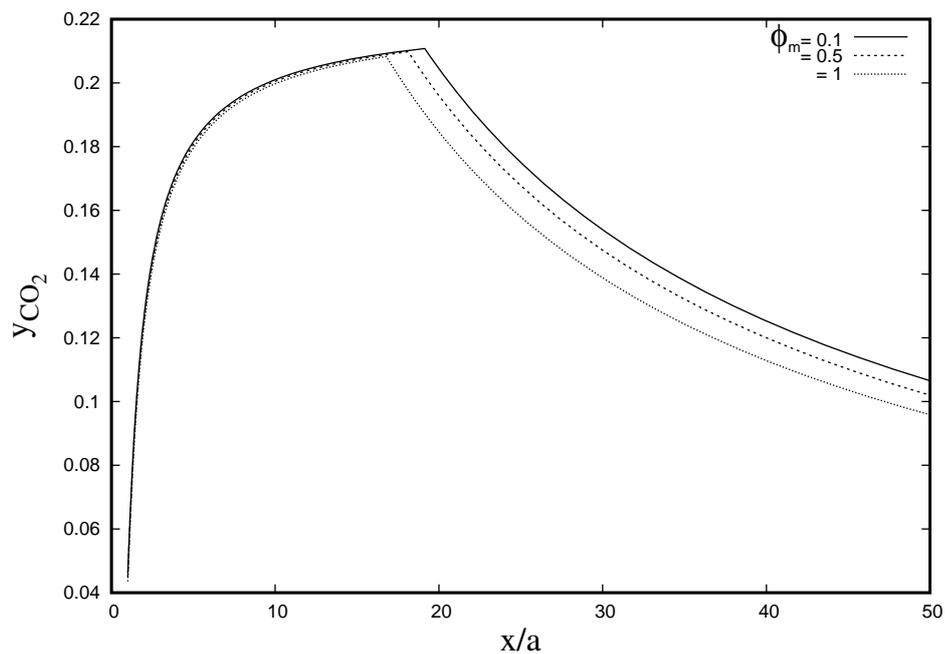


Figura 21 – Variação da fração mássica de CO_2 com o aumento da formação de fuligem



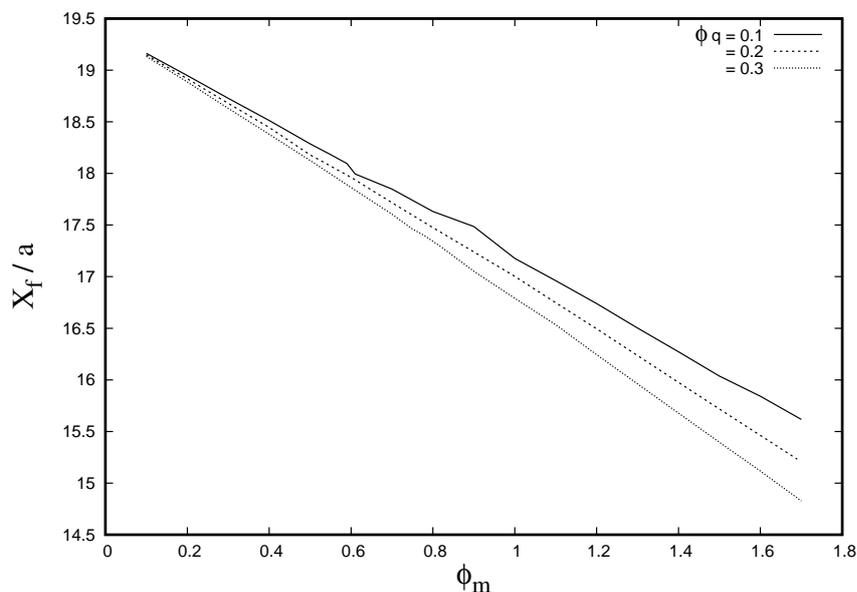
4.3 Influência da variação da taxa de geração de fuligem no comportamento da chama

A característica mais importante destacada pelo modelo é a forte dependência da posição da chama em relação a formação de fuligem. Da Eq. (3.78), a influência de todos os processos sobre o comportamento da posição da chama são revelados. A influência das propriedades termodinâmicas variáveis, número de Lewis e perda de energia radiativa através do perfil de temperatura na posição da chama x_f é minimizada porque a posição da chama depende apenas de uma potência da temperatura $f = \theta^n$, onde $n \approx 0,5$. O processo mais importante no estabelecimento da posição da chama em valores realistas é a formação de fuligem.

Como visto na Eq. (3.78), pequenas quantidades de fuligem são capazes de produzir alterações de ordem unidade na posição da chama. Assim, a chama se estabelece mais perto da gota quanto maior ϕ_m , como visto na Fig.22. Este gráfico confirma que para $\phi_m \sim 1$, a teoria da posição da chama corresponde aos resultados da simulação experimental e numérica, onde a formação de fuligem faz com a chama perca calor e se aproxima da gota (JACKSON; AVEDISIAN, 1994; JACKSON; AVEDISIAN, 1996).

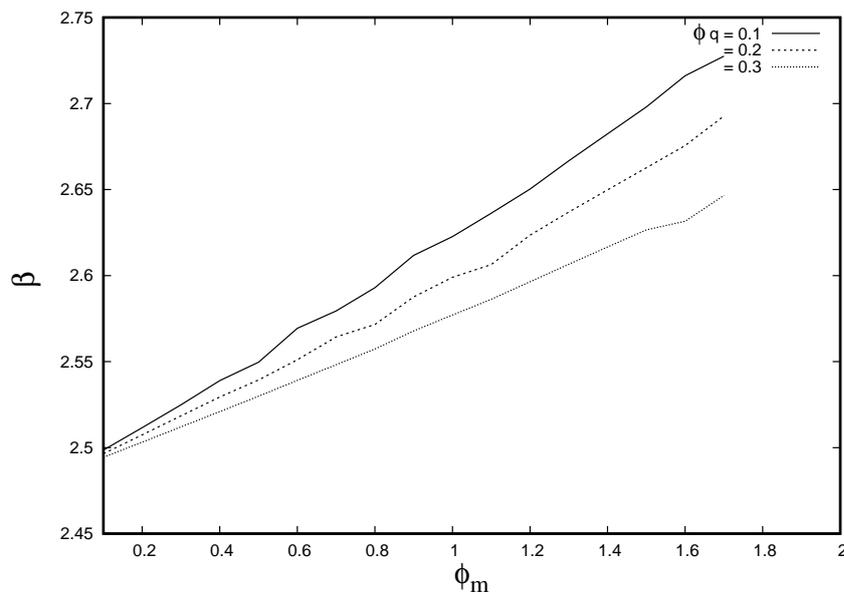
A posição da chama possui uma forte dependência em relação a taxa de geração de fuligem como é representa na Fig. 22, onde é possível verificar que a chama se aproxima da superfície da gota quando ocorre um aumento na formação de fuligem, devido que a mesma necessita de mais combustível para realizar a reação.

Figura 22 – Posição da chama x_f/a em função da massa de fuligem ϕ_m , para $\phi_q = 0.1, 0.2, 0.3$



Portanto a formação de fuligem e perda de energia radiativa é seguida por uma diminuição na temperatura da superfície da gota e conseqüentemente uma redução na fração de massa de combustível na superfície de gotas y_{F_s} e β (JACKSON; AVEDISIAN, 1994). A Fig. 23 apresenta a dependência de β sobre a taxa de formação de fuligem. Além da forte dependência de β em ϕ_m , o gráfico mostra também uma forte dependência em relação a ϕ_q . Para obter esse resultados considerou-se uma temperatura ambiente de 298K. Ao analisar o comportamento de β percebe-se que ocorre um aumento conforme se tem um acréscimo na taxa de geração de fuligem, era esperado que β diminuísse, pois a temperatura da chama teve um decréscimo, mas como a chama se aproxima da superfície da gota a vaporização acaba aumentando, portanto isso pode ser um indicativo que a posição da chama está muito próxima da gota.

Figura 23 – Constante de vaporização (β) em função da geração de fuligem (ϕ_m), para $\phi_q = 0.1, 0.2, 0.3$ e $a = 1$.



5 Conclusão

O presente trabalho foi realizado, tomando como base um modelo clássico de combustão de gotas, considerando que ocorra perdas de calor pela formação de fuligem e por radiação. A principal diferença desse modelo em relação ao modelo clássico é a implementação da formação de fuligem e a perda de calor por radiação, nesse modelo simplificado adota-se valores conhecidos experimentalmente para a perda de calor pela formação de fuligem e pela radiação.

A principal característica obtida com esse modelo foi a forte dependência da chama em relação a formação de fuligem, sendo que pequenas quantidades de geração de fuligem é capaz de produzir um deslocamento na posição da chama, ou seja, quando se aumenta ϕ_m a chama se aproxima da gota, pois necessita de mais combustível devido que a mesma perdeu para que ocorresse a geração da fuligem.

A formulação Shvab-Zel'dovich empregada foi possível contornar o problema da descontinuidade da primeira derivada das equações governantes na posição da chama e a integração do termo de reação química que é fortemente não linear. Além disso, o sistema de equações diferenciais foi reduzido a um sistema de equações diferenciais ordinárias simplificado para um sistema de equações diferenciais ordinárias de primeira ordem.

Com o presente modelo, foi possível fazer um estudo paramétrico das principais características da combustão sem a necessidade de incluir modelos de cinética química.

Embora seja limitado em termos de aplicações práticas, o modelo pode ser útil para obter uma estimativa do comportamento de propriedades tais como, posição da chama, temperatura, taxa de vaporização, etc.

Para trabalhos futuros, deve-se implementar o escape de combustível pela chama (condição não implementada no modelo), pois, o escape que é responsável pela geração de fuligem.

Referências

- BERGMAN, T. L. *Introduction to heat transfer*. [S.l.]: John Wiley & Sons, 2011. Citado na página 26.
- BIROUK, M.; GÖKALP, I. Current status of droplet evaporation in turbulent flows. *Progress in energy and combustion science*, Elsevier, v. 32, n. 4, p. 408–423, 2006. Citado na página 22.
- BURKE, S.; SCHUMANN, T. Diffusion flames. *Industrial & Engineering Chemistry*, ACS Publications, v. 20, n. 10, p. 998–1004, 1928. Citado na página 21.
- CALDEIRA, A. B.; LEIROZ, A. J. K.; ORLANDE, H. R. B. Numerical modeling of supercritical droplet-stream combustion. In: *Proceedings of the 10th Brazilian Congress of Thermal Sciences and Engineering-ENCIT*. [S.l.: s.n.], 2004. Citado na página 15.
- CRISTALDO, C. F. da C. On droplet combustion: Effect of magneto relaxation heating. 2013. Citado na página 23.
- EL-MAHALLAWY, F.; HABIK, S.-D. *Fundamentals and technology of combustion*. [S.l.]: Elsevier, 2002. Citado na página 18.
- FACHINI, F. An analytical solution for the quasi-steady droplet combustion. *Combustion and flame*, Elsevier, v. 116, n. 1, p. 302–306, 1999. Citado 2 vezes nas páginas 16 e 27.
- FACHINI, F. F. Effect of soot formation on droplet combustion. XXVII CILAMCE (Iberian Latin American Congress On Computational Methods In Engineering), 2006. Citado na página 28.
- FOGAÇA, J. R. V. *combustão e chamas de cores diferentes*. 2016. Disponível em: <<http://brasilecola.uol.com.br/quimica/combustao-chamas-cores-diferentes.htm>>. Citado 2 vezes nas páginas 20 e 21.
- GLASSMAN, I.; YETTER, R. A.; GLUMAC, N. G. *Combustion*. [S.l.]: Academic press, 2014. Citado na página 18.
- GODSAVE, G. Studies of the combustion of drops in a fuel spray—the burning of single drops of fuel. In: ELSEVIER. *Symposium (International) on Combustion*. [S.l.], 1953. v. 4, n. 1, p. 818–830. Citado 3 vezes nas páginas 23, 24 e 27.
- GOLDSMITH, M. On the burning of single drops of fuel in an oxidizing atmosphere. *Journal of Jet Propulsion*, v. 24, n. 4, p. 245–251, 1954. Citado na página 27.
- JACKSON, G.; AVEDISIAN, C. The effect of initial diameter in spherically symmetric droplet combustion of sooting fuels. In: THE ROYAL SOCIETY. *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*. [S.l.], 1994. v. 446, n. 1927, p. 255–276. Citado 3 vezes nas páginas 28, 55 e 56.
- JACKSON, G.; AVEDISIAN, C. Modeling of spherically symmetric droplet flames including complex chemistry: Effect of water addition on n-heptane droplet combustion. *Combustion science and technology*, Taylor & Francis, v. 115, n. 1-3, p. 125–149, 1996. Citado 2 vezes nas páginas 28 e 55.

- KASSOY, D. R.; WILLIAMS, F. A. Variable property effects on liquid droplet combustion. *AIAA Journal*, v. 6, n. 10, p. 1961–1965, 1968. Citado na página 27.
- KUMAR, S.; RAY, A.; KALE, S. A soot model for transient, spherically symmetric n-heptane droplet combustion. *Combustion science and technology*, Taylor & Francis, v. 174, n. 9, p. 67–102, 2002. Citado na página 28.
- KUO, K. K. Principles of combustion. Wiley New York et al., 1986. Citado 2 vezes nas páginas 17 e 19.
- LAW, C. K. *Combustion physics*. [S.l.]: Cambridge university press, 2010. Citado 4 vezes nas páginas 20, 21, 25 e 26.
- LEES, F. *Lees' Loss prevention in the process industries: Hazard identification, assessment and control*. [S.l.]: Butterworth-Heinemann, 2012. Citado na página 22.
- LORELL, J.; WISE, H.; CARR, R. E. Steady-state burning of a liquid droplet. ii. bipropellant flame. *The Journal of Chemical Physics*, AIP, v. 25, n. 2, p. 325–331, 1956. Citado na página 22.
- MANZELLO, S. L. et al. The burning of large n-heptane droplets in microgravity. *Proceedings of the Combustion Institute*, Elsevier, v. 28, n. 1, p. 1079–1086, 2000. Citado na página 28.
- MARTINS, J. *Motores de combustão interna*. [S.l.]: Publindústria, 2006. Citado na página 18.
- MIKAMI, M. et al. Clarification of the flame structure of droplet burning based on temperature measurement in microgravity. In: ELSEVIER. *Symposium (International) on Combustion*. [S.l.], 1994. v. 25, n. 1, p. 439–446. Citado 2 vezes nas páginas 26 e 28.
- NAYAGAM, V. et al. Microgravity n-heptane droplet combustion in oxygen-helium mixtures at atmospheric pressure. *AIAA journal*, v. 36, n. 8, p. 1369–1378, 1998. Citado na página 28.
- RAGHUNANDAN, B.; MUKUNDA, H. The problem of liquid droplet combustion—a reexamination. *Combustion and flame*, Elsevier, v. 30, p. 71–84, 1977. Citado na página 27.
- SIRIGNANO, W. A. A general superscalar for the combustion of liquid fuels. *Proceedings of the Combustion Institute*, Elsevier, v. 29, n. 1, p. 535–542, 2002. Citado na página 28.
- SPALDING, D. B. The combustion of liquid fuels. In: ELSEVIER. *Symposium (international) on combustion*. [S.l.], 1953. v. 4, n. 1, p. 847–864. Citado 2 vezes nas páginas 23 e 27.
- URNS, S. R. *Introdução à Combustão-: Conceitos e Aplicações*. [S.l.]: AMGH Editora, 2013. Citado 3 vezes nas páginas 17, 19 e 25.
- WARNATZ, J. et al. *Combustion*. [S.l.]: Springer, 2001. v. 3. Citado na página 22.
- WILLIAMS, F. A. *Combustion Theory*. [S.l.]: Academic Press, 1985. Citado na página 27.

WISE, H.; ABLOW, C. Burning of a liquid droplet. iii. conductive heat transfer within the condensed phase during combustion. *The Journal of Chemical Physics*, AIP Publishing, v. 27, n. 2, p. 389–393, 1957. Citado na página 23.