



OTIMIZAÇÃO DE ESCOAMENTOS REATIVOS UTILIZANDO CAMPOS MAGNÉTICOS

Gabriel Alves Romero

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Mecânica, COPPE, da Universidade Federal do Rio de Janeiro, como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Mestre em Engenharia Mecânica.

Orientadores: Marcelo José Colaço
Albino José Kalab Leiroz

Rio de Janeiro
Novembro de 2015

OTIMIZAÇÃO DE ESCOAMENTOS REATIVOS UTILIZANDO CAMPOS
MAGNÉTICOS

Gabriel Alves Romero

DISSERTAÇÃO SUBMETIDA AO CORPO DOCENTE DO INSTITUTO
ALBERTO LUIZ COIMBRA DE PÓS-GRADUAÇÃO E PESQUISA DE
ENGENHARIA (COPPE) DA UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE
JANEIRO COMO PARTE DOS REQUISITOS NECESSÁRIOS PARA A
OBTENÇÃO DO GRAU DE MESTRE EM CIÊNCIAS EM ENGENHARIA
MECÂNICA.

Examinada por:

Prof. Marcelo José Colaço, D.Sc.

Prof. Albino José Kalab Leiróz, Ph.D.

Prof.^a Angela Ourivio Nieckele, Ph.D.

Dr. Fernando Fachini Filho, Ph.D.

RIO DE JANEIRO, RJ – BRASIL
NOVEMBRO DE 2015

Romero, Gabriel Alves

Otimização de Escoamentos Reativos Utilizando Campos Magnéticos/Gabriel Alves Romero. – Rio de Janeiro: UFRJ/COPPE, 2015.

XIX, 96 p.: il.; 29,7cm.

Orientadores: Marcelo José Colaço

Albino José Kalab Leiroz

Dissertação (mestrado) – UFRJ/COPPE/Programa de Engenharia Mecânica, 2015.

Referências Bibliográficas: p. 92 – 96.

1. Chamas difusivas. 2. Campo magnético. 3. Simulação numérica. I. Colaço, Marcelo José *et al.* II. Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE, Programa de Engenharia Mecânica. III. Título.

Aos meus pais, irmão e avós.

*”O bem não faz ruído, a força do amor expressa-se
na discrição tranquila do serviço cotidiano” (São
João Paulo II)*

Agradecimentos

A Deus por todas as graças alcançadas em minha vida.

Aos meus pais, Rosa e Jorge Ricardo, pelo amor incondicional e por ensinar a importância do estudo.

Ao meu irmão, Leonardo, pelo apoio e incentivo de sempre. Aos meus avós, Miguel Alves, Maria Rosa, Jorge Romero e Arlete, pelo carinho e pela felicidade de ter vocês ao meu lado nessa etapa da minha vida.

A minha namorada Ana Luiza pelo companheirismo e incentivo em todas etapas da minha caminhada acadêmica.

Aos meus orientadores, Prof. Marcelo Colaço e Prof. Albino Leiroz, pela atenção, paciência e incentivo em todos os momentos.

Aos amigos, em especial Marcus Lemos, Rafael Melo, Rodolfo Rosa e Alexandre Falcão pela amizade verdadeira. Aos amigos e colegas que fiz no LMT, em especial aos amigos Ricardo Soares, Massoud Kashani, Camila Lacerda e Yuri Paixão, por terem tornado essa caminhada mais alegre.

Aos professores e funcionários do Programa de Pós-Graduação da Engenharia Mecânica da COPPE, em especial aos funcionários do LMT.

A ANP pela ajuda financeira, através da bolsa de mestrado.

A todos que contribuíram para a realização deste trabalho.

E finalmente a todos que realmente torceram por mim, independente das minhas escolhas.

Agradecimento à ANP

Este trabalho foi realizado no contexto do Programa de Recursos Humanos da ANP que forma profissionais especializados para a indústria de petróleo e gás natural.

A participação dos alunos bolsistas em seminários, simpósios e congressos foi muito importante no sentido de aumentar o contato dos bolsistas com os reais atributos e dificuldades das indústrias de petróleo e gás natural.

Gostaria de agradecer ao Programa de Recursos Humanos da ANP, em especial ao PRH-37, por auxiliar o desenvolvimento dos conhecimentos relativos às indústrias de petróleo, gás natural e biocombustíveis, e a conclusão desta dissertação.

Resumo da Dissertação apresentada à COPPE/UFRJ como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Mestre em Ciências (M.Sc.)

OTIMIZAÇÃO DE ESCOAMENTOS REATIVOS UTILIZANDO CAMPOS MAGNÉTICOS

Gabriel Alves Romero

Novembro/2015

Orientadores: Marcelo José Colaço
Albino José Kalab Leiroz

Programa: Engenharia Mecânica

Apresenta-se, nesta dissertação, um estudo numérico do efeito do campo magnético em uma chama difusiva com o objetivo de otimizar o processo de combustão. Os combustíveis considerados na análise são metano e etanol, com o ar como oxidante. Os campos magnéticos podem influenciar o comportamento de chamas difusivas devido as propriedades paramagnéticas e diamagnéticas dos gases presentes no escoamento reativo. Um campo magnético pode influenciar características fundamentais em chamas difusivas, como o formato da chama, o campo de temperatura e os campos de frações mássicas. Foi utilizado o Método dos Volumes Finitos para resolver as equações de conservação e o algoritmo SIMPLEC foi usado para lidar com o acoplamento pressão-velocidade. As reações químicas foram tratadas com o modelo de chama fina, sendo o mecanismo de reação expresso por uma reação global de passo único infinitamente rápida. Os resultados dessa dissertação mostram que a aplicação de um campo magnético pode carrear uma maior quantidade de oxidante em direção a zona de reação e, conseqüentemente, fornece uma maneira de controlar o comportamento da combustão.

Abstract of Dissertation presented to COPPE/UFRJ as a partial fulfillment of the requirements for the degree of Master of Science (M.Sc.)

OPTIMIZATION OF REACTING FLOWS USING MAGNETIC FIELDS

Gabriel Alves Romero

November/2015

Advisors: Marcelo José Colaço

Albino José Kalab Leiroz

Department: Mechanical Engineering

The present work describes the effect of a non-uniform magnetic field on a diffusion flame with the objective of optimizing the combustion process. The fuels considered in the analysis are methane and ethanol, with ambient air as oxidant. It has long been recognized that magnetic fields can influence the behavior of laminar diffusion flames as a result of the paramagnetic and diamagnetic properties of the constituent gases. The influence of the magnetic field on the fundamental characteristics of the diffusion flame, such as the flame shape, temperature distribution, and mass fraction field, have been thoroughly investigated in this work. The Finite Volume Method was used to solve the conservation equations and the SIMPLEC algorithm was used to deal with the velocity-pressure coupling. Chemical reactions were treated with the flame sheet model, being the reaction mechanism expressed by an irreversible infinitely fast one step global reaction. Results show that the application of a non-uniform magnetic field induces a greater entrainment of oxidizer towards the reaction zone and, consequently, provides a way to control the combustion behavior.

Sumário

Lista de Figuras	xii
Lista de Tabelas	xv
Lista de Símbolos	xvi
1 Introdução	1
1.1 Motivação	2
1.2 Objetivos	3
1.2.1 Objetivo Geral	3
1.2.2 Objetivos Específicos	3
1.3 Organização do Trabalho	4
I Revisão Bibliográfica	5
2 Revisão Bibliográfica	6
2.1 Influência de Campos Magnéticos em Escoamentos Reativos	6
2.2 Chamas Difusivas Laminares	13
II Formulação Física e Matemática do Problema Proposto	20
3 Modelo Físico	21
3.1 Parâmetros de Caracterização de Chamas Difusivas	21
3.1.1 Altura da Chama	21
3.1.2 Largura da Chama	21
3.1.3 Número de Reynolds	22
3.1.4 Número de Froude	22
3.2 Parâmetros de Caracterização dos Efeitos do Campo Magnético em Chamas Difusivas	23
3.2.1 Número de Grashof Magnético	23

3.2.2	Número de Froude Magnético	23
3.2.3	Razão entre as Forças de Empuxo e Magnéticas (N_{gm})	24
3.2.4	Número de Reynolds Magnético (Re_m)	25
3.3	Modelo Físico	26
4	Modelo Matemático	29
4.1	Equações de Conservação para Sistemas Multicomponentes sob Ação de Forças Magnéticas	29
4.2	Formulação de Shvab-Zeldovich	31
4.3	Modelo de Chama Fina	34
4.3.1	Frações de Mistura - Escalares Conservados	38
4.4	Variação das Propriedades Termodinâmicas e de Transporte	41
4.5	Domínio Computacional e Condições de Contorno	42
5	Metodologia	44
5.1	Chamas Difusivas de Metano e Etanol	45
5.2	Problema de Otimização	46
III	Resultados e Conclusões	49
6	Verificação	50
6.1	Análise da Convergência da Malha	52
6.2	Chama Difusiva de Metano sem Aplicação do Campo Magnético	54
6.3	Chama Difusiva de Metano com Campo Magnético Decrescente	64
6.4	Chama Difusiva de Metano com Campo Magnético Crescente	69
7	Chama Difusiva de Metano	74
8	Chama Difusiva de Etanol	79
9	Otimização	83
10	Conclusões e Sugestões	89
10.1	Sugestões para Trabalhos Futuros	90
	Referências Bibliográficas	92

Lista de Figuras

1.1	Matriz energética mundial e brasileira em 2012, segundo International Energy Agency(IEA). Adaptado de IEA [1].	1
2.1	Formato da chama de metano em três condições do campo magnético. Em pontilhado, a chama após a aplicação do campo magnético. Adaptado de WAKAYAMA [2].	8
2.2	Representação do modelo de Burke-Schumann. Adaptado de SAUER [3].	15
3.1	Esquema do Modelo Físico. A intensidade da densidade de fluxo magnético é uma função apenas da coordenada x. Adaptado de SAUER [3].	27
4.1	Sistema simplificado de uma chama difusiva modelada empregando o modelo de chama fina, onde dentro da chama somente combustível e produtos existem e fora da chama oxidante e produtos. Adaptado de TURNS [4].	40
4.2	Domínio Computacional e Condições de Contorno.	43
5.1	Alguns campos magnéticos utilizados no problema de otimização. . .	47
5.2	Produto do campo magnético pelo seu gradiente variando em relação a posição axial.	48
6.1	Distribuição dos pontos na malha 80×80 gerada pelo programa comercial Ansys Meshing.	52
6.2	Comparação dos perfis de (a) Temperatura, (b) Velocidade Axial, (c) Fração de Mistura ao longo do eixo de simetria obtidas utilizando malhas de 80×80 e 100×100.	53
6.3	Comparação dos campos de temperatura entre os programas FORTRAN e FLUENT.	54
6.4	Comparativo dos perfis de temperatura ao longo do eixo de simetria. Símbolos: resultados experimentais (MITCHELL <i>et al.</i> [5],1980). . . .	55

6.5	Comparação dos campos de velocidade axial e linhas de corrente entre os programas FORTRAN e FLUENT.	56
6.6	Comparativo dos perfis de velocidade axial nas posições axiais (a)1,2 cm; (b)2,4 cm; (c)5,0 cm. Símbolos: resultados experimentais (MITCHELL <i>et al.</i> [5],1980).	57
6.7	Comparativo dos perfis de temperatura nas posições axiais (a)1,2 cm; (b)2,4 cm; (c)5,0 cm. Símbolos: resultados experimentais (MITCHELL <i>et al.</i> [5],1980).	59
6.8	Comparativo dos perfis de fração mássica de CH_4 nas posições axiais (a)1,2 cm; (b)2,4 cm; (c)5,0 cm. Símbolos: resultados experimentais (MITCHELL <i>et al.</i> [5],1980).	60
6.9	Comparativo dos perfis de fração mássica de O_2 nas posições axiais (a)1,2 cm; (b)2,4 cm; (c)5,0 cm. Símbolos: resultados experimentais (MITCHELL <i>et al.</i> [5],1980).	61
6.10	Perfis da chama de metano sem aplicação do campo magnético obtidos com o programa FORTRAN.	62
6.11	Perfis da chama de metano sem aplicação do campo magnético obtidos com o programa FLUENT.	63
6.12	Comparação dos campos de temperatura da chama de metano entre os programas FORTRAN e FLUENT quando aplicado um campo magnético decrescente ($B \frac{dB}{dx} = -40 \quad T^2/m$).	64
6.13	Comparativo dos perfis de temperatura ao longo do eixo de simetria de uma chama de metano sob ação de um campo magnético decrescente ($B \frac{dB}{dx} = -40 \quad T^2/m$).	65
6.14	Comparação dos campos de velocidade axial da chama de metano entre os programas FORTRAN e FLUENT quando aplicado um campo magnético decrescente ($B \frac{dB}{dx} = -40 \quad T^2/m$).	66
6.15	Perfis da chama de metano em um campo magnético decrescente obtidos com o programa FORTRAN ($B \frac{dB}{dx} = -40 \quad T^2/m$).	67
6.16	Perfis da chama de metano em um campo magnético decrescente obtidos com o programa FLUENT ($B \frac{dB}{dx} = -40 \quad T^2/m$).	68
6.17	Comparação dos campos de temperatura da chama de metano entre os programas FORTRAN e FLUENT quando aplicado um campo magnético crescente ($B \frac{dB}{dx} = +40 \quad T^2/m$).	69
6.18	Comparativo dos perfis de temperatura ao longo do eixo de simetria de uma chama de metano sob ação de um campo magnético crescente ($B \frac{dB}{dx} = +40 \quad T^2/m$).	70

6.19	Comparação dos campos de velocidade axial da chama de metano entre os programas FORTRAN e FLUENT quando aplicado um campo magnético crescente ($B \frac{dB}{dx} = +40 \text{ T}^2/m$).	71
6.20	Perfis da chama de metano em um campo magnético crescente obtidos com o programa FORTRAN ($B \frac{dB}{dx} = +40 \text{ T}^2/m$).	72
6.21	Perfis da chama de metano em um campo magnético crescente obtidos com o programa FLUENT ($B \frac{dB}{dx} = +40 \text{ T}^2/m$).	73
7.1	Comparativo dos perfis de temperatura ao longo do eixo de simetria da chama de metano.	75
7.2	Perfis de temperatura e posição da chama de metano. Em (a) $B = 0$, (b) campo magnético decrescente, e (c) campo magnético crescente. .	75
7.3	Perfis da fração de mistura e posição da chama de metano. Em (a) $B = 0$, (b) campo magnético decrescente, e (c) campo magnético crescente.	76
7.4	Perfis da velocidade axial e linhas de corrente da chama de metano. Em (a) $B = 0$, (b) campo magnético decrescente, e (c) campo magnético crescente.	77
8.1	Perfis de temperatura e posição da chama de etanol. Em (a) $B = 0$, (b) campo magnético decrescente, e (c) campo magnético crescente. .	79
8.2	Perfis da velocidade axial e linhas de corrente da chama de etanol. Em (a) $B = 0$, (b) campo magnético decrescente, e (c) campo magnético crescente.	81
9.1	Gráfico 3D da otimização da largura da chama W_f em função da variáveis de projeto B_o e $\frac{dB}{dx}$	84
9.2	Gráfico 2D da otimização da largura da chama W_f em função do módulo da variável de projeto $ \frac{dB}{dx} $, mantido $B_o = 1,5T$	85
9.3	Gráfico da otimização da largura da chama W_f em função do K_{obj} . .	87
9.4	Gráfico da otimização da largura da chama W_f em função do K_{obj} , em escala diferente da figura anterior.	87

Lista de Tabelas

3.1	Caracterização das condições do escoamento reativo sob ação de um campo magnético. Adaptado de SWAMINATHAN [6].	25
5.1	Valores dos limites superior e inferior das variáveis do problema de otimização	46
7.1	Parâmetros de caracterização da chama de metano sob ação de campos magnéticos.	78
8.1	Parâmetros de caracterização da chama de etanol sob ação de campos magnéticos.	81
9.1	Informações referentes ao tempo gasto em cada simulação em minutos.	85
9.2	Valores otimizados das variáveis de projeto B_o e $\frac{dB}{dx}$, e da função objetivo W_f	88

Lista de Símbolos

A	Fator pré-exponencial
B	Densidade de fluxo magnético
\mathbf{B}	Vetor do campo magnético
B_o	Densidade de fluxo magnético na posição $x = 0$
c_p	Calor específico a pressão constante em unidade mássica
d	Diâmetro do queimador
\mathbf{D}	Coeficiente de difusão
e	Energia interna específica
E	Energia de ativação
\mathbf{f}	Força de corpo
f	Função de acoplamento
F	Combustível
Fr	Número de Froude
Fr_m	Número de Froude magnético
\mathbf{g}	Vetor aceleração gravitacional
g	Componente da aceleração gravitacional
Gr_m	Número de Grashoff magnético
h	Entalpia específica
H	Intensidade do campo magnético
I	Razão entre a quantidade de movimento em $t = 0$ e no escoamento uniforme
K_{obj}	Número de vezes que a função objetivo é calculada

l	Comprimento característico
L_f	Altura da chama
np	Número da população utilizada no algoritmo de otimização
N	Número de espécies químicas
N_{gm}	Razão entre as forças de empuxo e magnéticas
P	Pressão / Produto
\mathbf{q}	Vetor fluxo de calor
r	Distância radial
R	Constante universal dos gases
R_F	Raio do tubo interno
R_O	Raio do tubo externo
Re	Número de Reynolds
Re_m	Número de Reynolds magnético
s	Coefficiente estequiométrico mássico
t	Tempo
T	Temperatura
u	Velocidade axial
U	Velocidade característica
v	Velocidade radial
\mathbf{v}	Vetor velocidade
\mathbf{V}	Vetor velocidade de difusão mássica
W_f	Largura ou diâmetro da chama
W	Massa molecular
\bar{W}	Massa molecular média
x	Distância axial
Y	Fração mássica
Z	Fração de mistura

Símbolos Gregos

α	Aceleração média gerada pelo empuxo gravitacional
λ	Condutividade térmica
η	Número de mols
μ	Viscosidade dinâmica
μ_m	Permeabilidade magnética do material
μ_o	Permeabilidade magnética do vácuo
ν	Viscosidade cinemática
ν_F	Velocidade de injeção do combustível
ρ	Massa específica
σ	Condutividade elétrica
τ	Tensor de tensões
χ	Susceptibilidade magnética do gás
$\dot{\omega}$	Taxa de reação em unidade mássica

Subscritos e Sobrescritos

0	Estado de referência
a	Ar
A_∞	Entrada de ar
$esteq$	Condições estequiométricas
f	Frente de chama
F	Combustível
F_∞	Entrada de combustível
k	Espécie química
M	Mistura
max	Máximo valor da variável
OX	Oxidante
Pr	Produtos
∞	Condições de entrada

Capítulo 1

Introdução

A maior parte da energia consumida no mundo é obtida a partir da queima de carvão e de derivados de petróleo, como a gasolina, o querosene e o óleo diesel [1]. Considerando as previsões de escassez das reservas petrolíferas e as variações dos preços do barril de petróleo no mercado internacional, torna-se imprescindível a diversificação da matriz energética brasileira e a utilização em maior quantidade de combustíveis que não sejam de origem fóssil, como os biocombustíveis. Conforme a Lei n.º. 9478/97, biocombustível é o combustível derivado de biomassa renovável, para uso em motores a combustão interna ou conforme regulamento, para outro tipo de geração de energia, que possa substituir, parcial ou totalmente, combustíveis de origem fóssil.

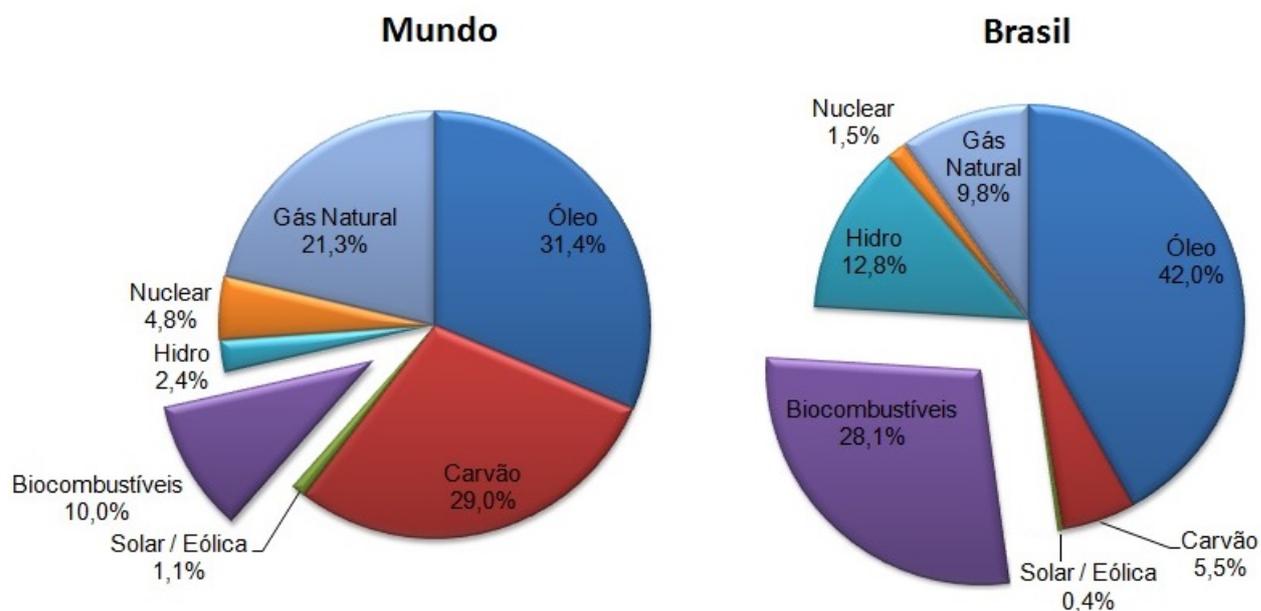


Figura 1.1: Matriz energética mundial e brasileira em 2012, segundo International Energy Agency(IEA). Adaptado de IEA [1].

As políticas de independência energética e mudanças do clima estimulam o desenvolvimento da utilização de fontes renováveis de energia, como os biocombustíveis. Em diversos países, muitas pesquisas e estudos do processo de combustão de biocombustíveis vêm sendo realizados devido à necessidade da diminuição das emissões de gases de efeito estufa na atmosfera e da dependência dos combustíveis de origem fóssil. Pode ser observado que no Brasil, há algumas décadas, foram feitos esforços e leis foram criadas para incentivar a mistura de álcool do bagaço da cana na gasolina e do biodiesel no diesel de origem fóssil. O Programa do Álcool brasileiro foi lançado pela primeira vez em 1975 e na atualidade é uma das maiores aplicações comerciais de biomassa para produção e utilização de energia no mundo [7]. Assim, em relação ao cenário mundial, o Brasil apresenta uma matriz energética com forte presença das energias renováveis. Isso ocorre devido a grande produção de energia elétrica pelas hidroelétricas, e principalmente a utilização de álcool e biodiesel como combustíveis[1](ver Fig.1.1).

Em um mundo onde a demanda e a importância da energia são cada vez maiores, estudos científicos com a finalidade de otimizar sistemas térmicos são necessários para produção de energia com maior eficiência. A maioria dos sistemas térmicos para produção de energia utilizam a combustão como fonte de geração de calor. O aumento da eficiência do processo de combustão tem como consequência a diminuição do consumo de combustível, do custo para geração de potência e das emissões de gases do efeito estufa e poluentes. Por isso, o controle do processo de combustão é de extrema importância tecnológica, econômica e ambiental. Em diversas máquinas, o controle da chama de combustão é necessário para se otimizar o consumo de combustível e a emissão de poluentes. Nesta dissertação, será estudada uma forma de controle de escoamentos reativos por campos magnéticos.

1.1 Motivação

Os processos de combustão estão presentes em diversas máquinas da indústria do petróleo, dentre as quais se destacam as caldeiras, queimadores industriais e turbinas a gás. Nesses equipamentos, o processo de combustão envolve a mistura de correntes de combustível e oxidante, originalmente separadas. A eficiência desses equipamentos está relacionada com um maior controle da combustão e da mistura entre combustível e oxidante. Assim, a otimização de escoamentos reativos utilizando um campo magnético pode representar um avanço tecnológico significativo. Desta forma, através dos resultados obtidos na análise da combustão de biocombustíveis sujeita a um campo magnético, pretende-se colaborar com a redução de emissões de poluentes, redução do consumo de combustível e na predição do campo de temperatura do escoamento.

Estudos mostram que os campos magnéticos afetam o comportamento da combustão e podem modificar as características de chamas difusivas. Chamas difusivas são caracterizadas pela reação de combustão na interface entre o gás combustível e o oxidante, diferentemente de chamas pré misturadas em que o combustível e oxidante já estão misturados em proporção apropriada antes da queima. As chamas difusivas são controladas pela mistura e pelo processo de difusão, portanto quanto melhor o transporte das espécies na interface combustível-oxidante, chamada de zona de reação, melhor é a característica da combustão. Esses sistemas são controlados pela difusão dos gases quentes da combustão na direção contrária da chama e do oxidante em direção a zona de reação. O transporte das espécies químicas e a difusão são induzidos pela convecção gerada pelo campo gravitacional, onde esse mecanismo sustenta a reação de combustão. Em ambientes de microgravidade os efeitos do empuxo são desprezíveis e chamas podem ser extintas devido a ausência do mecanismo da convecção. Dessa forma, através da utilização de forças magnéticas, essa dissertação tem como motivação a análise de um método alternativo de induzir o escoamento do ar em torno da chama, controlando e otimizando o escoamento reativo.

1.2 Objetivos

1.2.1 Objetivo Geral

O objetivo desta dissertação é estudar numericamente os processos físicos e químicos envolvidos na injeção de correntes de oxidante e de biocombustível na presença de um campo magnético. A análise do escoamento reativo consiste na obtenção de resultados que permitam o controle da combustão, da taxa de queima, e do tamanho e forma da chama utilizando um campo magnético. Desta forma, podem ser otimizados o consumo de combustível e seus níveis de emissão de poluentes.

1.2.2 Objetivos Específicos

Os objetivos específicos desta dissertação, são:

- (a) Analisar como o campo magnético influencia na combustão de metano e etanol, e comparar os dois combustíveis sob a ação de um campo magnético;
- (b) Encontrar um campo magnético que otimize o escoamento reativo através da atração do oxidante para a zona de reação;

- (c) Identificar parâmetros e números adimensionais que possam ser utilizados para caracterizar escoamentos reativos na presença de um campo magnético;
- (d) Analisar a capacidade dos campos magnéticos em aumentar a eficiência de queimadores industriais, controlando a combustão através de uma mistura mais eficiente entre combustível e oxidante.

1.3 Organização do Trabalho

O capítulo 2 apresenta a revisão bibliográfica, que visa mostrar uma revisão acerca da influência de campos magnéticos em escoamentos reativos e chamas difusivas laminares.

No capítulo 3, denominado Modelo Físico, são apresentados parâmetros que caracterizam o escoamento reativo, e a interação do mesmo com campos magnéticos. E em outra seção, define-se o problema de combustão que será resolvido numericamente, bem como o problema de otimização da combustão.

No capítulo 4, denominado Modelo Matemático, são formuladas as equações que modelam o escoamento reativo na presença de campos magnéticos.

O capítulo 5 foi dividido em duas seções principais, e nele será apresentada a metodologia para obtenção dos resultados dessa dissertação. A primeira seção, denominada Chamas Difusivas de Metano e Etanol, apresenta a metodologia que foi utilizada para obtenção dos resultados das chamas de metano e etanol sujeitas a campos magnéticos crescentes e decrescentes. Na segunda seção será apresentada a metodologia para o problema de otimização do escoamento reativo através de um campo magnético decrescente.

No capítulo 6 será apresentado a comparação dos resultados obtidos pelo código FORTRAN com os obtidos pelo programa comercial FLUENT 15.0.

Utilizando o código desenvolvido em FORTRAN, nos capítulos 7, 8 e 9 serão apresentados os resultados da combustão de metano, etanol e do problema de otimização.

No capítulo 10 será apresentado as conclusões e sugestões de trabalhos futuros.

Parte I

Revisão Bibliográfica

Capítulo 2

Revisão Bibliográfica

Esse capítulo apresenta uma revisão dos trabalhos disponíveis na literatura que contextualizam e fundamentam essa dissertação.

2.1 Influência de Campos Magnéticos em Escoamentos Reativos

O fato dos campos magnéticos poderem afetar o comportamento de chamas foi relatado há mais de 150 anos atrás. Em 1847, FARADAY [8] observou que as chamas de velas se inclinavam, mudavam de formato e eram mais luminosas quando submetidas à campos magnéticos. Ele postulou a existência de gases "magnéticos" ou "diamagnéticos" presentes no processo de combustão. Muitos estudos se concentraram no estudo das interações entre campos magnéticos e fluidos condutores de eletricidade. Essa área, denominada magneto-hidrodinâmica (MHD)[9][10], estuda os fenômenos de circulação em gases fortemente ionizados ou em líquidos dotados de grande condutividade elétrica na presença de campos magnéticos internos ou externos. Contudo, a interação entre o campo magnético e o escoamento não ocorre somente devido à condução elétrica do fluido. Campos magnéticos podem afetar fluidos que exibam comportamento paramagnéticos ou diamagnéticos, mesmo que o fluido não seja condutor de eletricidade. Assim, VON ENGEL e COZENS [11], utilizando um modelo baseado na teoria eletromagnética, mostraram que a interação entre campos magnéticos e íons carregados é insuficiente para que experimentalmente se note uma mudança no comportamento da chama. As mudanças observadas experimentalmente por eles foram atribuídas ao gradiente de pressão ocasionado pelas diferentes permeabilidades magnéticas. Assim, esse comportamento do escoamento reativo sugeriu a possibilidade de controle da combustão por campos magnéticos.

As chamas são afetadas pelos campos magnéticos devido à presença de gases com comportamento paramagnético e diamagnético. O paramagnetismo é o

resultado de elétrons sem pares que causam um momento de dipolo permanente na presença de um campo magnético não uniforme[12]. E, como resultado, o fluido escoou na direção de aumento da intensidade do campo magnético. Por outro lado, no diamagnetismo os elétrons estão dispostos em pares, não existe a formação de um dipolo, e essa resistência faz com que os átomos se movam na direção de decaimento da intensidade do campo magnético. O escoamento é mais afetado pelo paramagnetismo, pois esse comportamento é três ordens de grandeza superior ao diamagnetismo[12]. Oxigênio e o ar são exemplos de substâncias paramagnéticas e são impelidos na direção das maiores intensidades do campo magnético. Nitrogênio, dióxido de carbono, e a maioria dos hidrocarbonetos são diamagnéticos, sendo repelidos das maiores intensidades em direção as menores intensidades do campo[6].

Na literatura grande parte dos estudos fazem uma abordagem experimental da influência de campos magnéticos em escoamentos reativos e poucos estudos fazem uma abordagem numérica, como nesse trabalho.

Na década de 90, o interesse científico nessa área retornou, e muitas pesquisas sobre a relação entre combustão e campos magnéticos foram realizadas no Japão. A natureza dos estudos variaram em diferentes temas como: a influência do campo magnético no escoamento de gases, combustão pré-misturada e difusiva, intensidade de emissão de vários radicais observados nas chamas, e estudo da combustão em ambientes de microgravidade.

UENO [13] pesquisou sobre a habilidade dos campos magnéticos em extinguir a chama. Em seu experimento, colocou uma vela entre dois ímãs para expor a chama a um campo de $1.5T$ e um gradiente de $50 - 300T/m$. A chama foi imediatamente extinta depois da aplicação do campo magnético com gradiente crescente. Nesse estudo foi concluído que o tempo de vida da chama aumenta com a diminuição do campo magnético e campos de intensidade abaixo de $0.9T$ não extinguiram a chama da vela.

Um dos pesquisadores mais presentes no tema do presente trabalho é WAKAYAMA, que em 1992 estudou o comportamento da combustão do metano em chamas pré misturadas e difusivas sujeitas a um campo magnético[2]. O campo magnético foi aplicado em três condições distintas: campo magnético de intensidade decrescente, campo magnético homogêneo e campo magnético de intensidade crescente conforme se afastam da saída dos dutos de injeção. De forma geral, os resultados mostraram que a chama apresenta a tendência de se localizar em regiões de menores intensidades do campo magnético e o formato da chama se torna alongada e esbelta em campos magnéticos de intensidade decrescente. Também foi observado que a temperatura e luminosidade aumentaram quando o gradiente magnético foi aumentado. Quando a chama foi colocada em uma região de aumento da inten-

sidade do campo magnético, o formato da chama foi pequeno e espesso. Segundo WAKAYAMA [2], quando exposta a um campo magnético uniforme a chama não pareceu ser afetada. Ele atribuiu esses comportamentos da chama à natureza paramagnética do oxigênio, e diamagnética dos produtos de combustão, e assim, propôs um mecanismo no qual o oxigênio paramagnético é atraído em direção a região de maior intensidade do campo, enquanto os produtos da reação diamagnéticos são atraídos para regiões de menores intensidades do campo magnético. Ou seja, a reação de combustão é estimulada quando o fluxo do escoamento reativo é no sentido do decaimento da intensidade do campo magnético, pois o fornecimento de oxigênio na zona de reação cresce e os produtos de reação são rejeitados eficientemente para fora da zona de reação, em direção ao campo fraco. O formato da chama obtido por WAKAYAMA [2] com a aplicação de campos magnéticos pode ser visualizada na figura 2.1.

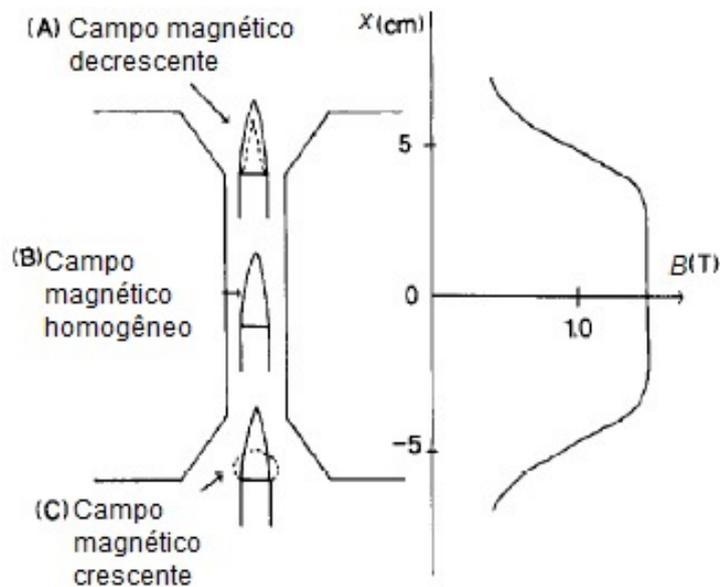


Figura 2.1: Formato da chama de metano em três condições do campo magnético. Em pontilhado, a chama após a aplicação do campo magnético. Adaptado de WAKAYAMA [2].

WAKAYAMA [14] investigou o efeito do gradiente de um campo magnético em chamas difusivas de metano. Foi constatado que o oxigênio tem importante papel para determinar o efeito do campo magnético nas chamas difusivas, pois a concentração de oxigênio paramagnético no ar é muito maior do que outras espécies paramagnéticas como íons, radicais e elétrons. Quando o gradiente deste campo é negativo, o autor observou que a convecção e a difusão do ar na zona de reação são estimuladas magneticamente e a taxa de combustão de chamas difusivas aumenta

com o aumento da intensidade do campo magnético. O mesmo autor, em outro estudo, acelerou o gás nitrogênio na direção de um campo magnético decrescente e como esperado o gás N_2 diamagnético apresentou um comportamento oposto ao O_2 paramagnético. Ou seja, o nitrogênio é atraído em direção as menores intensidades do campo magnético[15]. Assim, WAKAYAMA [14] concluiu que é possível controlar o escoamento de gases e a combustão de chamas difusivas utilizando campos magnéticos.

Com as pesquisas mostrando a possibilidade do controle da combustão através de campos magnéticos, novos estudos foram realizados com o objetivo da manutenção e estímulo da reação de combustão mesmo em ambientes com microgravidade. As chamas dependem da convecção natural para reabastecer os reagentes e remover os produtos da combustão. Devido o efeito da convecção natural não estar presente em microgravidade, chamas difusivas tornam-se esféricas, tem baixa energia, e eventualmente são extintas [16].

WAKAYAMA *et al.* [16] estudaram a influência magnética na manutenção da combustão difusiva de butano em microgravidade. Os resultados foram comparados com chamas difusivas sem a presença de campo magnético, e os autores concluíram que a presença de um campo magnético não uniforme e decrescente induz a convecção do ar na chama similarmente como é induzida também pelo efeito do empuxo gravitacional. Essa convecção induzida magneticamente alonga o formato da chama em contraste à chama com o formato esférico, que é obtida na combustão em microgravidade. Este trabalho confirma a capacidade do campo magnético em controlar escoamentos de gases e o processo de combustão e mostrou que a indução do escoamento magneticamente manteve a reação de combustão mais eficientemente do que a convecção natural em gravidade normal.

FUJITA *et al.* [17] estudaram o efeito de campos magnéticos em chamas difusivas laminares de propano em um ambiente sujeito à microgravidade. O empuxo nos gases de combustão causado pela gravidade é um fenômeno dominante em chamas difusivas sujeitas à uma gravidade normal. Portanto o experimento em microgravidade permitiu observar a influência do campo magnético na combustão. Nesse trabalho foi estudado o efeito da variação da intensidade do campo magnético e da concentração do oxigênio. Também foram avaliadas a intensidade mínima do campo para manutenção da combustão e o aspecto da chama, como a forma, tamanho, brilho e cor da chama variando o campo magnético. Foram definidos parâmetros que caracterizam o efeito do campo magnético em chamas difusivas, como o número de Grashoff magnético, o número de Froude magnético e a razão entre o empuxo gravitacional e o magnético. FUJITA *et al.* concluíram que a chama sobre microgravidade será sustentada se o Grashoff magnético for maior que 10^3 , do contrário a

chama é extinta. Isso se deve pois, quando o número Grashoff é diminuído, as forças viscosas aumentam em relação as convectivas, existe pouca convecção, o fenômeno da combustão é dominado pela difusão, o que resulta em instabilidade. Uma vez que o número de Grashoff é maior do que 10^3 , as forças convectivas se tornam maiores e uma chama estável pode ser mantida. Os resultados mostraram que quanto maior o campo magnético maior é o brilho da chama e menor é a altura da chama. A altura também foi avaliada para duas concentrações de oxigênio, e os resultados obtidos mostraram que quanto maior a concentração menor é a chama.

A forma da chama é profundamente afetada pelo campo gravitacional, que gera um empuxo semelhante ao induzido por um campo magnético. SUNDERLAND *et al.* [18] estudaram o formato de uma chama difusiva laminar em condições de gravidade normal e microgravidade. Foram utilizados como combustível etano, metano e propano, tendo o ar como oxidante. Variando o diâmetro do queimador, vazão mássica e pressão ambiente, foram avaliados parâmetros como altura e largura de chama. Os resultados mostraram que a altura da chama é proporcional a vazão mássica de combustível, ou seja, a razão altura de chama por diâmetro do queimador é proporcional ao número de Reynolds, $L_f/d \propto Re$. Foi verificado também que o empuxo reduz a largura da chama devido aos efeitos da convecção na direção radial. Esse efeito é mais evidente em escoamentos reativos com baixos números de Reynolds e Froude, onde as forças geradas pelo empuxo são mais significativas do que as forças de inércia. Para escoamentos com número de Froude elevado a variação na largura da chama não é tão significativa, pois a chama é controlada pela quantidade de movimento e não pelo empuxo gravitacional.

MIZUTANI *et al.* [19] analisaram a combustão pré-misturada de metano com o ar na presença de um campo magnético quase uniforme, de intensidade elevada (5 Tesla), e produzido por bobinas supercondutoras. Analisando a chama com e sem a aplicação do campo magnético foi observado que não houve diferença no formato da chama, ou seja, esse campo magnético quase uniforme não afeta a velocidade de queima. Foram comparados os perfis de temperatura com e sem a aplicação do campo, e foi verificado que o pico de temperatura, que é a temperatura de chama, não foi alterado. A concentração de NO_x foi menor com a aplicação do campo magnético e foram apresentados gráficos que mostraram que a concentração de NO_x cresceu consideravelmente somente na região central da chama, na região de maior temperatura.

BAKER e CALVERT [12] investigaram o comportamento de jatos laminares de chamas difusivas de propano sob a influência de campos magnéticos não uniformes, que diminuem sua intensidade conforme se distanciam da injeção. Os resultados experimentais mostraram que as chamas diminuíram seu tamanho e aumentaram a luminosidade. Foram definidos os mesmos parâmetros adimensionais relatados

por FUJITA *et al.* [17] e concluíram que esses parâmetros determinam como uma chama difusiva é afetada por um campo magnético. Esses grupos adimensionais foram calculados em 3 intensidades de campo magnético distintas e 4 geometrias diferentes. Os resultados experimentais foram relacionados de forma que indicassem uma natureza geral no comportamento das chamas difusivas. Assim, esses resultados foram pós processados, ajustando uma curva que fornece uma correlação empírica que pode ser usada para prever a altura da chama sujeita a um campo magnético.

YAMADA *et al.* [20] estudaram, experimentalmente e numericamente, o efeito do campo magnético em uma chama difusiva de hidrogênio-oxigênio para explorar a possibilidade do controle da combustão por forças magnéticas. Nos experimentos, um queimador coaxial foi colocado entre os imãs e a distribuição do radical OH foi obtida através de técnica espectroscópica, utilizando uma câmera. Foi observado que os radicais OH migraram axissimetricamente em direção ao centro da chama pela influência do campo magnético. As simulações numéricas foram realizadas resolvendo as equações de escoamento reativo de gases e magnetismo. Assumindo axissimetria da chama, foram resolvidas as equações de conservação de massa, quantidade de movimento, energia, espécies químicas e a equação de estado. As forças de corpo, gravitacional e magnética, foram levadas em consideração tanto na equação de quantidade de movimento quanto na equação de energia. Os efeitos de Soret, Dufour, e da difusão de pressão não foram modelados, bem como a dissipação de energia pela viscosidade. Foi considerado um modelo de cinética química detalhado incluindo 9 espécies químicas e 21 reações elementares. Os resultados numéricos apresentaram a mesma tendência da maior concentração de OH próximo ao eixo de axissimetria da chama, contudo a maior diferença relativa entre os resultados experimentais e numérico foi de 70% para a concentração do radical OH. Através de uma análise detalhada foi apresentado que a força magnética não modifica consideravelmente a velocidade de difusão do radical OH. Foi proposto que a força magnética agindo na espécie O_2 , que apresenta massa específica e susceptibilidade magnética muito maiores do que as outras espécies químicas, modifica consideravelmente a velocidade média do ar. Assim, a convecção induzida pelo campo magnético transporta indiretamente e passivamente o radical OH para o eixo central da chama, modificando também o campo de temperatura.

Em um estudo numérico, KINOSHITA *et al.* [21] realizaram simulações computacionais do escoamento de chamas difusivas laminares de hidrogênio em microgravidade e gravidade normal, levando em consideração efeitos do campo magnético. Foi utilizada uma formulação 2D para um escoamento axissimétrico de uma chama difusiva laminar, em que as equações fundamentais que foram discretizadas e resolvidas foram as equações de conservação de massa, de conservação da quantidade de movimento axial e radial, conservação de espécies e equação da energia. Foi utili-

zada a hipótese de química finita, com 16 reações elementares e 8 espécies químicas. Para tratar do acoplamento pressão-velocidade foi utilizado o algoritmo SIMPLER. O campo magnético foi modelado uniforme na direção radial e com gradiente apenas na direção axial, e a força magnética atuando na mistura era função apenas da espécie química O_2 . Segundo os autores, essa hipótese é considerada aceitável pois a susceptibilidade magnética do O_2 é muito maior que a susceptibilidade das outras espécies químicas. Foram comparados três resultados diferentes, o primeiro com campo magnético decrescente e em microgravidade, o segundo também com campo magnético decrescente e gravidade normal e o último com campo magnético crescente na direção axial em gravidade normal. Os resultados mostraram que nas chamas em microgravidade, os produtos de combustão permanecem em torno da chama pois não existe a convecção natural para removê-los, e assim a difusão de O_2 para a região da chama ficou prejudicada fazendo com que a taxa de liberação de calor diminuísse com o passar do tempo. Quando o campo magnético é adicionado, a convecção é induzida, e forças de empuxo magnético aparecem devido à não homogeneidade das susceptibilidades magnéticas. Analisando os vetores velocidade, os autores relataram que a configuração do escoamento reativo gerado na presença do campo magnético em microgravidade é semelhante ao escoamento em gravidade normal sem o campo magnético. Por fim, concluíram que o gradiente positivo do campo magnético produz uma convecção natural em sentido reverso fazendo com que a chama fique espessa e achatada em gravidade normal. Já o gradiente negativo acelera o escoamento reativo junto com a gravidade normal, alongando o formato da chama.

SHINODA *et al.* [22] analisaram, experimentalmente e numericamente, o efeito do campo magnético em uma chama pré-misturada de metano-ar e a distribuição do radical OH durante a combustão. Essa distribuição foi analisada experimentalmente em duas composições de atmosferas distintas: na primeira a atmosfera era de N_2 puro (100% de N_2) e a segunda representava a atmosfera terrestre (80% de N_2 e 20% de O_2). Assim, na atmosfera de nitrogênio puro, foi verificado que o campo magnético tem menor influência na modificação da distribuição de OH. O mesmo resultado qualitativo foi encontrado na simulação numérica. A explicação para esse resultado é que o gás N_2 é diamagnético e pouco influenciado pelo campo magnético, já o oxigênio é paramagnético e muito influenciado devido a grande susceptibilidade magnética. Assim, esse estudo apresenta a mesma conclusão e uma verificação dos resultados numéricos e experimentais realizados por YAMADA *et al.* [20]. Ou seja, a força magnética não induz diretamente e seletivamente a mudança da velocidade de difusão do radical OH. Na realidade, a força magnética agindo no O_2 do ar atmosférico ocasiona a mudança na velocidade de convecção da mistura como um todo e desloca o OH indiretamente e passivamente. Em resumo, o que causa a

maior mudança na distribuição do radical OH é a convecção e não a difusão dessa espécie. Através da análise da combustão na atmosfera de N_2 com a presença do campo magnético, foi apresentado que o oxigênio presente na mistura ar-combustível também é induzido por forças magnéticas.

LEGROS *et al.* [23] pesquisaram o efeito de desestabilização e oscilação de uma chama quando é aplicado um elevado e decrescente gradiente do campo magnético em uma chama difusiva laminar de metano. Em seu artigo LEGROS *et al.* analisou esse efeito modificando fração mássica de O_2 , a velocidade do oxidante e o gradiente do campo magnético, e verificou que a oscilação de chamas caracteriza a mudança do regime laminar para o turbulento, e o controle dessa transição é requerido para eficiência da combustão. Concluíram que quando a chama é exposta a um gradiente negativo do campo magnético e o metano é queimado com um oxidante rico em oxigênio, a chama apresenta uma região de baixo número de Grashoff fazendo com que a chama fique instável e comece a oscilar. Essa instabilidade não é relatada em trabalhos anteriores pois LEGROS *et al.* trabalharam com elevados números de Reynolds e baixos números de Grashoff.

Em relação aos impactos ambientais gerados pelo processo de combustão, JOCHER *et al.* [24] investigaram experimentalmente a relação entre a aplicação de um campo magnético crescente com a formação de fuligem em uma chama laminar difusiva axissimétrica. A instalação experimental consiste em um queimador coaxial inserido em um campo magnético gerado por bobinas, e um equipamento ótico que permite medir em duas dimensões o campo de fração de volume da fuligem presente na chama. Segundo os próprios autores, os resultados obtidos foram ambíguos, nos quais em baixas concentrações de oxigênio o aumento do gradiente produziu maior quantidade de fuligem. Mas, em quantidades superiores a 50% de oxigênio no oxidante ocorre uma menor produção de fuligem na chama. Esses resultados apontam que essa técnica pode ser utilizada mais eficientemente em escoamentos reativos onde a corrente de oxidante é composta de oxigênio puro (100%). Esse estudo indica uma estratégia possível que possibilitaria o controle magnético da produção de fuligem em uma chama difusiva.

2.2 Chamas Difusivas Laminares

As chamas difusivas são encontradas na maioria dos sistemas de combustão e queimadores, e por isso seu estudo ocupa posição de destaque em aplicações industriais[3]. Em chamas difusivas o oxidante e o combustível encontram-se inicialmente separados, misturando-se da região onde ocorre a combustão, formando uma superfície de chama[25]. O fenômeno de combustão nas chamas difusivas é predominantemente controlado pela difusão e outros fenômenos de mistura[26]. Já

nas chamas pré-misturadas, a combustão é controlada principalmente pela cinética química pois oxidante e combustível se encontram previamente misturados antes da ignição[27].

A chama difusiva é formada quando combustível e oxidante se encontram em proporções adequadas para queima na zona de reação, através dos fenômenos de difusão e mistura. O combustível pode estar na forma condensada ou gasosa, e o oxidante pode ser um gás escoando ou a própria atmosfera. Nesse tipo de chama, a taxa de difusão das espécies não queimadas em direção a zona de reação é responsável por manter a combustão, por isso, o nome chama difusiva. Além disso, o número de Damkohler (Da) pode ser usado para caracterizar escoamentos reativos. Esse é representado como a razão entre o tempo característico de mistura no sistema (τ_m) e o tempo característico para a reação química (τ_r).

$$Da = \frac{\tau_m}{\tau_r} \quad (2.1)$$

A avaliação desse parâmetro é uma maneira de estimar a validade da hipótese de química infinita para o sistema. Esse número é um importante parâmetro adimensional que quantifica se um processo é controlado pela cinética química ou pela difusão. Tipicamente, em chamas difusivas laminares a reação química ocorre instantaneamente na superfície de chama, e a velocidade da reação é muito maior do que a movimentação e a mistura do fluido. Para esse caso, a velocidade da reação química é duas ordens de grandeza maior do que a velocidade de difusão[4]. Por isso, o tempo de mistura é maior que o tempo de reação, o número de Damkohler (Da) é maior que a unidade e a chama é controlada pela difusão e mistura.

O fenômeno da combustão de gases compreende reações químicas e também processos físicos como a difusão e mistura. Esses processos físicos podem ser alterados por forças magnéticas originárias de um gradiente de um campo magnético, e assim influenciar várias características das chamas difusivas laminares. Nesse tipo de chama, os fatores dominantes que influenciam a combustão são os processos físicos de difusão e mistura[4]. Em chamas difusivas, o empuxo induzido pela convecção do ar afeta os processos de transporte de energia e de massa, sendo esse empuxo o principal fator para a manutenção da combustão. Assim, estimulando a convecção com a aplicação de um campo magnético é esperada a otimização da combustão.[12]

Na literatura existem muitos artigos referentes a solução numérica de escoamentos reativos. Nesses estudos as chamas difusivas laminares foram modeladas sem a presença do campo magnético. Abaixo encontram-se os estudos utilizados para fundamentar essa dissertação em respeito a modelagem computacional da combustão de chamas difusivas.

A primeira análise de um problema de chama difusiva laminar foi realizada por BURKE e SCHUMANN [25] em 1928. O modelo clássico de BURKE e SCHUMANN [25] consiste no escoamento em dois dutos concêntricos, um interno, onde escoia combustível, e outro externo, onde escoia oxidante. Após a injeção e encontro dessas substâncias dentro do queimador, ocorre a reação química, formando uma chama difusiva. A abordagem numérica por eles realizada utilizou uma equação de conservação unidimensional obtida por uma série de simplificações. Essa equação, chamada de equação de difusão, apresenta solução analítica que permite determinar o formato da chama difusiva. Os resultados numéricos mostraram que a chama difusiva pode apresentar estruturas bem distintas dependendo da fração mássica de oxigênio injetada. Assim, esses formatos distintos foram definidos como chama subventilada, quando existe pouco oxigênio, e chama sobreventilada, quando o oxigênio em excesso foi utilizado na condição de contorno da injeção. A figura 2.2 ilustra o modelo físico de Burke-Schumann para os casos de chama sobre e subventilada.

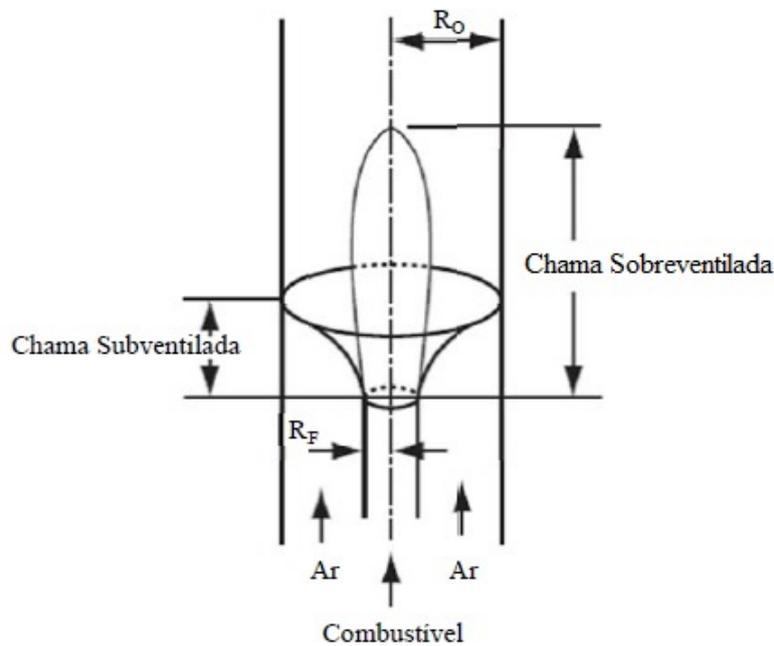


Figura 2.2: Representação do modelo de Burke-Schumann. Adaptado de SAUER [3].

A chama difusiva subventilada tem o formato aberto com a superfície da chama tocando a parede do queimador, fazendo com que todo oxigênio injetado seja consumido. A chama sobreventilada, na qual existe excesso de oxigênio, apresenta maior altura, formato alongado, sua superfície é contínua, e existe oxigênio presente nos gases de exaustão. Em seus resultados experimentais, os pesquisadores utilizaram diferentes condições de injeção para comparar chamas difusivas sobre e

subventiladas. BURKE e SCHUMANN [25] observaram que chamas subventiladas são menores e apresentam maior largura, se aproximando da parede do queimador. As chamas sobreventiladas apresentam maior altura e menor largura de chama, com sua superfície mais distante da parede do queimador. De maneira geral, os autores verificaram boa concordância entre a teoria e o experimento.

Na década de 80, MITCHELL *et al.* [5] obtiveram resultados experimentais da combustão de chamas difusivas laminares utilizando metano e os compararam à solução numérica de um escoamento reativo representativo do mesmo. O experimento era composto pela injeção de combustível e oxidante em tubos concêntricos, forçados de modo co-corrente, que ao se misturarem ocorria a combustão. O perfil de velocidade de ambas as correntes foi mantido uniforme com a colocação de telas distribuídas no interior dos tubos que conduziam ao queimador. As vazões de metano e ar foram controladas por orifícios críticos, e eram $5,7 \text{ cm}^3/\text{s}$ e $18,7 \text{ cm}^3/\text{s}$, respectivamente. Com a mistura e posterior ignição, uma chama difusiva de metano de altura e formato definidos foi produzida no sistema. As medições de temperatura foram realizadas utilizando termopares e os perfis de temperatura e concentração de espécies químicas foram medidos em três diferentes alturas. As velocidades foram determinadas por meio de anemometria por laser Doppler. Este trabalho se tornou uma das principais referências na análise da combustão de chamas difusivas laminares de metano.

Em relação ao modelo numérico utilizado por MITCHELL *et al.* [5] foi considerado o conceito de chama fina de BURKE e SCHUMANN [25] para o cálculo da chama bidimensional, axissimétrica e laminar. As variações das propriedades termofísicas bem como os efeitos convectivos e difusivos nas duas direções coordenadas foram incluídos. A técnica numérica de diferenças finitas foi utilizada para resolver as equações de conservação, que passaram por uma transformação pela formulação de função corrente e vorticidade. Quando comparados aos resultados experimentais, os resultados numéricos se mostraram com boa concordância, confirmando a possibilidade de utilização do modelo numérico para estimativas prévias do escoamento, da razão de equivalência, vazão dos reagentes, preaquecimento dos reagentes, e do diâmetro dos combustores em chamas difusivas laminares.

A partir dos anos 90, a solução numérica utilizando a abordagem de transformar as variáveis primitivas em função corrente e vorticidade caíram em desuso. Essa formulação, além de acarretar condições de contorno de mais difícil implementação, também não permite a solução de problemas tridimensionais. Assim, XU e SMOOKE [28] apresentaram uma formulação onde as equações de conservação foram resolvidas para as variáveis primitivas. As propriedades termofísicas variavam com a temperatura, e as reações químicas foram modeladas utilizando a teoria de

chama fina. Foram comparados dois métodos para solução numérica das equações de conservação, utilizando diretamente as variáveis primitivas e transformando-as em funções de corrente e vorticidade. Os resultados obtidos pelos autores utilizando a abordagem de variáveis primitivas se aproximaram mais do resultado experimental de MITCHELL *et al.* [5], do que o resultado numérico utilizando a formulação de vorticidade e função corrente. Em um outro estudo, XU *et al.* [29] utilizaram o mesmo algoritmo para resolver o escoamento, mas não utilizaram o modelo de chama fina. Eles modelaram um mecanismo de reação envolvendo 45 reações elementares e 15 espécies químicas. Os resultados apresentaram boa aproximação em relação aos dados experimentais[5], e confirmaram que a formulação por variáveis primitivas apresenta maior precisão e robustez do que a abordagem por vorticidade e função corrente, devido a dificuldade de implementação das condições de contorno no segundo caso.

Para solução numérica do mesmo escoamento reativo abordado por MITCHELL *et al.* [5], os pesquisadores TARHAN e SELÇUK [30] utilizaram o método de linhas, a abordagem de química infinita(modelo de chama fina), e os resultados foram comparados com os obtidos por XU e SMOOKE [28]. Esses resultados apresentaram boa concordância tanto com os resultados experimentais de MITCHELL *et al.*(1980) quanto com os resultados numéricos obtidos por XU e SMOOKE [28]. Posteriormente, os mesmos autores, em outro estudo[31], aprimoraram seu modelo de cinética química e utilizaram a abordagem de química finita, contendo reações elementares e coeficientes de transportes e propriedades termodinâmicas detalhadas. Devido a abordagem mais aperfeiçoada do mecanismo de reação, os resultados[31] apresentaram maior proximidade dos resultados experimentais de MITCHELL *et al.*(1980) quando comparados ao estudo utilizando o modelo de chama fina[30].

MANDAL *et al.* [32] utilizaram uma modelagem numérica para a simulação de uma chama laminar difusiva em gravidade normal com o objetivo de solucionar as distribuições de temperatura, velocidade e espécies. Na programação do método foram utilizados um esquema de diferenças finitas explícito para simulação do escoamento reativo, um modelo de química finita para modelar a reação, e a variação das propriedades termodinâmicas e de transporte. Quando comparados aos resultados de MITCHELL *et al.* [5] os campos de temperatura, espécies e velocidade apresentaram boa similaridade. A recirculação do ar ambiente foi observada, com o ar entrando no domínio pela parte superior e adjacente a parede do queimador. A velocidade na direção radial é sempre negativa, ou seja, no sentido da parede para a zona de reação, fomentando a combustão. As mais altas temperaturas e concentração de CO_2 estão confinadas em uma distância radial pequena, próximo a superfície da chama.

Alguns estudos também avaliaram a ação da gravidade em chamas difusivas

sem a presença de campo magnético. ZHANG *et al.* [33] realizaram experimentos da combustão de metano em microgravidade. Foram analisadas as características de uma chama difusiva laminar, com o escoamento de metano no duto interno e ar no duto externo. O formato da chama foi avaliado variando a razão entre as velocidades de entrada do ar e combustível e a gravidade. Foram utilizados a maior largura da chama, e a razão entre o comprimento e a largura máxima da chama para avaliar o formato da mesma. Os resultados experimentais obtidos mostraram que as características de uma chama difusiva laminar em microgravidade foram afetadas significativamente com a alteração da velocidade de entrada do ar no queimador, devido a ausência do empuxo gravitacional. Por outro lado, em gravidade normal a variação da velocidade de entrada do ar não afeta de forma efetiva o formato da chama.

Um estudo mais completo investigou numericamente e experimentalmente a influência da diluição do combustível, da gravidade e do formato e estrutura de uma chama difusiva de metano. Esse estudo testou a chama em gravidade e microgravidade, variando de 0,4 a 1,0 a fração molar de injeção de CH_4 , e variando a velocidade de 23 a 90 cm/s . As equações governantes e condições de contorno foram discretizadas em um domínio bidimensional por diferenças finitas. Experimentalmente, o formato da chama e a temperatura foram determinadas pelas imagens emitidas utilizando uma câmera digital. Os resultados numéricos apresentaram boa concordância com os resultados experimentais. Como apresentado também em outros trabalhos, as alturas das chamas foram proporcionais à vazão mássica de combustível, tanto para chamas em gravidade normal e microgravidade. CAO *et al.* [34] demonstraram que o empuxo induzido reduz a largura da chama devido a convecção que ocorre de fora para dentro da zona de reação.

Mais recentemente, a partir do início desse século, os programas comerciais de Fluidodinâmica Computacional (CFD) evoluíram consideravelmente. Os softwares comerciais de CFD são bem robustos, apresentam validações para diferentes casos em combustão, e muitos modelos de cinética química implementados. Assim, GUESSAB *et al.* [35] utilizaram o software FLUENT para resolver as equações governantes da combustão de uma chama difusiva laminar de metano, com o objetivo de comparar os resultados numéricos com os a solução numérica de XU *et al.* [29]. Como apresentado anteriormente, o trabalho de XU *et al.* [29] utilizou um modelo de cinética química bem detalhado, com 45 reações elementares, e foi validado com o trabalho experimental de MITCHELL *et al.* [5]. Portanto, GUESSAB *et al.* [35] modelaram no FLUENT um queimador com as mesmas dimensões e condições de contorno do experimento de MITCHELL *et al.* [5]. Foram testados dois modelos de cinética química, o primeiro com uma reação global de passo único e o segundo com 4 reações elementares, onde em ambos foi modelada a cinética utilizando química

finita. Os campos de temperatura, velocidade e espécies de ambos os modelos apresentaram boa concordância com a solução numérica de XU *et al.* [29], mostrando que o FLUENT pode ser usado como uma ferramenta para análise da combustão.

Parte II

Formulação Física e Matemática do Problema Proposto

Capítulo 3

Modelo Físico

3.1 Parâmetros de Caracterização de Chamas Difusivas

Antes da definição de parâmetros que correlacionam os efeitos do campo magnético em chamas difusivas, é necessário apresentar alguns parâmetros apresentados por FUJITA *et al.* [17], BAKER e CALVERT [12] que caracterizam as chamas difusivas sem a presença de forças magnéticas.

3.1.1 Altura da Chama

A altura da chama (L_f) pode ser definida como a posição axial na qual se localiza a maior temperatura ao longo do eixo de simetria, em virtude de ser possível obter essa medida experimentalmente. Ou, consistente com a definição, a altura da chama pode ser definida como a distância na direção axial entre o bico injetor e a região onde o combustível é consumido em proporções estequiométricas.

3.1.2 Largura da Chama

A largura da chama (W_f) é a distância radial entre dois pontos da chama onde o combustível é consumido em proporções estequiométricas. Para uma chama axisimétrica esses pontos estão em posições diametralmente opostas, por isso em alguns trabalhos a largura também é chamada de diâmetro da chama. Esse parâmetro é profundamente afetado pelo empuxo gerado pelo campo gravitacional e magnético. Nessa dissertação, esse parâmetro será importante para análise da otimização da combustão.

SUNDERLAND *et al.* [18] mostraram que a presença do empuxo nas chamas difusivas contribuem para diminuição da largura da mesma, enquanto em chamas sem empuxo a largura da chama aumenta. Essa diferença na largura das chamas é

diminuída quanto maior for o número de Reynolds, e para Re elevados não existe alteração significativa na largura da chama. Assim para números de Reynolds muito baixos, como nesse trabalho, a largura da chama é muito afetada pela convecção radial[18]. O escoamento em chamas controladas pelo empuxo ocorre de fora para dentro trazendo o contorno da superfície de chama em direção a linha de centro. Enquanto em chamas sem empuxo o escoamento ocorre de dentro para fora, apresentando efeito oposto.

3.1.3 Número de Reynolds

O número de Reynolds é a razão entre as forças de inércia e as forças viscosas e é utilizado para caracterizar se o escoamento reativo se encontra no regime laminar ou turbulento.

$$Re = \frac{\nu_F I Y_{F,esteq} L_f}{\nu} \quad (3.1)$$

onde ν_F é a velocidade de injeção do combustível, I é a razão de quantidade de movimento no instante inicial e no escoamento uniforme, $Y_{F,esteq}$ é a fração mássica de combustível em condições estequiométricas, L_f é a altura da chama e ν a viscosidade cinemática.

3.1.4 Número de Froude

Para análise de chamas difusivas, devem ser levadas em consideração as forças de empuxo geradas pelos campo magnético e gravitacional, e as forças relacionadas com o movimento dos gases na saída do queimador. A razão entre as forças relacionadas com a quantidade de movimento dos gases na saída do queimador e o empuxo gravitacional é denominada número de Froude. As chamas difusivas na presença apenas do campo gravitacional podem ser controladas pelo empuxo gravitacional ($Fr \ll 1$), controladas pela quantidade de movimento ($Fr \gg 1$), ou em regime de transição ($Fr \approx 1$)[14][4]. O número de Froude pode ser definido como [4]

$$Fr = \frac{(\nu_F I Y_{F,esteq})^2}{\alpha L_f} \quad (3.2)$$

onde é assumida uma aceleração média gerada pelo empuxo gravitacional(α), definida de acordo com ROPER [36]como

$$\alpha \cong 0,6g \left(\frac{T_f}{T_{OX}} - 1 \right) \quad (3.3)$$

e T_f e T_{OX} são a temperatura de chama e a temperatura do oxidante, respectivamente.

3.2 Parâmetros de Caracterização dos Efeitos do Campo Magnético em Chamas Difusivas

Para caracterizar com mais precisão os efeitos do campo magnético em chamas difusivas, alguns pesquisadores como FUJITA *et al.* [17], BAKER e CALVERT [12], utilizaram em suas pesquisas parâmetros como número de Grashof magnético, número de Froude magnético e a razão entre o empuxo induzido pela gravidade e o empuxo induzido pelo campo magnético. Esses números adimensionais que caracterizam o escoamento na presença de um campo magnético são descritos abaixo:

3.2.1 Número de Grashof Magnético

O número de Grashof magnético para uma chama difusiva foi apresentado por FUJITA *et al.* [17] com o objetivo de identificar o regime no qual o escoamento é afetado pelo campo magnético. O número de Grashof magnético foi definido como a razão entre as forças de empuxo magnético e as forças viscosas,

$$Gr_m = \left[\frac{(\chi_f - \chi_{OX})B \frac{dB}{dx} L_f^3}{\mu_o \rho \nu^2} \right] \cong - \left[\frac{\chi_{OX} B \frac{dB}{dx} L_f^3}{\mu_o \rho \nu^2} \right] \quad (3.4)$$

onde χ_f e χ_{OX} são as susceptibilidades magnética da chama e do oxidante, B e $\frac{dB}{dx}$ são a densidade de fluxo magnético e seu gradiente, L_f é a altura da chama, μ_o é a permeabilidade do vácuo, ρ é a massa específica de injeção do combustível e ν é a viscosidade cinemática de injeção do combustível.

A susceptibilidade magnética é uma característica intrínseca de cada material e sua identidade está relacionada com a estrutura atômica e molecular

Na equação acima, a aproximação da susceptibilidade magnética é realizada pois a susceptibilidade do oxigênio é duas ordens de grandeza maior do que a da chama e dos produtos da combustão [12][16]. O número Grashof magnético é análogo ao número de Grashof, assim tanto a força magnética quanto a força gravitacional produzem empuxo nos gases de combustão e no ar em torno da chama, sendo chamados de empuxo gravitacional e empuxo magnético[17]. FUJITA *et al.* concluíram que o empuxo induzido no escoamento como resultado da aceleração da gravidade, também pode ser induzido pelas forças magnéticas, desde que o número de Grashof magnético seja da ordem de $10^2 - 10^3$.

3.2.2 Número de Froude Magnético

Com a finalidade de comparar as ordens de magnitude das forças geradas pelo empuxo magnético e pelas forças de inércia atuando no fluido, o número de Froude

magnético foi definido como,

$$Fr_m = \frac{\rho\mu_o(\nu_F I Y_{F,esteq})^2}{(\chi_f - \chi_{OX})B \frac{dB}{dx} L_f} \quad (3.5)$$

onde μ_o é a permeabilidade do vácuo, ρ é a massa específica de injeção do combustível, ν_F é a velocidade de injeção do combustível, I é a razão de quantidade de movimento no instante inicial e no escoamento uniforme, $Y_{F,esteq}$ é a fração mássica de combustível em condições estequiométricas, χ_f e χ_{OX} são as susceptibilidades magnética da chama e do oxidante, B e $\frac{dB}{dx}$ são a densidade de fluxo magnético e seu gradiente e L_f é a altura da chama.

Desprezando a susceptibilidade magnética da chama (χ_f) [12], pois o oxigênio é a espécie química paramagnética dominante na vizinhança da chama, a equação (3.5) pode ser reescrita como

$$Fr_m = -\frac{\rho\mu_o(\nu_F I Y_{F,esteq})^2}{\chi_{OX} B \frac{dB}{dx} L_f} \quad (3.6)$$

Utilizando a definição do número de Reynolds da equação (3.1), pode-se então escrever o número de Froude magnético como razão entre o quadrado do número de Reynolds e o Grashof magnético

$$Fr_m = \frac{Re^2}{Gr_m} \quad (3.7)$$

Em relação a transferência de calor, quando $Gr/Re^2 \ll 1$ a convecção natural é irrelevante em relação a convecção forçada. A convecção natural se torna relevante para $Gr/Re^2 \gg 1$, e para $Gr/Re^2 \approx 1$ os dois mecanismos de transferência de calor devem ser considerados[37]. Em seu estudo, FUJITA concluiu que essa análise poderia ser utilizada em chamas difusivas na presença de campos magnéticos em ambiente de microgravidade. Nesse caso, os mecanismos de transferência de calor são a convecção forçada e a convecção induzida pelo campo magnético, ou seja, baixos números de Froude magnético indicam que o mecanismo de transferência de calor predominante é a convecção. Assim, para $Fr_m < 0,1$ o comportamento da chama é dominado pela interação com o campo magnético[17].

3.2.3 Razão entre as Forças de Empuxo e Magnéticas (N_{gm})

Outro parâmetro de importância é a razão entre as forças associadas à gravidade e as forças associadas à aplicação do campo magnético não uniforme[17][12]. Este pode ser analisado pela razão entre o número de Froude magnético (Fr_m) e o número de Froude (Fr).

$$N_{gm} = \frac{Fr_m}{Fr} = -\frac{\rho\mu_o\alpha}{\chi_{OX}B\frac{dB}{dx}} \quad (3.8)$$

Assim, esse parâmetro adimensional só é relevante em estudos em gravidade normal, já que em microgravidade as forças de empuxo gravitacional são desprezadas, e o N_{gm} tende à zero. De certa forma, esse parâmetro pode avaliar o quanto o escoamento reativo é influenciado pelo empuxo magnético em relação ao empuxo gravitacional.

Um resumo do significado de alguns parâmetros estabelecidos nessa seção são apresentados na tabela 3.1.

Tabela 3.1: Caracterização das condições do escoamento reativo sob ação de um campo magnético. Adaptado de SWAMINATHAN [6].

<i>Parâmetro</i>	<i>Variação</i>	<i>Significado</i>
Reynolds	$Re \leq 2500$	Escoamento laminar
Froude	$Fr \ll 1$	Escoamento controlado pelo empuxo
Froude magnético	$Fr_m < 0, 1$	Escoamento influenciado pelo campo magnético
Grashof magnético	$10^2 - 10^3$	Escoamento influenciado pelo campo magnético
$N_{gm} = Fr_m/Fr$	Não especificado	Razão entre as forças de corpo

3.2.4 Número de Reynolds Magnético (Re_m)

O número de Reynolds magnético (Re_m) não indica a razão entre forças como o número de Reynolds (Re). Na realidade, o número de Reynolds magnético indica a intensidade relativa entre advecção e difusão na equação de transporte do campo magnético, e pode ser visualizado abaixo,

$$Re_m = \mu_m\sigma Ul \quad (3.9)$$

onde μ_m é a permeabilidade magnética do material, σ é a condutividade elétrica, U é a velocidade característica do escoamento e l o comprimento característico.

Quanto maior o Reynolds magnético mais intensa é a advecção do campo magnético em relação à difusão, em contrapartida a difusão do campo magnético é predominante em problemas onde o Reynolds magnético é pequeno, menor que a unidade ($Re_m \ll 1$). Para entender melhor a relação entre difusão e advecção do campo magnético, a equação de transporte do campo magnético pode ser analisada,

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = \nabla \times (\mathbf{v} \times \mathbf{B}) + \frac{1}{\mu_m\sigma} \nabla^2 \mathbf{B} \quad (3.10)$$

na qual o lado direito da equação apresenta dois termos, o primeiro é o termo advectivo e o segundo é o termo difusivo da equação de transporte. No primeiro termo o campo magnético é advectado pela velocidade do escoamento, enquanto no segundo termo a difusividade magnética ($\frac{1}{\mu_m \sigma}$) é responsável pela difusão do campo.

Em alguns casos, como no escoamento de metais líquidos, plasma e fluidos ionizados a advecção é relevante, fazendo com que o campo magnético fique acoplado com as equações do escoamento do fluido. Contudo, na maioria das aplicações industriais o número de Reynolds magnético é menor que a unidade e o termo advectivo pode ser desprezado. Nesse caso, o campo magnético afeta o campo de velocidade consideravelmente através da força de Lorentz, mas o campo de velocidade não afeta o campo magnético. Ou seja, o campo magnético permanente tende a convergir a um estado puramente difusivo dependendo apenas das condições de contorno do campo, sendo irrelevante a velocidade do escoamento para determinação do campo magnético.

3.3 Modelo Físico

O sistema físico a ser analisado neste trabalho consiste em um escoamento reativo formado a partir do encontro de duas correntes forçadas (combustível e oxidante), e conseqüente reação química, em um duto cilíndrico na presença de um campo magnético. A configuração utilizada para o modelo é equivalente à utilizada por MITCHELL *et al.* [5] e SAUER [3], com a implementação do campo magnético que não foi objeto de estudo destes autores. A figura 3.1 representa essa configuração. O escoamento reativo é representado matematicamente pela equação de conservação de massa, equação de conservação de espécies, equação de conservação da quantidade de movimento e equação de conservação da energia. A força magnética foi modelada como uma força de corpo na equação de conservação da quantidade de movimento, como realizado por outros autores [21][22][20]. Para obtenção dos resultados numéricos, as equações de conservação foram discretizadas através do Método dos Volumes Finitos e implementadas em um programa desenvolvido em código FORTRAN por SAUER [3]. Assim, o sistema de equações algébricas gerado pela discretização foi resolvido pelo método iterativo *SOR* (Método de Sobre-Relaxação Sucessiva), juntamente com o esquema numérico *SIMPLEC* para tratar do acoplamento pressão-velocidade. Para o cálculo das velocidades na interface do volume de controle foi utilizado o método de interpolação *WUDS* (Weighted Upstream Differencing Scheme).

O problema de otimização tem como objetivo encontrar o ponto de máxima eficiência da combustão na presença de um campo magnético, através do estímulo de diferentes campos atuando no escoamento reativo. Como apresentado e

fundamentado na revisão da literatura, a aplicação de um campo magnético não-homogêneo de intensidade decrescente gera uma força magnética que atrai o oxigênio na direção da injeção e aumenta o empuxo gerado no escoamento reativo, acelerando os gases em direção à saída do queimador. Para que haja conservação de massa, o aumento da velocidade dos gases de exaustão faz com que a velocidade radial do ar em direção a zona de reação também aumente. Assim, esse mecanismo contribui para fomentar a combustão carreando o gás oxigênio para a zona de reação, e induzindo a convecção necessária para manutenção e estímulo da chama. Através desse mecanismo, o oxidante é atraído em direção ao eixo axial de simetria, e a chama tende diminuir de largura, e assim é notória a relação entre a redução da largura da chama e da eficiência da combustão. Portanto, a função objetivo do problema de otimização é a minimização da largura da chama (W_f). Ao final desta dissertação, pretende-se concluir qual a densidade de fluxo magnético (B) e gradiente (∇B) capazes de minimizar a função objetivo, e assim maximizar a eficiência da combustão.

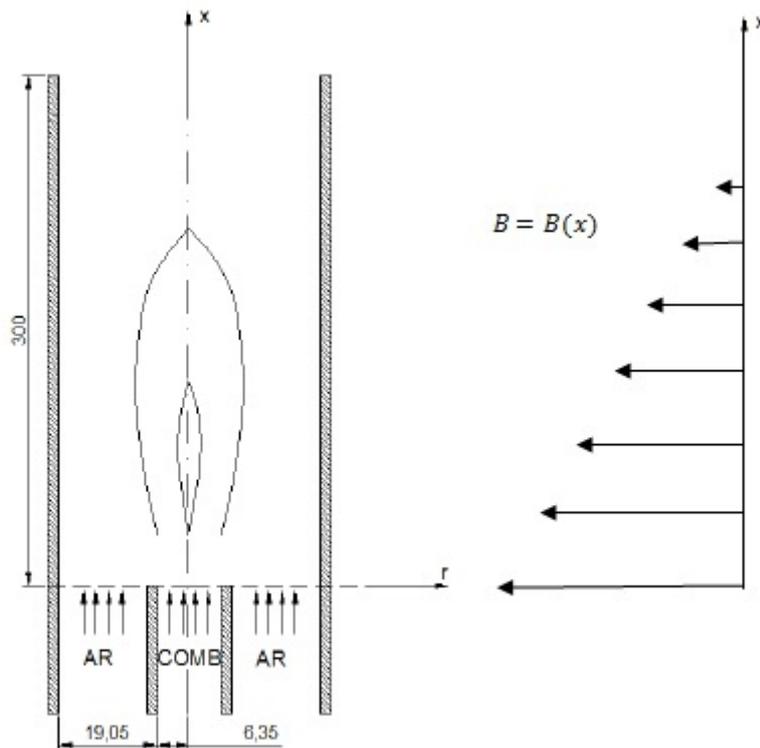


Figura 3.1: Esquema do Modelo Físico. A intensidade da densidade de fluxo magnético é uma função apenas da coordenada x . Adaptado de SAUER [3]

O campo magnético modelado é uniforme na direção radial, varia somente na

direção axial, e foi modelado como uma função linear em x . Definindo o campo magnético em $x = 0$ (B_o) e o gradiente do campo($\frac{dB}{dx}$), pode-se escrever,

$$B = \frac{dB}{dx}x + B_o \quad (3.11)$$

Capítulo 4

Modelo Matemático

4.1 Equações de Conservação para Sistemas Multicomponentes sob Ação de Forças Magnéticas

Nessa seção são apresentadas as equações a serem resolvidas numericamente. As equações de conservação de massa, quantidade de movimento, energia e espécies para sistemas multicomponentes, dadas em BIRD *et al.* [38] e WILLIAMS[39], são descritas, respectivamente por,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0 \quad (4.1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \mathbf{v}) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \mathbf{v}) = -\nabla P - \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \rho \sum_{k=1}^N Y_k \mathbf{f}_k \quad (4.2)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho e) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} e) = -\nabla \cdot \mathbf{q} - \boldsymbol{\tau} : \nabla \mathbf{v} + \rho \sum_{k=1}^N Y_k \mathbf{f}_k \mathbf{V}_k \quad (4.3)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_k) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} Y_k) = -\nabla \cdot (\rho Y_k \mathbf{V}_k) + \dot{\omega}_k \quad (4.4)$$

na forma tensorial, e uma equação de estado,

$$\rho = \frac{P \bar{W}}{RT} \quad (4.5)$$

A força magnética por unidade de volume de gás localizado em um gradiente de campo magnético com intensidade local B , é representada pela seguinte equação, que é referenciada em outros trabalhos [17][40][20][23]

$$F_{mag} = \frac{1}{2\mu_o} \rho Y_k \chi_k \nabla B^2 \quad (4.6)$$

onde μ_o é a permeabilidade magnética do vácuo, ρ é a massa específica, B é a densidade de fluxo magnético, e Y_k e χ_k são a fração mássica e a susceptibilidade magnética da espécie k .

Nas equações de quantidade de movimento e energia, \mathbf{f} são as forças de corpo que atuam sobre o escoamento, que neste presente estudo são as forças induzidas pelo campo gravitacional e magnético em cada espécie química. Assim pode-se escrever o vetor força de corpo como [20],

$$\mathbf{f}_k = \mathbf{g} + \frac{1}{2} \frac{\chi_k}{\mu_o} \nabla B^2 \quad (4.7)$$

A força magnética pode ser escrita em coordenadas cilíndricas, considerando o sistema bidimensional axissimétrico e o campo magnético com variação somente na direção axial, como,

$$F_{mag} = \rho Y_k \frac{\chi_k}{\mu_o} B \frac{dB}{dx} \quad (4.8)$$

Em relação a susceptibilidade magnética (χ), quando o gás tem propriedades paramagnéticas ($\chi > 0$), a força magnética aponta no sentido de crescimento do campo magnético, enquanto para gases diamagnéticos ($\chi < 0$), a força aponta no sentido oposto. Entre os gases presentes na combustão o O_2 tem a maior susceptibilidade magnética, e as outras espécies químicas presentes na combustão são diamagnéticas e possuem a susceptibilidade magnética duas ordens de grandeza menor do que a do oxigênio [16][17]. Por esse motivo, muitos autores modelam a força magnética atuando apenas na espécie O_2 , e essa modelagem é suficiente para explicar o efeito do campo magnético no escoamento [21][22][12][23].

$$F_{mag} = \rho Y_{OX} \frac{\chi_{OX}}{\mu_o} B \frac{dB}{dx} \quad (4.9)$$

Portanto, as equações de conservação de massa e quantidade de movimento também podem ser escritas em coordenadas cilíndricas, considerando o sistema bidimensional axissimétrico, como,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial x}(\rho r u) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(\rho r v) = 0 \quad (4.10)$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t}(\rho u) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial x}(\rho r u u) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(\rho r v u) = -\frac{\partial P}{\partial x} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial x} \left(r \mu \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \mu \frac{\partial u}{\partial r} \right) + \\
+ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \mu \frac{\partial v}{\partial x} \right) + \frac{1}{3} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial x} \left(r \mu \frac{\partial u}{\partial x} \right) - \frac{2}{3} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial x} \left[\mu \frac{\partial}{\partial r} (r v) \right] + \rho g + \rho Y_{OX} \frac{\chi_{OX}}{\mu_o} B \frac{dB}{dx}
\end{aligned} \tag{4.11}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t}(\rho v) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial x}(\rho r u v) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(\rho r v v) = -\frac{\partial P}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial x} \left(r \mu \frac{\partial v}{\partial x} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \mu \frac{\partial v}{\partial r} \right) + \\
+ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \mu \frac{\partial v}{\partial r} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial x} \left(r \mu \frac{\partial u}{\partial r} \right) - \frac{2}{3} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[\mu \frac{\partial}{\partial r} (r v) \right] - \frac{2}{3} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[r \mu \frac{\partial u}{\partial x} \right] + \\
- \frac{2 \mu v}{r^2} + \frac{2}{3} \frac{\mu}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r v) + \frac{2}{3} \frac{\mu}{r} \frac{\partial u}{\partial x}
\end{aligned} \tag{4.12}$$

As equações de conservação de energia e espécies são analisadas na próxima seção.

4.2 Formulação de Shvab-Zeldovich

SHVAB (1948) e ZELDOVICH (1949) desenvolveram uma técnica que vem sendo muito utilizada para expressar as equações de conservação de energia e espécies químicas em uma forma equivalente. Essa formulação permite remover os termos-fonte associados à reação química das equações de conservação considerando-se uma combinação linear das variáveis dependentes. Esse procedimento geral é denominado formulação de Shvab-Zeldovich [27]. Nessa abordagem considera-se que alguns efeitos presentes nas equações de conservação de energia e espécies não são relevantes na modelagem de certos sistemas reativos, portanto podendo ser omitidos em muitas aplicações. Esses efeitos são:

- (a) Forças de corpo;
- (b) Efeito Soret e Dufour;
- (c) Difusão do gradiente de pressão;
- (d) Fluxo de Calor devido à radiação.

O Efeito Dufour é a condução de calor provocada pelo gradiente de concentração e o Efeito Soret é a difusão de massa devido a gradientes térmicos. Esses efeitos são simultâneos e recíprocos, ocorrem como efeito de processos irreversíveis em sistemas que apresentam misturas, e em muitos casos podem ser desprezados.

Em seu livro, WILLIAMS [39] apresenta o vetor fluxo de calor (\mathbf{q}), dado por

$$\mathbf{q} = -\lambda \nabla T + \rho \sum_{k=1}^N h_k Y_k \mathbf{V}_k + RT \sum_{k=1}^N \sum_{l=1}^N \left(\frac{X_l \alpha_k}{W_k \mathbf{D}} \right) (\mathbf{V}_k - \mathbf{V}_l) + \mathbf{q}_{rad} \quad (4.13)$$

onde no primeiro termo λ é a condutividade térmica e T é a temperatura. No segundo termo, ρ é a massa específica, e h_k , Y_k e \mathbf{V}_k são a entalpia específica, a fração mássica, e o vetor velocidade de difusão mássica da espécie k , respectivamente. Além de alguns símbolos já citados anteriormente como a temperatura (T), o terceiro termo é composto pela constante universal dos gases R , fração molar X , coeficiente de difusão térmica α , massa molecular W e coeficiente de difusão mássica \mathbf{D} . Finalmente, o último termo é o vetor fluxo de calor transferido via radiação \mathbf{q}_{rad} .

Assim, omitindo os efeitos listados no início desta seção na equação do fluxo de calor (4.13) e na equação de energia, e substituindo a equação do fluxo de calor na equação de conservação da energia, pode-se reescrever a equação de energia (4.3) como

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho h) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} h) = -\nabla \cdot \left(\lambda \nabla T + \rho \sum_{k=1}^N h_k Y_k \mathbf{V}_k \right) \quad (4.14)$$

A velocidade de difusão mássica pode ser escrita considerando a Lei de Fick,[39]

$$\mathbf{V}_k = -\mathbf{D} \nabla \ln Y_k \quad (4.15)$$

A entalpia pode ser descrita por

$$h_k = h_{f_k}^0 + \int_{T_0}^T c_{p_k} dT \quad (4.16)$$

e a conservação de espécies por

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_k) + \nabla \cdot [\rho Y_k (\mathbf{v} + \mathbf{V}_k)] = \dot{\omega}_k \quad (4.17)$$

Utilizando a definição de entalpia e velocidade de difusão mássica, a equação de energia pode ser reescrita na forma,

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left(\rho \int_{T_0}^T c_p dT \right) + \nabla \cdot \left(\rho \mathbf{v} \int_{T_0}^T c_p dT \right) = \\ = \nabla \cdot \left[\rho \mathbf{D} \sum_{k=1}^N (\nabla Y_k) \int_{T_0}^T c_{p_k} dT + \rho \mathbf{D} \frac{\lambda}{\rho c_p \mathbf{D}} c_p \nabla T \right] - \sum_{k=1}^N h_{f_k}^0 \dot{\omega}_k \end{aligned} \quad (4.18)$$

Na equação (4.18) o termo

$$\frac{\lambda}{\rho c_p \mathbf{D}} = Le \quad (4.19)$$

é denominado número de Lewis, que é definido como a razão entre a taxa de transporte de energia e a taxa de transporte de massa. Uma hipótese necessária na formulação de Shvab-Zeldovich é o número de Lewis unitário, ou seja, admite-se que a difusão de quantidade de movimento seja da mesma ordem de grandeza da difusão de espécies. Assim, $Le=1$ [4].

Utilizando a hipótese de Lewis unitário e substituindo na equação (4.18), a relação abaixo

$$\nabla \int_{T_0}^T c_p dT = \sum_{k=1}^N (\nabla Y_k) \int_{T_0}^T c_{p_k} dT + c_p \nabla T \quad (4.20)$$

obtém-se a equação de energia de Shvab-Zeldovich,

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\rho \int_{T_0}^T c_p dT \right) + \nabla \cdot \left(\rho \mathbf{v} \int_{T_0}^T c_p dT - \rho \mathbf{D} \nabla \int_{T_0}^T c_p dT \right) = - \sum_{k=1}^N h_{f_k}^0 \dot{\omega}_k \quad (4.21)$$

Utilizando a hipótese da Lei de Fick (4.15), a equação de conservação de espécies é dada por,

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho Y_k) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} Y_k - \rho \mathbf{D} \nabla Y_k) = \dot{\omega}_k \quad (4.22)$$

Na equação de conservação de energia de Shvab-Zeldovich foi utilizado a hipótese do valor de c_p constante no intervalo de temperatura considerado nas integrais. Assim, finalmente, as equações de conservação de energia(4.21) e espécies(4.22) obtidas com a abordagem de Shvab-Zeldovich podem ser escritas em coordenadas cilíndricas axissimétricas como

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho c_p T) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial x}(\rho r u c_p T) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(\rho r v c_p T) = \\ = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial x} \left[\rho r \mathbf{D} \frac{\partial}{\partial x} (c_p T) \right] + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[\rho r \mathbf{D} \frac{\partial}{\partial r} (c_p T) \right] - \sum_{k=1}^N h_{f_k}^0 \dot{\omega}_k \end{aligned} \quad (4.23)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_k) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial x}(\rho r u Y_k) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(\rho r v Y_k) = \\ = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial x} \left[\rho r \mathbf{D} \frac{\partial Y_k}{\partial x} \right] + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[\rho r \mathbf{D} \frac{\partial Y_k}{\partial r} \right] + \dot{\omega}_k \end{aligned} \quad (4.24)$$

4.3 Modelo de Chama Fina

As reações químicas nos sistemas reativos podem ser modeladas analiticamente e numericamente por meio de diferentes mecanismos. Mecanismo de reação é o conjunto de reações elementares que são necessárias para descrever com precisão uma reação global. Esses mecanismos de reação podem envolver somente um único passo, ou até centenas de reações elementares. Um campo de pesquisa constante em engenharia, envolve a escolha do número mínimo de reações elementares necessárias para descrever uma reação global particular com a precisão requerida[4]. Embora o uso de mecanismos químicos mais detalhados representem melhor a realidade, muitos aspectos da combustão podem ser compreendidos considerando-se a reação química através de um passo único global. Em ordem crescente de complexidade, os diferentes modelos para representar o mecanismo das reações são numerados abaixo [41]:

1. Reações infinitamente rápidas;
2. Equilíbrio químico;
3. Reações globais;
4. Mecanismos de reação analiticamente reduzidos;
5. Mecanismos de reação detalhados.

Segundo KEE (2003)[41] os mecanismos podem ser divididos em dois grupos. Ao primeiro grupo pertencem os dois primeiros modelos enumerados acima: reações

infinitamente rápidas e o equilíbrio químico. Nessas duas formulações se considera que a taxa de mistura do reagente seja lenta em comparação com a taxa de reação química, e o sistema é denominado difusivo ou controlado pela mistura. O segundo grupo é composto pelos processos controlados pela cinética, em que os fenômenos físicos de mistura são rápidos quando comparados à reação química. Os mecanismos 3,4 e 5 fazem parte do segundo grupo, e nessas abordagens existem restrições devido à taxa de reação química (química finita). Para escolher um modelo que represente bem o mecanismo das reações, podemos utilizar o número de Damkohler (Da) (eq. 2.1), e analisar se o sistema é controlado pela mistura ou pela cinética. Para $Da \gg 1$ o sistema pode ser modelado com a hipótese de química infinita, ou seja, as reações químicas ocorrem em uma velocidade muito maior do que a taxa de mistura, e o sistema é controlado pela difusão. E quando $Da \approx 1$ os processos são controlados pela cinética química e difusão, e as reações ocorrem de forma mais lenta, e assim o sistema deve ser modelado utilizando a hipótese de química finita.

O modelo de chama fina se enquadra no primeiro grupo, no qual as reações são consideradas infinitamente rápidas. Esse modelo foi idealizado e formulado por BURKE e SCHUMANN [25] e utilizado posteriormente em diversos outros estudos. Nesse modelo as reações químicas em uma chama difusiva laminar são descritas através de uma reação global irreversível e de passo único, correspondendo a uma conversão infinitamente rápida dos reagentes em produtos estáveis. A modelagem de processos de combustão por meio dessa descrição é conhecida como *mixed-is-burned*[41]. O combustível F reage com o O_2 do ar, gerando os produtos de acordo com uma reação global de passo único,



onde o termo s é a massa de oxigênio que reage por unidade de massa de combustível consumido.

A taxa de reação da Eq.(4.25) é definida através da Lei de Arrhenius. Essa taxa de reação é dependente das frações mássicas de combustível e oxidante, e da temperatura T , na forma[27],

$$\frac{dF}{dt} = \dot{\omega}_F = \frac{\dot{\omega}_{OX}}{s} = \frac{\dot{\omega}_{Pr}}{1 - s} = -\rho A \exp\left(-\frac{E}{RT}\right) (Y_F)^{n_F} (Y_{OX})^{n_{OX}} \quad (4.26)$$

na qual $\dot{\omega}_k$ representa a taxa de produção ou consumo da espécie k por unidade de volume e tempo, R a constante universal dos gases, n_F e n_{OX} as ordens de reação, E a energia de ativação e A o fator pré-exponencial.

As equações de conservação definidas nas Seções 4.1 e 4.2 podem ser reescritas na forma adimensional. As grandezas características para a definição dos parâmetros adimensionais são dados por

- comprimento: R_O (raio do tubo externo);
- velocidade: u_a ;
- pressão: P_a
- temperaturas: T_b e T_0 ;
- massa específica: ρ_a ;
- calor específico: c_{p_a} ;
- viscosidade: μ_a ;
- difusividade: \mathbf{D}_a ;
- fração mássica de oxigênio no ar de injeção: Y_{OX_a} .

Nas grandezas acima o subscrito a refere-se às propriedades do ar. As grandezas T_b e T_0 representam as temperaturas da mistura queimada (temperatura da chama) e não queimada (temperatura do ar na entrada). Denotando as variáveis dimensionais por meio de um asterisco sobrescrito, as variáveis adimensionais podem ser escritas na seguinte forma,

$$x = \frac{x^*}{R_O}, \quad r = \frac{r^*}{R_O}, \quad u = \frac{u^*}{u_a}, \quad v = \frac{v^*}{u_a}, \quad \rho = \frac{\rho^*}{\rho_a} \quad (4.27)$$

$$P = \frac{P^* - P_a}{\rho_a u_a^2}, \quad T = \frac{T^* - T_0}{T_b - T_0}, \quad \mu = \frac{\mu^*}{\mu_a}, \quad \lambda = \frac{\lambda^*}{\lambda_a}, \quad c_p = \frac{c_p^*}{c_{p_a}} \quad (4.28)$$

$$\mathbf{D}_k = \frac{\mathbf{D}_k^*}{\mathbf{D}_a}, \quad h_{f_k}^0 = \frac{h_k^*}{c_{p_a}(T_b - T_0)}, \quad \dot{\omega}_k = \dot{\omega}_k^* \frac{R_O}{\rho_a u_a}, \quad k = 1, 2, \dots, N \quad (4.29)$$

$$Re = \frac{\rho_a u_a R_O}{\mu_a}, \quad Pe = \frac{\rho_a c_{p_a} u_a R_O}{\lambda_a}, \quad Fr = \frac{u_a^2}{g R_O}, \quad Le = \frac{\lambda_a}{\rho_a c_{p_a} \mathbf{D}_a} \quad (4.30)$$

$$Y_{OX} = \frac{Y_{OX}^*}{Y_{OX_a}}, \quad Fr_m = \frac{\mu_o u_a^2}{Y_{OX_a} \chi_{OX} B \frac{dB}{dx} R_O} \quad (4.31)$$

As relações acima foram utilizadas para adimensionalizar a equação de conservação de massa (4.10), as equações de conservação da quantidade de movimento axial (4.11) e radial (4.12), a equação de conservação de energia (4.23), e a equação de conservação de espécies (4.24). Assim, substituindo os parâmetros dimensionais, rearranjando as equações convenientemente e agrupando os parâmetros, as equações

de conservação adimensionalizadas são escritas abaixo.

Conservação de massa:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial x}(\rho r u) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(\rho r v) = 0 \quad (4.32)$$

Conservação de quantidade de movimento axial:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho u) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial x}(\rho r u u) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(\rho r v u) = \\ = -\frac{\partial P}{\partial x} + \frac{1}{Re} \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial x} \left(r \mu \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \mu \frac{\partial u}{\partial r} \right) \right] + \\ + \frac{1}{Re} \left\{ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \mu \frac{\partial v}{\partial x} \right) + \frac{1}{3r} \frac{\partial}{\partial x} \left(r \mu \frac{\partial u}{\partial x} \right) - \frac{2}{3} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial x} \left[\mu \frac{\partial}{\partial r} (r v) \right] \right\} + \\ + \frac{1}{Fr} \rho + \frac{1}{Fr_m} \rho Y_{Ox} \end{aligned} \quad (4.33)$$

Conservação de quantidade de movimento radial:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho v) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial x}(\rho r u v) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(\rho r v v) = \\ = -\frac{\partial P}{\partial r} + \frac{1}{Re} \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial x} \left(r \mu \frac{\partial v}{\partial x} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \mu \frac{\partial v}{\partial r} \right) \right] + \\ + \frac{1}{Re} \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \mu \frac{\partial v}{\partial r} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial x} \left(r \mu \frac{\partial u}{\partial r} \right) \right] + \\ + \frac{1}{Re} \left\{ -\frac{2}{3} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[\mu \frac{\partial}{\partial r} (r v) \right] - \frac{2}{3} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[r \mu \frac{\partial u}{\partial x} \right] \right\} + \\ + \frac{1}{Re} \left[-\frac{2\mu v}{r^2} + \frac{2}{3} \frac{\mu}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r v) + \frac{2}{3} \frac{\mu}{r} \frac{\partial u}{\partial x} \right] \end{aligned} \quad (4.34)$$

Conservação de energia:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho c_p T) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial x}(\rho r u c_p T) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(\rho r v c_p T) = \\ = \frac{1}{Pe} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial x} \left[\rho r \mathbf{D} \frac{\partial}{\partial x} (c_p T) \right] + \frac{1}{Pe} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[\rho r \mathbf{D} \frac{\partial}{\partial r} (c_p T) \right] - \sum_{k=1}^N h_{f_k}^0 \dot{\omega}_k \end{aligned} \quad (4.35)$$

Conservação de espécies:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_k) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial x}(\rho r u Y_k) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(\rho r v Y_k) = \\ = \frac{1}{LePe} \left\{ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial x} \left[\rho r \mathbf{D} \frac{\partial Y_k}{\partial x} \right] + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[\rho r \mathbf{D} \frac{\partial Y_k}{\partial r} \right] \right\} + \dot{\omega}_k \end{aligned} \quad (4.36)$$

4.3.1 Frações de Mistura - Escalares Conservados

O conceito de escalar conservado simplifica a solução dos problemas de escoamentos reativos, fornecendo os campos de velocidades, espécies e temperatura. O escalar conservado pode ser definido como uma propriedade escalar que é conservada em toda parte do escoamento. Segundo KUO (2005)[27], a forma de Shvab-Zeldovich das equações de conservação de energia e espécies é útil quando se assume que as transformações químicas ocorrem através de uma reação direta em passo único e a hipótese de $Le = 1$ é feita. Assim, admitindo-se o valor de c_p constante no intervalo de temperatura considerado nas integrais da equação de Shavab-Zeldovich para a energia (4.21) e definindo a entalpia de formação como,

$$h_{RP} = - \sum_{k=1}^N h_{f_k}^0 \dot{\omega}_k \quad (4.37)$$

as equações de conservação de energia(4.21) e conservação das espécies(4.22) podem ser escritas da seguinte maneira.

$$\frac{\partial}{\partial t}[\rho(c_p T)] + \nabla \cdot [\rho \mathbf{v}(c_p T) - \rho \mathbf{D} \nabla(c_p T)] = h_{RP} \quad (4.38)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}[\rho(Y_k)] + \nabla \cdot [\rho \mathbf{v}(Y_k) - \rho \mathbf{D} \nabla(Y_k)] = \dot{\omega}_k \quad (4.39)$$

Com isso as equações assumem a mesma forma, sendo a entalpia($c_p T$) e a fração mássica(Y_k) os escalares conservados das equações de energia e espécies, respectivamente. De forma geral, pode-se apresentar as equações acima como uma única equação através do operador β

$$\bar{L}[\beta] = \frac{\partial}{\partial t}[\rho(\beta)] + \nabla \cdot [\rho \mathbf{v}(\beta) - \rho \mathbf{D} \nabla(\beta)] \quad (4.40)$$

Com o objetivo de eliminar os termos fonte das equações de conservação de energia e espécies, será definido um escalar conservado chamado fração de mistura(Z),

$$Z = \frac{f_M - f_{A\infty}}{f_{F\infty} - f_{A\infty}} \quad (4.41)$$

onde a fração de mistura (Z) varia no intervalo de 0 à 1, e f representa qualquer propriedade conservada, e é denominada função de acoplamento[27]. Essa função pode ser definida através das seguintes relações,

$$f_{FO} = Y_F - \frac{Y_{OX}}{s} \quad (4.42)$$

$$f_{FT} = Y_F - \frac{c_p T}{h_{RP}} \quad (4.43)$$

$$f_{OT} = \frac{Y_{OX}}{s} - \frac{c_p T}{h_{RP}} \quad (4.44)$$

Com a definição desses escalares conservados pode-se escrever uma única equação de conservação sem a presença de termos fonte, em que a escolha da função de acoplamento fornecerá a solução do campo de temperatura ou espécies.

$$\frac{\partial}{\partial t}[\rho(Z_J)] + \nabla \cdot [\rho \mathbf{v}(Z_J) - \rho \mathbf{D} \nabla(Z_J)] = 0, \quad J = FO, FT, OT \quad (4.45)$$

Ou seja, utilizando a técnica de escalares conservados, apenas a equação (4.45) deve ser resolvida para se encontrar a solução do campo de fração de mistura (Z), e obter os perfis de espécies ou temperatura dependendo da função de acoplamento empregada. A posição da frente de chama também pode ser obtida pela fração de mistura utilizando a função de acoplamento (4.42), já que o oxidante e combustível se encontram em proporções estequiométricas nesse local. Assim, a posição da chama no sistema pode ser avaliada através da seguinte expressão,

$$Z_{esteq} = \frac{Y_{OX_{A\infty}}}{sY_{F_{F\infty}} + Y_{OX_{A\infty}}} \quad (4.46)$$

em que os subscritos $A\infty$ e $F\infty$ representam os fluxos de ar e combustível na seção de entrada, respectivamente. A figura (4.1) representa como o campo de fração de mistura varia em três posições do sistema: na superfície da chama, no interior da chama e no exterior da chama. As duas últimas regiões descritas acima, também são comumente chamadas de região do combustível e região do oxidante.

Utilizando a equação 4.41 com a função de acoplamento apropriada são calculados os campos de temperatura e frações mássicas nas regiões do interior e exterior da chama. Na região do combustível, essas expressões podem ser escritas como,

$$T = ZT_{F\infty} + \left(T_{A\infty} + Y_{OX_{A\infty}} \frac{-h_{RP}}{c_p} \right) (1 - Z) \quad (4.47)$$

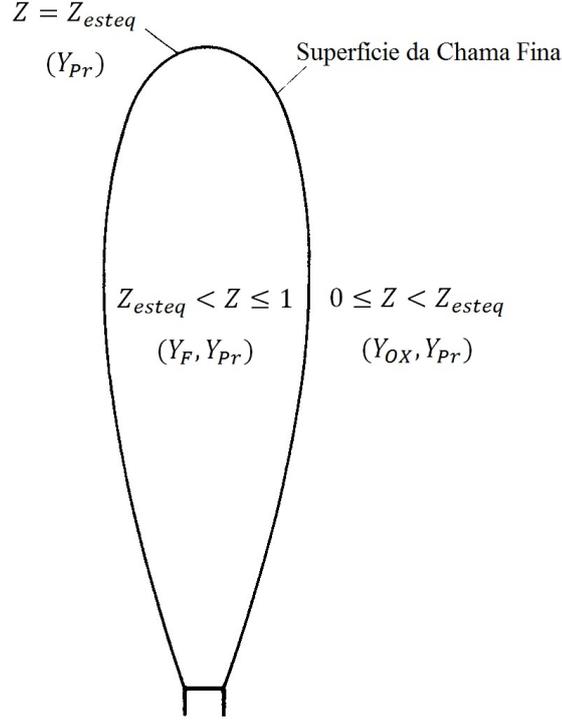


Figura 4.1: Sistema simplificado de uma chama difusiva modelada empregando o modelo de chama fina, onde dentro da chama somente combustível e produtos existem e fora da chama oxidante e produtos. Adaptado de TURNS [4].

$$Y_F = ZY_{F\infty} + Y_{OX_{A\infty}} \frac{W_F \eta_F}{W_{OX} \eta_{OX}} (Z - 1) \quad (4.48)$$

$$Y_{OX} = 0 \quad (4.49)$$

$$Y_P = Y_{OX_{A\infty}} \frac{W_P \eta_P}{W_{OX} \eta_{OX}} (1 - Z) \quad (4.50)$$

$$Y_N = Y_{N_{A\infty}} (1 - Z) + ZY_{N_{F\infty}} \quad (4.51)$$

e na região do oxidante, como,

$$T = T_{A\infty} (1 - Z) + \left(T_{F\infty} + Y_{F_{F\infty}} \frac{-h_{RP}}{c_p} \right) Z \quad (4.52)$$

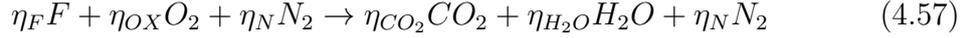
$$Y_F = 0 \quad (4.53)$$

$$Y_{OX} = Y_{OX_{A\infty}} (1 - Z) - Y_{F_{F\infty}} \frac{W_{OX} \eta_{OX}}{W_F \eta_F} Z \quad (4.54)$$

$$Y_P = \frac{W_P \eta_P}{W_F \eta_F} Y_{F_{F\infty}} Z \quad (4.55)$$

$$Y_N = Y_{N_{A\infty}} (1 - Z) + Z Y_{N_{F\infty}} \quad (4.56)$$

Considerando a combustão completa e a formação de apenas dois produtos, dióxido de carbono (CO_2) e água (H_2O),



as frações mássicas de Y_{CO_2} e Y_{H_2O} podem ser obtidas através das seguintes expressões,

$$Y_{CO_2} = \left(\frac{W_{CO_2} \eta_{CO_2}}{W_{CO_2} \eta_{CO_2} + W_{H_2O} \eta_{H_2O}} \right) Y_P \quad (4.58)$$

$$Y_{H_2O} = \left(\frac{W_{H_2O} \eta_{H_2O}}{W_{CO_2} \eta_{CO_2} + W_{H_2O} \eta_{H_2O}} \right) Y_P \quad (4.59)$$

4.4 Variação das Propriedades Termodinâmicas e de Transporte

Na modelagem numérica do escoamento reativo foram consideradas as variações de massa específica, da viscosidade e o parâmetro de geração de calor do ar com a temperatura. Considerando o processo de combustão aproximadamente adiabático, a variação da massa específica do ar é admitida através da aplicação da equação dos gases perfeitos,

$$\rho = \frac{\rho_0 T_0}{T} \quad (4.60)$$

A variação da viscosidade do ar com a temperatura foi modelada pela equação definida por KANURY [42],

$$\mu = \mu_0 \left(\frac{T}{T_0} \right)^p \quad (4.61)$$

na qual $p = 0,7$, $T_0 = 298K$ e $\mu_0 = 1,85 \times 10^{-4} g/cm - s$ são os valores de referência para o ar.

Para determinar o parâmetro de geração de calor ($-h_{RP}/c_p$) foi utilizada a expressão 4.52. Isolando do lado esquerdo o termo de geração de calor, obtém-se,

$$\frac{-h_{RP}}{c_p} = \frac{1}{Y_{F_{F\infty}}} \left[\frac{T_{max} - T_{A\infty}(1 - Z_{esteq})}{Z_{esteq}} - T_{F\infty} \right] \quad (4.62)$$

na qual T_{max} é o valor estimado para a temperatura máxima, que pode ser obtida experimentalmente ou numericamente. Na combustão de metano em ar, o valor obtido experimentalmente [43] e numericamente [44] para T_{max} é de $2080K$. Na queima de etanol a T_{max} , obtida numericamente por LITTLE [44], é de $2078K$.

4.5 Domínio Computacional e Condições de Contorno

Considerando o sistema bidimensional e axissimétrico, o domínio computacional pode ser reduzido à uma unidade de ângulo utilizando condição de contorno de simetria axial, diminuindo consideravelmente o esforço computacional. As condições de contorno do sistema são baseadas no trabalho de MITCHELL *et al.* (1980)[5]. Portanto, são dadas por:

$$u = u_F, \quad v = 0, \quad T = T_F, \quad Y_k = Y_F, \quad x = 0, \quad 0 < r < R_F \quad (4.63)$$

$$u = u_{OX}, \quad v = 0, \quad T = T_{OX}, \quad Y_k = Y_{OX}, \quad x = 0, \quad R_F < r < R_O \quad (4.64)$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{\partial v}{\partial x} = \frac{\partial T}{\partial x} = \frac{\partial Y_k}{\partial x} = 0, \quad P = P_a, \quad x = L, \quad 0 < r < R_O \quad (4.65)$$

$$\frac{\partial u}{\partial r} = v = \frac{\partial T}{\partial r} = \frac{\partial Y_k}{\partial r} = 0, \quad 0 < x < L, \quad r = 0 \quad (4.66)$$

$$u = v = \frac{\partial T}{\partial r} = \frac{\partial Y_k}{\partial r} = 0, \quad 0 < x < L, \quad r = R_O \quad (4.67)$$

No instante $t = 0s$ todo domínio é considerado contendo apenas ar.

A solução é determinada por meio de escalares conservados, que substituem a temperatura e a fração mássica nas condições de contorno acima, de modo que as mesmas são reescritas como,

$$u = u_F, \quad v = 0, \quad Z = 1, \quad x = 0, \quad 0 < r < R_F \quad (4.68)$$

$$u = u_{OX}, \quad v = 0, \quad Z = 0, \quad x = 0, \quad R_F < r < R_O \quad (4.69)$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{\partial v}{\partial x} = \frac{\partial Z}{\partial x} = 0, \quad P = P_a, \quad x = L, \quad 0 < r < R_O \quad (4.70)$$

$$\frac{\partial u}{\partial r} = v = \frac{\partial Z}{\partial r} = 0, \quad 0 < x < L, \quad r = 0 \quad (4.71)$$

$$u = v = \frac{\partial Z}{\partial r} = 0, \quad 0 < x < L, \quad r = R_O \quad (4.72)$$

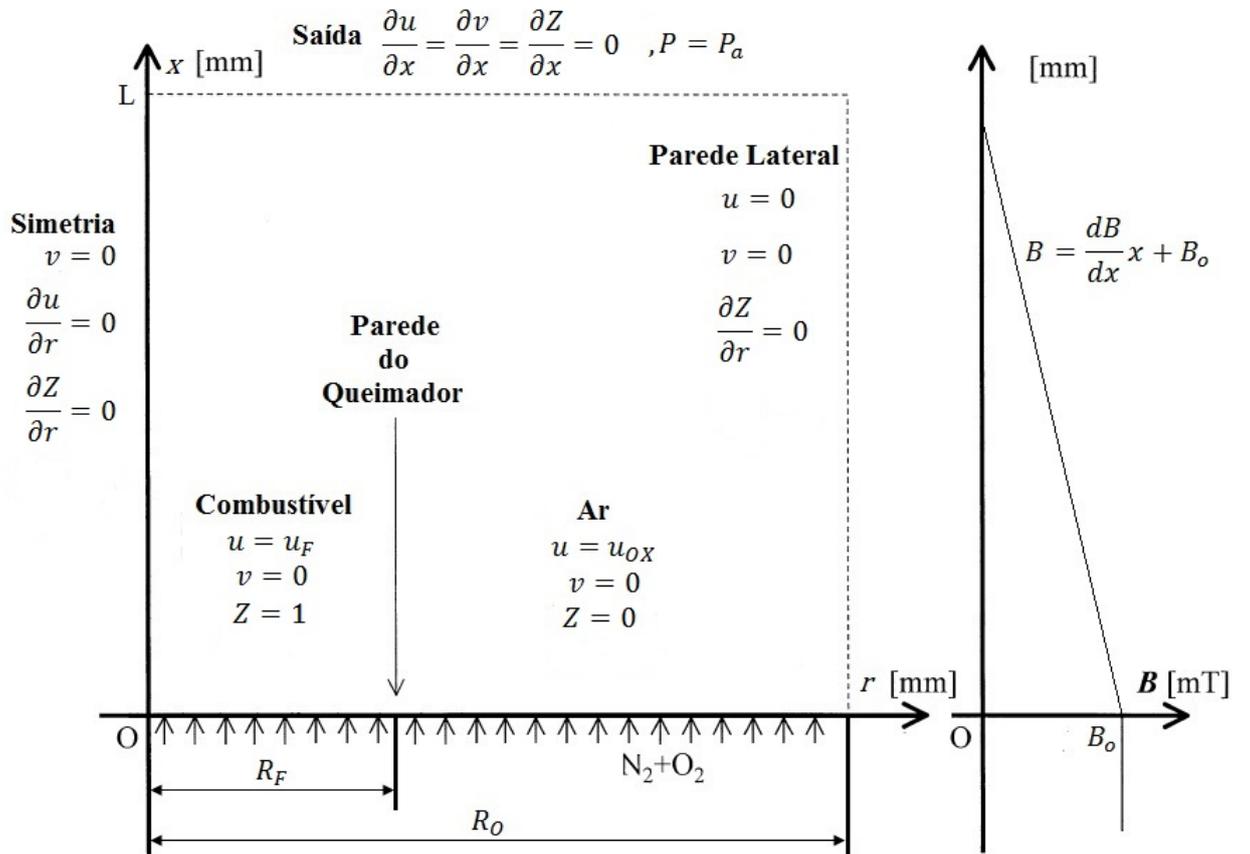


Figura 4.2: Domínio Computacional e Condições de Contorno.

Capítulo 5

Metodologia

SAUER [3] estudou numericamente a combustão de metano e etanol, utilizou os mesmos modelos e hipóteses desse trabalho, mas seu trabalho não teve o objetivo de avaliar a influência de campos magnéticos no escoamento reativo. Os seus resultados indicaram a capacidade de capturar a tendência dos resultados experimentais de MITCHELL *et al.*(1980)[5], e boa concordância com os trabalhos numéricos de TARHAN e SELÇUK [30] e XU e SMOOKE (1993)[28]. Assim, a partir do programa em linguagem FORTRAN para simulação da combustão desenvolvido por SAUER(2012), foram programadas alterações para acrescentar a força de corpo gerada por um campo magnético. Para a simulação em FORTRAN desta dissertação, foi utilizada a mesma malha estruturada 80x80 na qual foi realizada uma análise de convergência por SAUER [3]. Para o domínio computacional apresentado na figura 4.2, os parâmetros utilizados na simulação são apresentados a seguir.

Parâmetros geométricos

- $R_O = 2,54cm$
- $R_F = 0,635cm$
- $L = 30cm$

Condições de operação

- Pressão na saída do queimador: $P_a = 1atm$
- Temperatura de entrada: $T = 298K$

Linha de combustível

- Velocidade axial: $u_F = 4,5cm/s$

- Velocidade radial: $v_F = 0\text{cm/s}$
- Temperatura: $T_F = 298\text{K}$
- Composição: $Y_F = 1, 0$

Linha de oxidante

- Velocidade axial: $u_{OX} = 9,88\text{cm/s}$
- Velocidade radial: $v_{OX} = 0\text{cm/s}$
- Temperatura: $T_{OX} = 298\text{K}$
- Composição: $Y_{OX} = 0,232$; $Y_{N_2} = 0,768$

5.1 Chamas Difusivas de Metano e Etanol

Os dois primeiros problemas a serem analisados nessa dissertação consistem na obtenção de resultados numéricos da combustão de metano e etanol na presença de campos magnéticos utilizando o código FORTRAN, que serão apresentados nos capítulos 7 e 8. Serão considerados campos magnéticos crescente e decrescente para avaliação dos efeitos dessa aplicação em chamas difusivas. Antes da solução desses dois problemas, no capítulo 6 será realizada uma comparação dos resultados do código FORTRAN com os resultados de chamas difusivas de metano obtidos pelo programa comercial FLUENT 15.0.

Nas simulações da combustão de metano e etanol no FORTRAN e do metano no FLUENT foram consideradas três condições distintas para o campo magnético:

- (a) Sem a aplicação do campo magnético[3], $B = 0 \text{ T}$;
- (b) Campo magnético decrescente, $B \frac{dB}{dx} = -40 \text{ T}^2/\text{m}[21]$;
- (c) Campo magnético crescente, $B \frac{dB}{dx} = +40 \text{ T}^2/\text{m}[21]$.

Ao final de cada simulação, o programa em FORTRAN também calcula parâmetros que caracterizam chamas difusivas. Para cada simulação foram calculados altura (L_f) e largura máxima da chama ($W_{f,max}$). Com os resultados da simulação foram gerados gráficos dos campos de temperatura, fração de mistura, velocidade e espécies. A comparação entre a utilização de campos magnéticos crescentes ou decrescentes em chamas laminares difusivas foi o principal objetivo de estudo. Com o auxílio dos campos descritos acima e dos parâmetros foram realizadas as análises do escoamento reativo, dos fenômenos atuantes no escoamento e a comparação entre a utilização de metano e etanol.

5.2 Problema de Otimização

Na indústria, o processo de combustão é utilizado comumente para transferir energia na forma de calor. Por isso, a otimização da combustão pode ser avaliada como sendo a determinação de variáveis de projeto que retornem o ponto de máxima taxa de transferência de calor. Nesse processo o calor é transferido principalmente por radiação e convecção, e essas formas de transferência estão relacionadas com a temperatura e com a velocidade dos gases de exaustão.

Nessa dissertação, o objetivo do problema de otimização é aumentar a eficiência do processo de combustão de metano através da presença de um campo magnético decrescente. Foi utilizado um campo magnético não-homogêneo de intensidade decrescente pois essa configuração induz a difusão e convecção necessária para otimização do escoamento reativo. O empuxo gerado pelo campo magnético decrescente acelera axialmente o escoamento fazendo com que a velocidade radial do ar em direção a zona de reação também aumente, para que haja conservação de massa. Com o oxidante sendo carregado em direção ao eixo axial de simetria por esse mecanismo, a chama tende diminuir de largura, e assim é notória a relação entre a largura da chama e a otimização da reação de combustão. Portanto, a função objetivo do problema de otimização é a minimização da largura da chama (W_f). Ao final desta dissertação, pretende-se concluir qual a densidade de fluxo magnético (B) e gradiente (∇B) capazes de minimizar a função objetivo, e assim maximizar a eficiência da combustão.

O campo magnético modelado é uniforme na direção radial, varia somente na direção axial, e foi modelado como uma função linear em x , como mostrado na equação 5.1. Por isso, as variáveis de projeto a serem otimizadas no problema de otimização são o valor campo magnético na posição $x = 0$ (B_o) e o gradiente do campo magnético ($\frac{dB}{dx}$), com o objetivo de minimizar a largura da chama.

$$B = \frac{dB}{dx}x + B_o \quad (5.1)$$

Os limites inferior e superior de variação das variáveis foram definidas com base em trabalhos da literatura e com limitações técnicas de aplicação de campos magnéticos. Esses limites podem ser visualizados na tabela 5.1.

Tabela 5.1: Valores dos limites superior e inferior das variáveis do problema de otimização

<i>Variável</i>	Limite inferior	Limite superior
$B_o(\text{T})$	0,0	1,5
$dB/dx(\text{T/m})$	0,0	-40

Campos magnéticos muito elevados são de difícil aplicação prática pois é ne-

cessário corrente elevada na bobina ou ímãs muito potentes, o que limita a variável B_o . Os gradientes pequenos não afetam a chama consideravelmente e gradientes grandes implicam em campos magnéticos iguais a zero em uma distância axial pequena, não afetando a chama em toda sua extensão. Assim, a figura 5.1 apresenta alguns campos magnéticos variando em relação a distância axial.

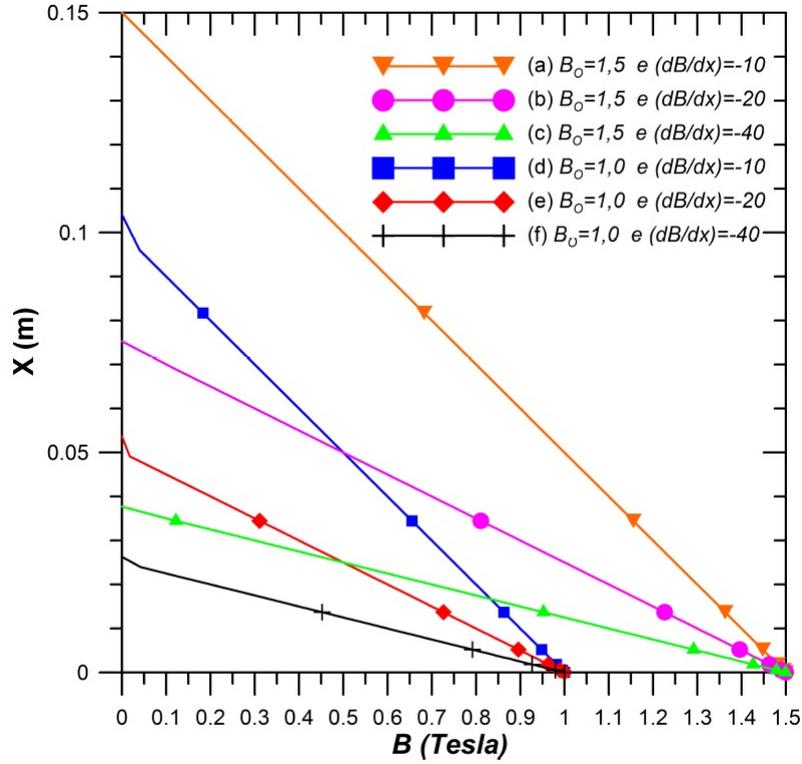


Figura 5.1: Alguns campos magnéticos utilizados no problema de otimização.

A força magnética é proporcional ao produto do campo magnético pelo seu gradiente ($B(dB/dx)$), como apresentado na equação 4.9. Sem a aplicação do campo magnético, a altura da chama de metano é igual a 14cm [3]. Assim, em uma distribuição linear do campo magnético, grandes gradientes significam forças magnéticas elevadas na entrada do queimador mas sendo iguais a zero em posições mais próximas dessa entrada. Enquanto, pequenos gradientes significam forças magnéticas menores na entrada do queimador, mas que podem se estender por toda extensão da chama. Essa análise pode ser entendida mais facilmente na figura 5.2, que relacionam como o produto $B(dB/dx)$ varia ao longo da posição axial.

Desta forma, foram realizadas simulações com diferentes combinações do campo magnético na posição $x = 0$ (B_o) e do gradiente do campo magnético ($\frac{dB}{dx}$), com o objetivo de encontrar a menor largura da chama. Ao final de cada simulação o programa em FORTRAN retornava um arquivo texto com o valor da largura da chama tomada na posição axial igual à metade da altura da chama ($x = \frac{L_f}{2}$). O programa Wolfram Mathematica 10 foi utilizado para plotar um gráfico em três

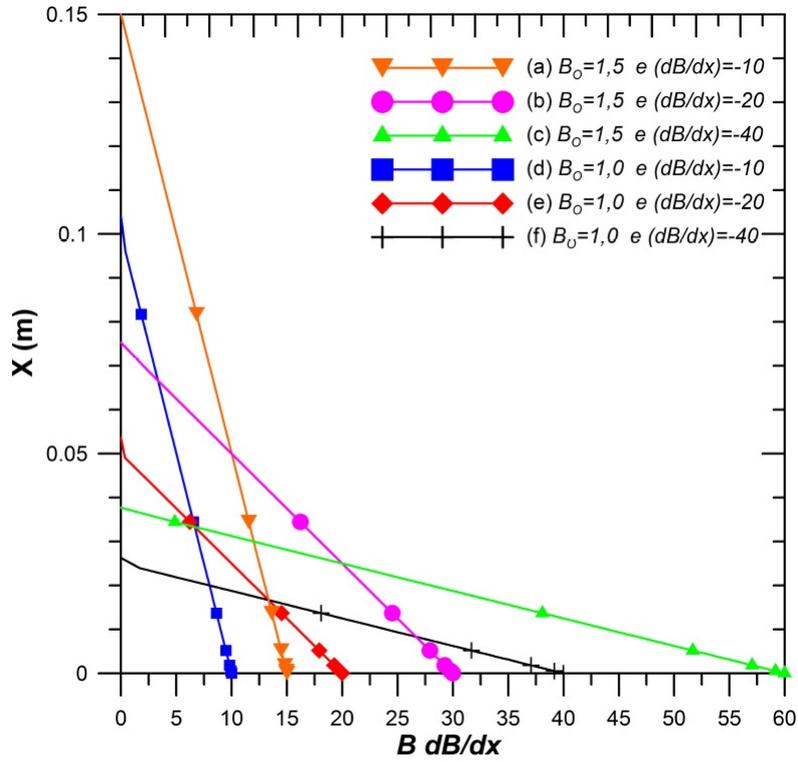


Figura 5.2: Produto do campo magnético pelo seu gradiente variando em relação a posição axial.

dimensões no qual a função objetivo é plotada no eixo z, em função das variáveis B_0 e $\frac{dB}{dx}$ nos eixos x e y. Uma rotina de otimização em linguagem FORTRAN foi programada com o objetivo de sistematizar a minimização da função objetivo. O algoritmo utilizado foi o Enxame de Partículas, que foi acoplado ao programa original. Maiores detalhes e os resultados da otimização serão expostos no capítulo 9.

Parte III

Resultados e Conclusões

Capítulo 6

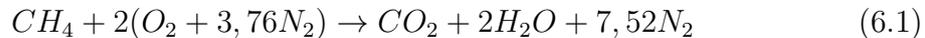
Verificação

Em seu estudo, SAUER [3] avaliou a solução do programa desenvolvido em FORTRAN comparando-a com soluções analíticas e numéricas disponíveis na literatura. Com isso a solução obtida pelo programa desenvolvido em FORTRAN foi verificada, garantindo que as soluções obtidas são suficientemente precisas, de forma a representar adequadamente o comportamento do sistema físico. O programa comercial FLUENT 15.0 foi utilizado com o objetivo de comparar seus resultados com o código em FORTRAN, e assim avaliar a capacidade de solução de ambos os programas, principalmente quando existe a aplicação de um campo magnético. Os resultados em FORTRAN da chama difusiva laminar de metano foram comparados aos resultados do FLUENT tanto na combustão sem a presença de campo magnético quanto com a presença do campo. Os resultados sem a presença do campo magnético foram comparados também com resultados numéricos e experimental da literatura. Nas simulações foi utilizado o modelo de química infinita, considerando o problema físico como sendo difusivo e controlado pela mistura. Assim, foi utilizado o modelo de chama difusiva (*Non-premixed model*), que envolve algumas hipóteses como apresentadas no manual do FLUENT[45]:

- Correntes de combustível e oxidantes inicialmente separadas (chamas difusivas);
- Coeficientes de difusão de todas as espécies iguais;
- Número de Lewis unitário;
- Escoamento de baixo número de Mach (incompressível).

A partir dessas hipóteses as equações de energia e transporte das espécies são reduzidas em uma única equação de escalar conservado, chamado fração de mistura (Z). Para a boa utilização desse modelo, deve-se garantir que as reações químicas ocorrem em uma velocidade muito maior do que a taxa de mistura, e o sistema é

controlado pela difusão e mistura entre combustível e oxidante [45]. Esse modelo também foi utilizado no programa FORTRAN, e pode ser entendido com mais detalhes na seção 4.2. A seguinte reação de combustão completa para o metano foi considerada:



Dessa forma, as simulações no FLUENT utilizaram algumas hipóteses para o modelo de combustão idênticas às utilizadas no FORTRAN, como o número de Lewis unitário, a química infinita, a reação global de combustão e a utilização da teoria de escalar conservado. Porém, o FLUENT não apresenta o modelo de chama fina, na realidade, este programa apresenta um modelo de equilíbrio químico parcial que utiliza o modelo de equilíbrio químico em regiões mais distantes da chama, e na região da chama é utilizado um modelo baseado na reação de passo único e irreversível, semelhante ao modelo de chama fina. No FLUENT as equações diferenciais que governam esse problema foram discretizadas e resolvidas através do Método dos Volumes Finitos. O algoritmo SIMPLE foi utilizado para lidar com o acoplamento pressão-velocidade, no qual a solução da equação de conservação de massa é utilizada para obter o campo de pressão em cada iteração do escoamento. As aproximações numéricas para as equação de quantidade de movimento foi de primeira ordem *upwind*. Enquanto, para a equação de fração de mistura foi utilizada uma aproximação de segunda ordem e com o mesmo esquema de interpolação *upwind*. As propriedades termodinâmicas como massa específica e viscosidade foram calculadas de maneira semelhante ao código FORTRAN. A massa específica foi calculada aplicando a equação dos gases perfeitos (eq. 4.60), e a viscosidade foi calculada pela lei de potência também apresentada na seção 4.4 pela equação 4.61. Apesar da quantidade de modelos de combustão e sua robustez na solução numérica, o FLUENT apresenta o seu código fechado ao usuário, tornando o código em FORTRAN mais flexível para o usuário. Dentro desse contexto, o FLUENT não permite o acesso ao coeficiente de difusão, fazendo com que provavelmente os coeficientes de difusão utilizados no FLUENT e FORTRAN sejam diferentes. O domínio computacional e as condições de contorno são as mesmas utilizadas em todas as simulações, descritas na seção 4.5. Os campos magnéticos aplicados no escoamento reativos de metano foram:

- (a) Sem a aplicação do campo magnético[3], $B = 0 \quad T$;
- (b) Campo magnético decrescente, $B \frac{dB}{dx} = -40 \quad T^2/m[21]$;
- (c) Campo magnético crescente, $B \frac{dB}{dx} = +40 \quad T^2/m[21]$.

6.1 Análise da Convergência da Malha

A malha estruturada não uniforme utilizada para a solução do problema no programa FLUENT é apresentada na Fig. 6.1.

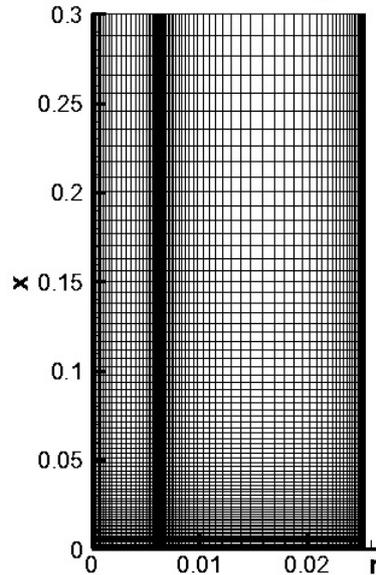
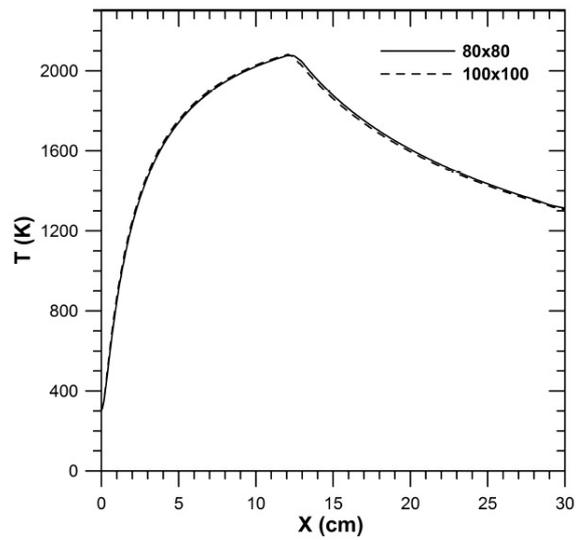
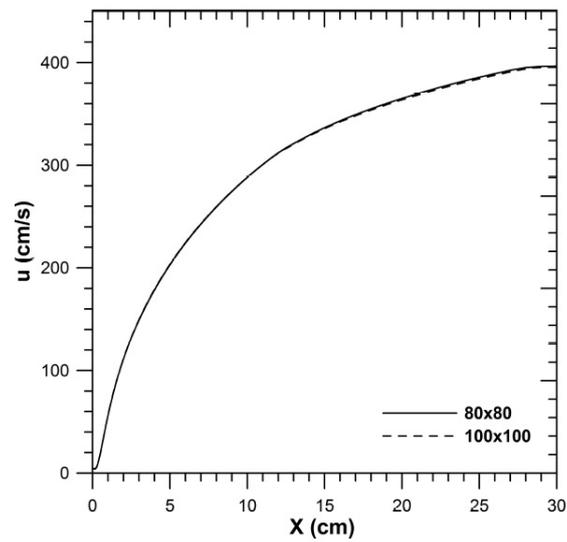


Figura 6.1: Distribuição dos pontos na malha 80×80 gerada pelo programa comercial Ansys Meshing.

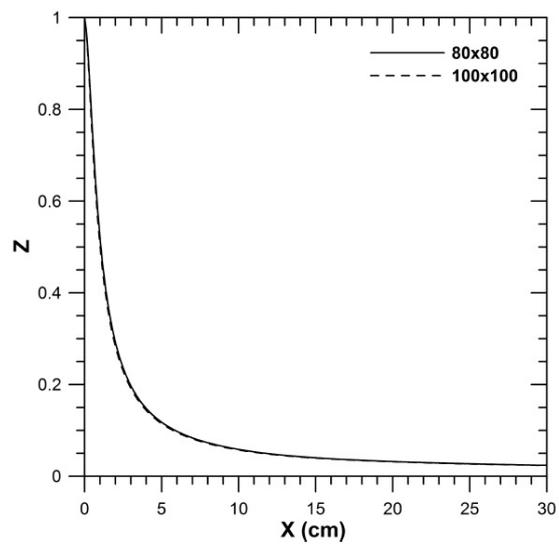
Como também feito na malha gerada pelo FORTRAN, a malha é mais refinada nas regiões de maiores gradientes como: região de entrada, parede do queimador, e a região onde se situa a superfície da chama. Nessa análise é necessário mostrar que a malha do FLUENT gerada nessa dissertação tem resolução necessária para capturar com boa acurácia a física do problema. Essa análise de convergência da malha também foi realizada por SAUER [3] para a malha gerada pelo código desenvolvido em FORTRAN, e essa malha foi utilizada para obtenção dos resultados numéricos da simulação em FORTRAN desta dissertação. A malha utilizada na simulação do FLUENT foi obtida utilizando o programa Ansys Meshing, e a análise de convergência foi verificada comparando o resultado de duas malhas, uma com 80×80 e outra com 100×100 . A figura 6.2 apresenta a comparação dos perfis de temperatura, velocidade axial e fração de mistura obtidos para as duas malhas. As maiores diferenças encontram-se na saída do queimador, onde a malha é menos refinada. Contudo, a maior diferença relativa entre as soluções não ultrapassa 0,3%, garantindo que os resultados obtidos com as duas malhas sejam semelhantes. Portanto, os resultados apresentados nas seções seguintes foram obtidos utilizando a malha 80×80 que fornece um resultado com boa acurácia e com um menor custo computacional. Em trabalhos futuros, é necessário a realização de uma análise de convergência mais detalhada, utilizando ao menos três malhas distintas com maior quantidades de volumes discretos.



(a)



(b)



(c)

Figura 6.2: Comparação dos perfis de (a) Temperatura, (b) Velocidade Axial, (c) Fração de Mistura ao longo do eixo de simetria obtidas utilizando malhas de 80×80 e 100×100 .

6.2 Chama Difusiva de Metano sem Aplicação do Campo Magnético

Nessa seção, os resultados da chama difusiva de metano obtidos por SAUER [3] no FORTRAN foram comparados com resultados numéricos [30][28] e experimental [5] da literatura, e com os resultados obtidos nessa dissertação utilizando o programa comercial FLUENT. Apesar do problema físico ser idêntico, existem considerações diferentes entre as simulações, como por exemplo, o método numérico e o modo como são consideradas as propriedades termodinâmicas da mistura. O objetivo principal dessa seção é comparar os resultados obtidos pelo programa comercial com o código programado em FORTRAN, atestando a qualidade da solução deste último.

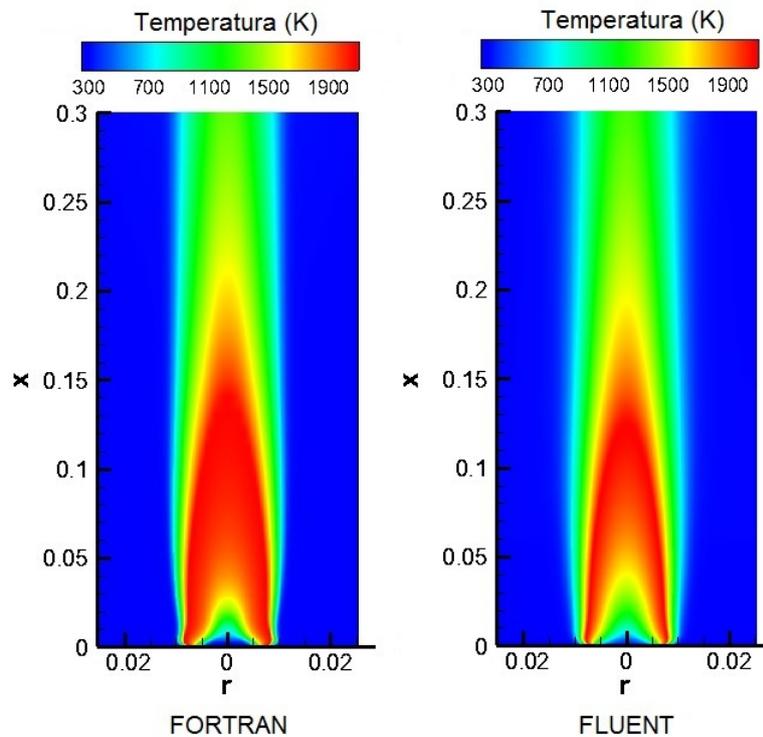


Figura 6.3: Comparação dos campos de temperatura entre os programas FORTRAN e FLUENT.

A comparação entre os campos de temperatura é apresentada na figura 6.3. A estrutura e o formato das chamas difusivas de metano são bem semelhantes, e apresentam faixas de temperatura parecidas, desde o valor dos reagentes, 298 K, até aproximadamente 2050 K. As maiores discrepâncias entre os campos de temperatura encontram-se na região de entrada de combustível, onde os resultados do código FORTRAN apresentam maiores gradientes de temperatura. Ou seja, nessa região a temperatura se eleva de maneira mais brusca do que no resultado do FLUENT, isso fica mais evidente na figura 6.4. Nessa figura são apresentados os perfis de temperatura ao longo do eixo de simetria. Contudo, nessa região de entrada, o resultado do

FLUENT consegue se aproximar mais da taxa de variação da temperatura obtida pelo resultado experimental. A altura de chama pode ser definida como a posição axial onde se encontra a maior temperatura na linha de centro, pois essa medida pode ser obtida experimentalmente com maior facilidade. A altura da chama obtida experimentalmente tem valor aproximado de 5,8 cm. Em seus estudos numéricos, XU e SMOOKE [28], TARHAN e SELÇUK [30] e SAUER [3] obtiveram a altura da chama igual a 7,6 cm, 12 cm e 14 cm, respectivamente. Nesse presente estudo utilizando o programa comercial, a altura da chama foi avaliada em aproximadamente 13 cm. Todos os estudos numéricos superestimaram a altura da chama obtida experimentalmente. Esse comportamento é característico do modelo de chama fina e é justificado pelo uso da taxa de reação infinita.

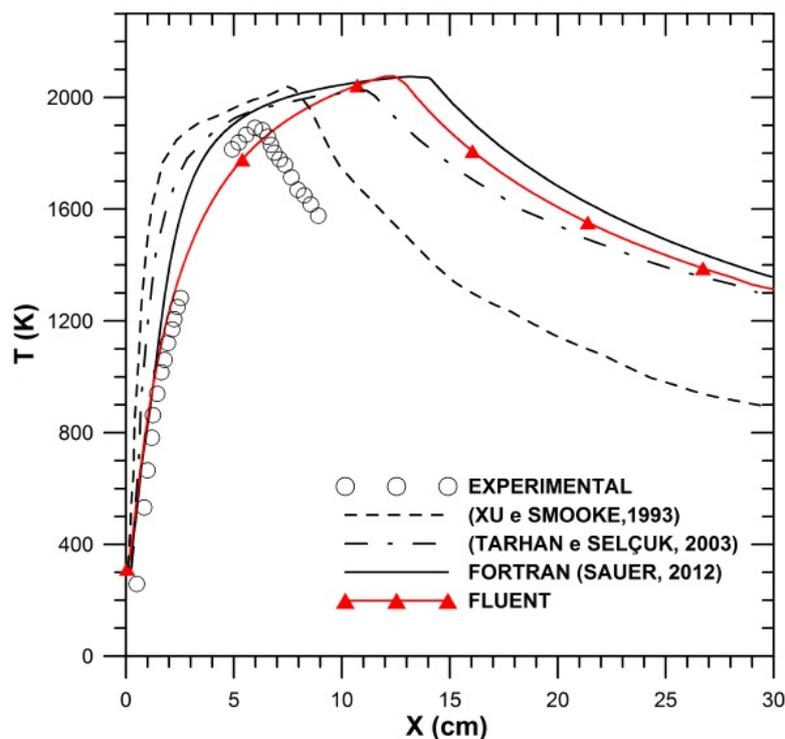


Figura 6.4: Comparativo dos perfis de temperatura ao longo do eixo de simetria. Símbolos: resultados experimentais (MITCHELL *et al.* [5],1980).

Os campos de velocidade axial da chama difusiva de metano obtidos numericamente utilizando o FORTRAN e o FLUENT são apresentados na Fig. 6.5. Comparando os dois resultados, em ambos os casos aparece uma região de maiores velocidades na saída do queimador, alcançando uma velocidade máxima em torno de 4,0 m/s. O escoamento reverso ocorre próximo à parede devido ao empuxo gravitacional, consequência do gradiente da massa específica da mistura que é gerado pela geração de calor da reação química. Assim, os efeitos da força de corpo gravitacional aceleram o escoamento no interior da chama, na medida que o ar entra no sistema pela saída do queimador para balancear a quantidade de movimento na entrada e

garantir a conservação da massa. Essa recirculação, que indica a intensificação do processo de convecção, causa o estreitamento e maior extensão da chama no sistema confinado [18].

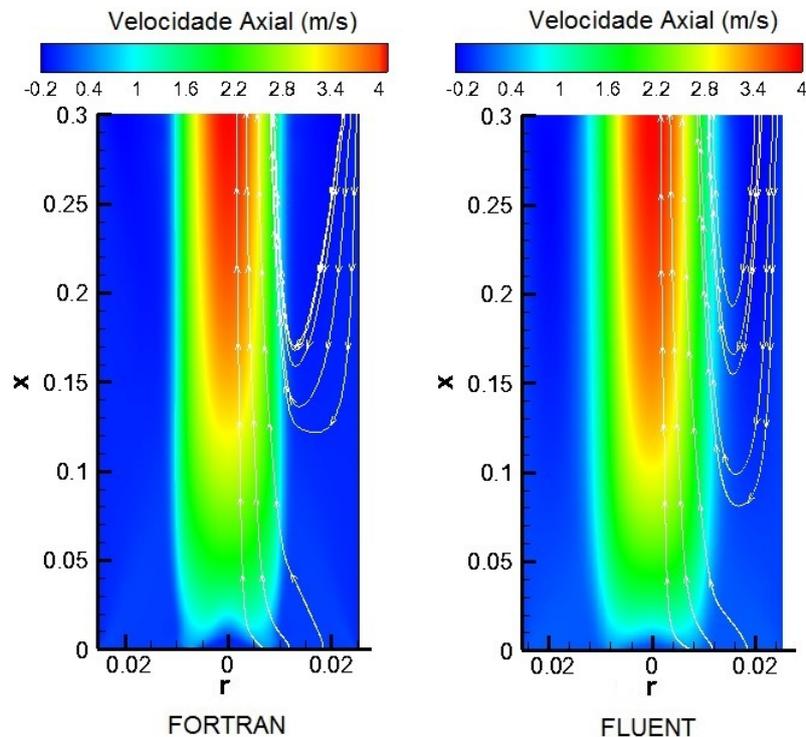


Figura 6.5: Comparação dos campos de velocidade axial e linhas de corrente entre os programas FORTRAN e FLUENT.

Os perfis de velocidade na direção radial em três posições axiais são apresentados na Fig. 6.6. Os resultados numéricos capturam a tendência dos resultados experimentais, mas superestimam os valores obtidos experimentalmente, principalmente na região do combustível. Esse comportamento é justificado pelas maiores temperaturas alcançadas pela chama com taxa de reação infinita que influencia diretamente na massa específica, aumentando a influência da força de corpo em relação ao experimento [3]. Os resultados do FLUENT se aproximam mais dos resultados experimentais, apresentando boa concordância principalmente na região da entrada do queimador ($x=1,2$ cm) e na região do oxidante. Todavia, nos resultados do FORTRAN, a velocidade axial decai mais rapidamente que a velocidade obtida experimentalmente.

Nas figuras 6.7, 6.8 e 6.9 são apresentados os perfis de temperatura, fração mássica de metano e fração mássica oxigênio em três posições axiais distintas. Na fig. 6.7 nota-se que os perfis de temperatura obtidos numericamente reproduzem com boa precisão os dados experimentais na região do oxidante, principalmente os perfis obtidos com o programa FLUENT. Novamente os resultados do FLUENT conseguem ter uma razoável concordância com os resultados experimentais,

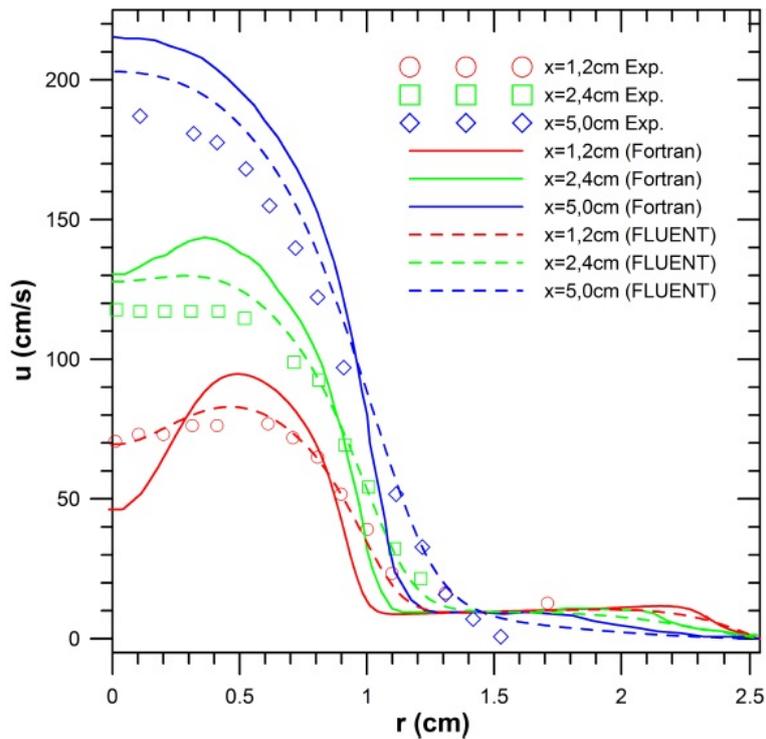


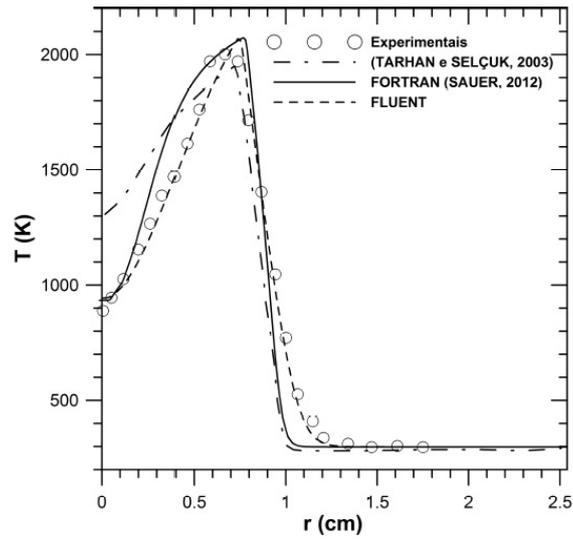
Figura 6.6: Comparativo dos perfis de velocidade axial nas posições axiais (a)1,2 cm; (b)2,4 cm; (c)5,0 cm. Símbolos: resultados experimentais (MITCHELL *et al.* [5],1980).

principalmente nas regiões da entrada do queimador (Fig.6.7a) e na região do oxidante. Na região do combustível, os resultados numéricos só são capazes de capturar a tendência dos resultados experimentais. Na maioria dos casos, os resultados numéricos superestimam a temperatura no interior da chama.

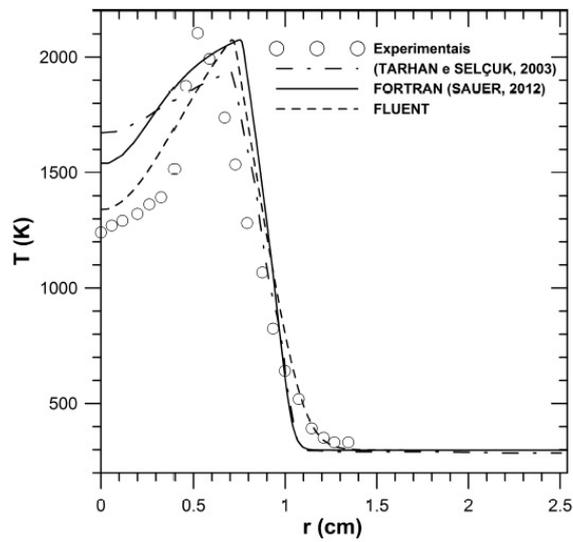
A figura 6.8 apresenta os perfis de metano em três posições axiais, indicando apenas a capacidade dos resultados numéricos em capturar a tendência dos resultados experimentais. Todos os resultados numéricos fornecem valores das frações mássicas de metano superiores ao valor obtido experimentalmente. Essa discrepância ocorre devido à utilização do modelo que considera o número de Lewis para todos os componentes da mistura igual a um. Outra característica observada no resultado do FLUENT e também nos resultados numéricos de XU e SMOOKE [28], de TARHAN e SELÇUK [30] e SAUER [3] é que todos estes superestimam a altura da chama. Por esse motivo nos resultados numéricos, existe a espécie metano na posição axial $x=5,0$ cm, na qual, nos resultados experimentais, não existe CH_4 presente nessa região (ver Fig. 6.8c). Novamente, os resultados apresentados na Fig. 6.9 mostra que o modelo utilizado nas simulações numéricas capturam qualitativamente a tendência dos resultados experimentais para a fração mássica de O_2 . Na região do oxidante, todos os resultados numéricos conseguem estimar com precisão os valores obtidos experimentalmente. Na interface, nas proximidades da superfície da chama,

os resultados numéricos do FLUENT representam melhor a realidade, se aproximando mais dos resultados experimentais de MITCHELL *et al.* [5]. Contudo, na região do combustível, os resultados da fração mássica de O_2 divergem do experimental devido a utilização do modelo de chama fina. Essa divergência ocorre pois o modelo de chama fina tem como hipótese a inexistência ou impenetrabilidade do oxidante no interior da chama.

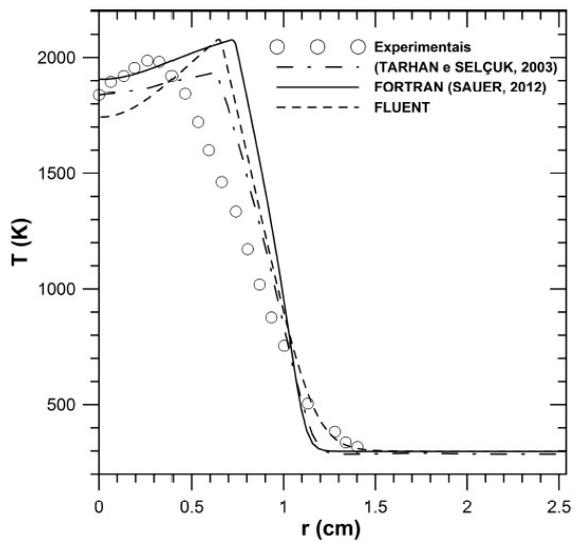
Os campos de temperatura, velocidade, frações mássicas e fração de mistura da chama difusiva de metano obtida numericamente com o programa FORTRAN são apresentados na Fig. 6.10. Os resultados obtidos com o código FORTRAN serão analisados no capítulo 7, onde será realizada uma comparação entre a chama difusiva de metano sem a aplicação do campo magnético, e com a aplicação de campos magnéticos com gradientes decrescente e crescente. Os perfis de temperatura, velocidade, frações mássicas e fração de mistura da chama difusiva de metano obtida numericamente com o programa FLUENT são apresentados na Fig. 6.11.



(a)

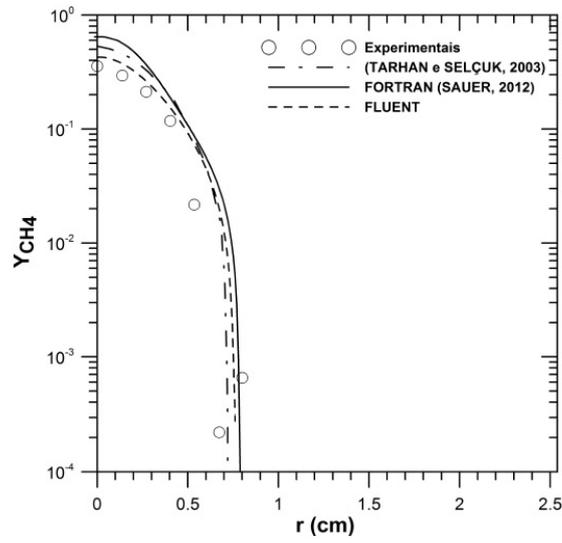


(b)

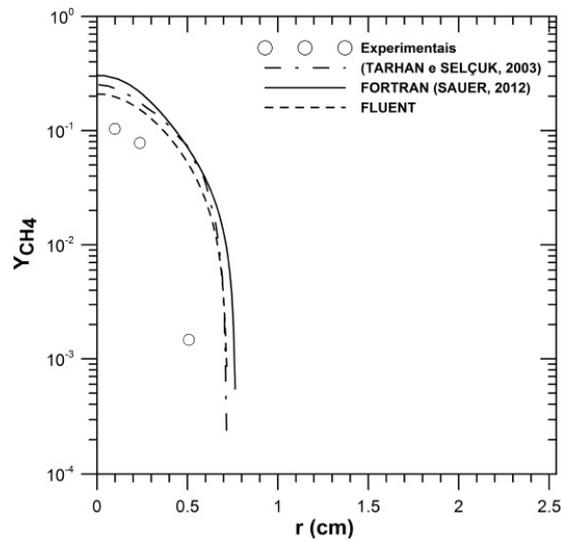


(c)

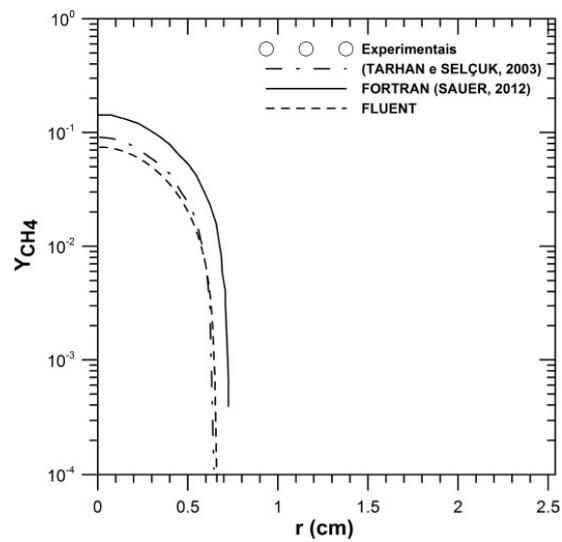
Figura 6.7: Comparativo dos perfis de temperatura nas posições axiais (a)1,2 cm; (b)2,4 cm; (c)5,0 cm. Símbolos: resultados experimentais (MITCHELL *et al.* [5],1980).



(a)

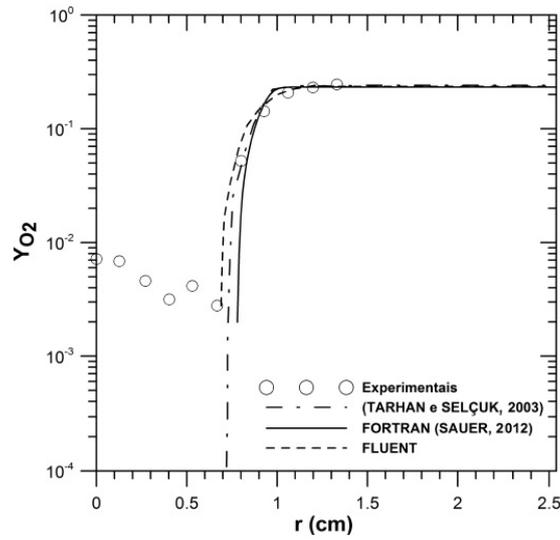


(b)

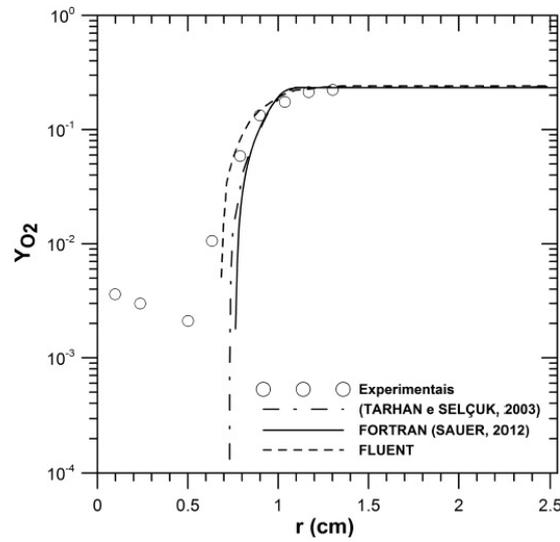


(c)

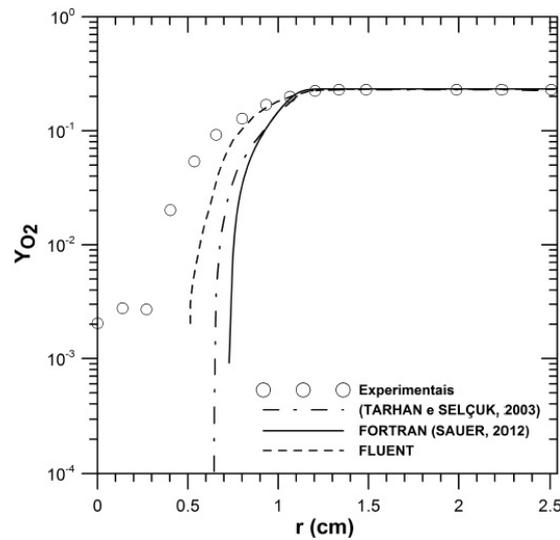
Figura 6.8: Comparativo dos perfis de fração mássica de CH_4 nas posições axiais (a)1,2 cm; (b)2,4 cm; (c)5,0 cm. Símbolos: resultados experimentais (MITCHELL *et al.* [5],1980).



(a)



(b)



(c)

Figura 6.9: Comparativo dos perfis de fração mássica de O_2 nas posições axiais (a)1,2 cm; (b)2,4 cm; (c)5,0 cm. Símbolos: resultados experimentais (MITCHELL *et al.* [5],1980).

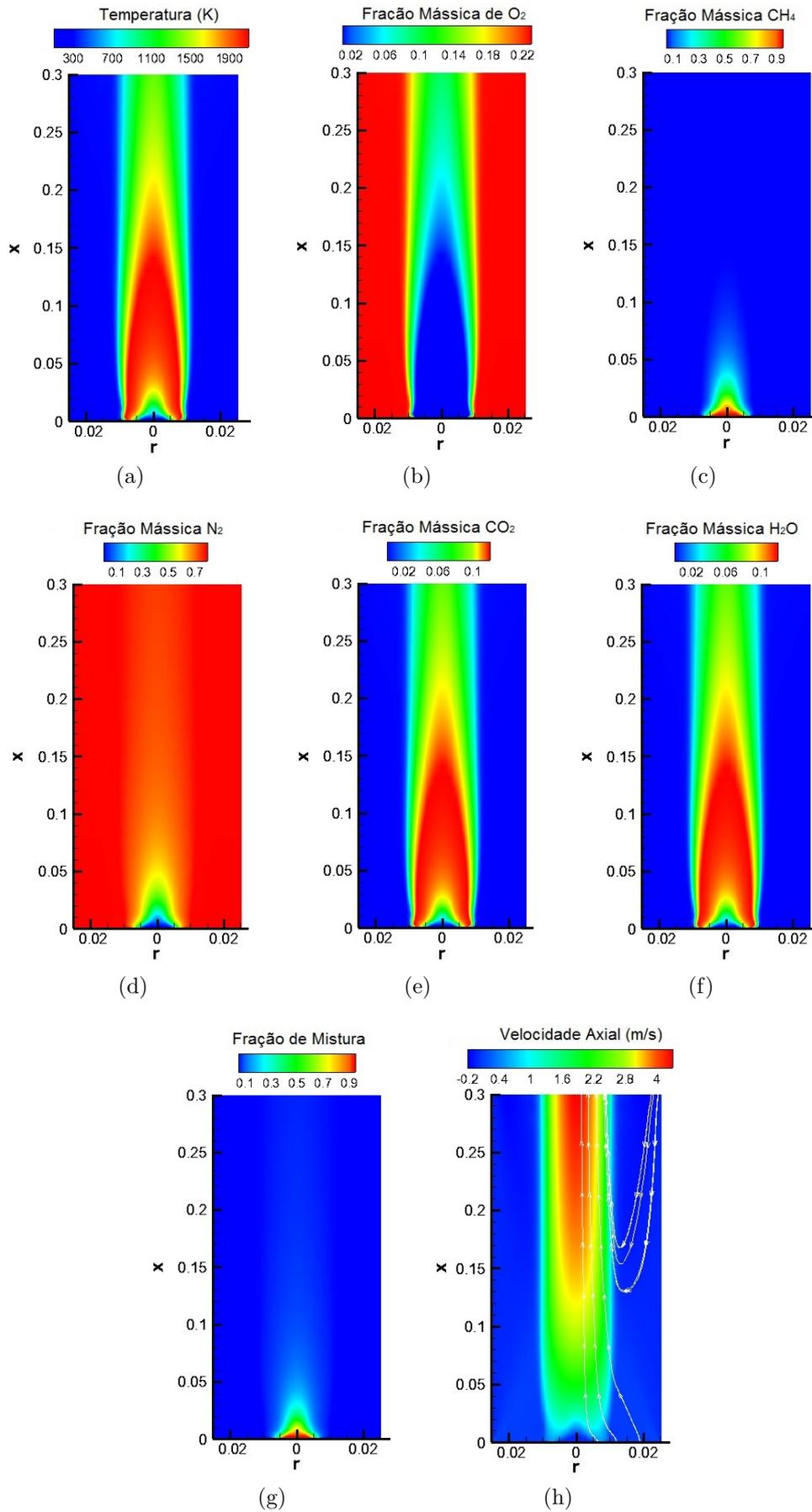


Figura 6.10: Perfis da chama de metano sem aplicação do campo magnético obtidos com o programa FORTRAN.

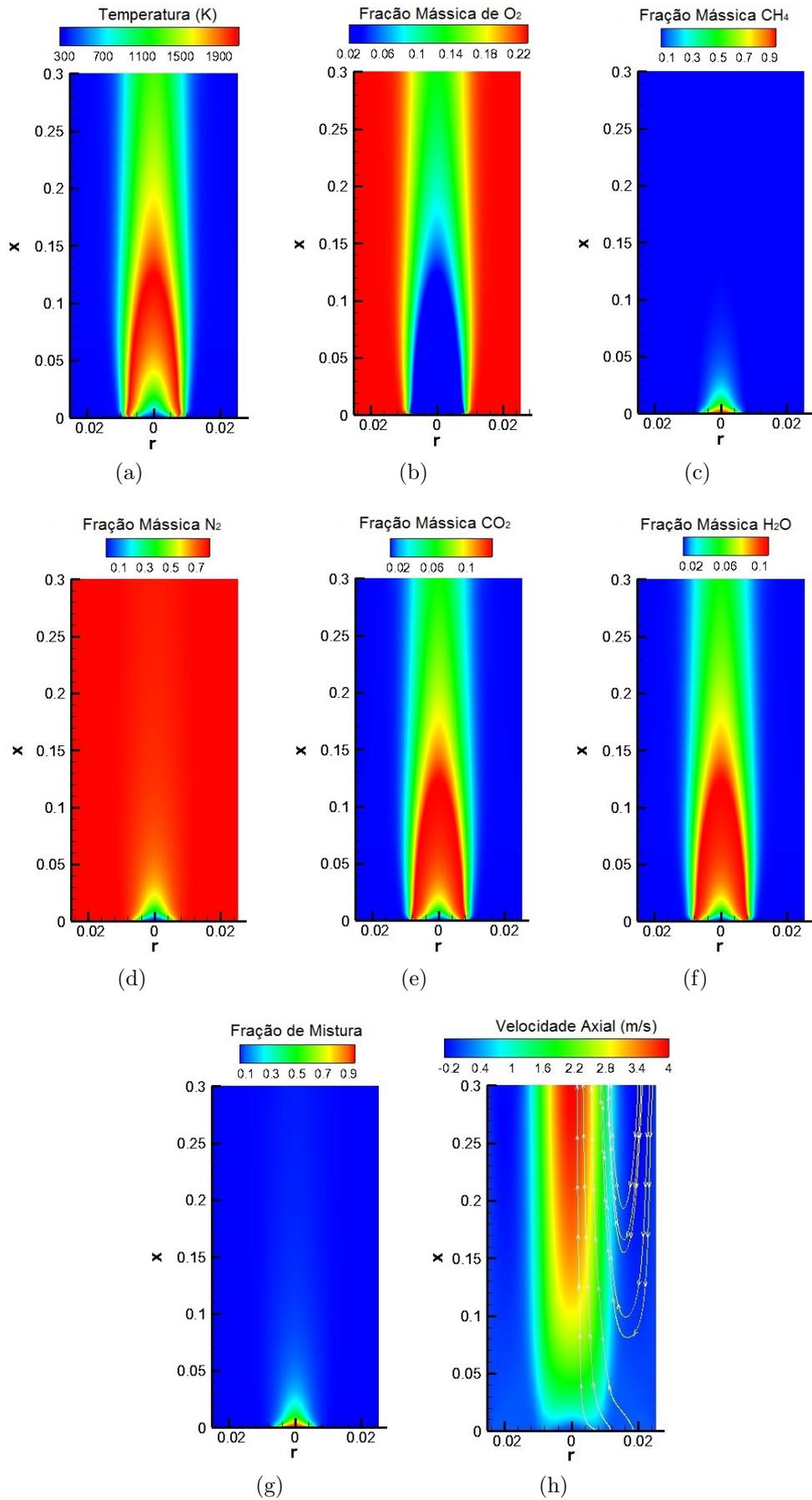


Figura 6.11: Perfis da chama de metano sem aplicação do campo magnético obtidos com o programa FLUENT.

6.3 Chama Difusiva de Metano com Campo Magnético Decrescente

Os resultados da chama difusiva de metano sem a aplicação do campo magnético analisados na seção anterior foram obtidos através do código FORTRAN programado por SAUER [3] e pelo programa comercial FLUENT 15.0. Contudo, para implementação do campo magnético foram feitas alterações no código do SAUER [3] e no programa FLUENT. Para implementação do campo magnético no programa FLUENT 15.0 foi acrescentando uma força de corpo na equação de quantidade de movimento através de uma função definida pelo usuário (*UDF - User Defined Functions*). Essa função é uma rotina externa em linguagem C, que se comunica com o Fluent dando ao usuário uma maior flexibilidade na simulação. Utilizando esse artifício também é possível definir funções para as condições de contorno, propriedades do fluido, entre outras.

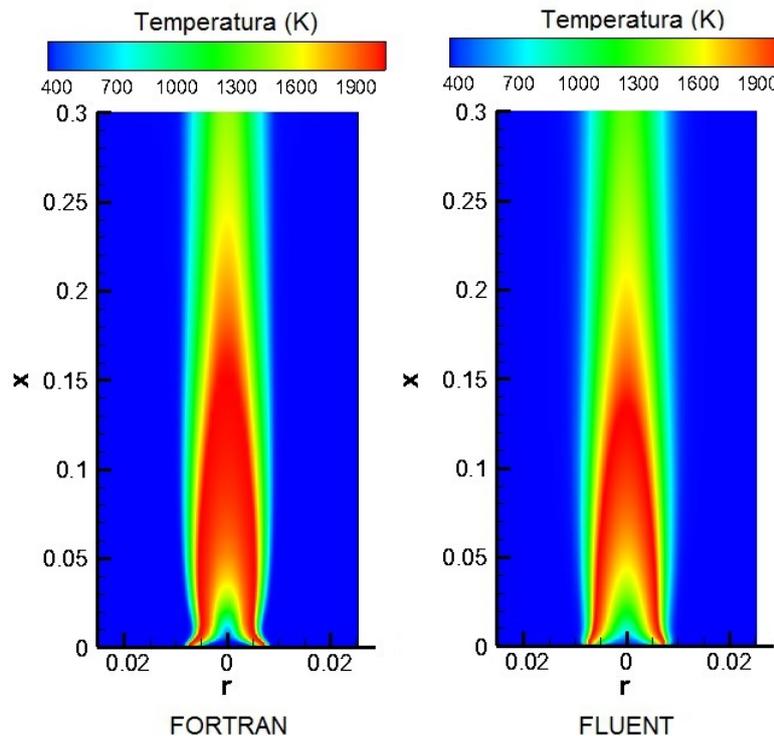


Figura 6.12: Comparação dos campos de temperatura da chama de metano entre os programas FORTRAN e FLUENT quando aplicado um campo magnético decrescente ($B \frac{dB}{dx} = -40 \text{ T}^2/m$).

A comparação dos campos de temperatura da chama de metano entre os programas FORTRAN e FLUENT, quando aplicado um campo magnético decrescente, são apresentados na Fig. 6.12. O campo de temperatura das chamas apresentaram a mesma estrutura e faixas de temperatura iguais. Em ambos os resultados as chamas sofreram modificações semelhantes em seu formato, a principal e mais evidente delas

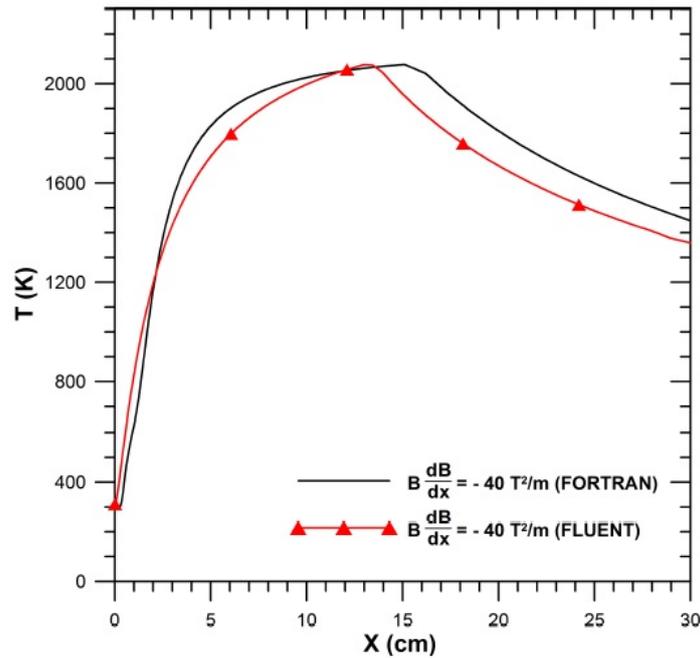


Figura 6.13: Comparativo dos perfis de temperatura ao longo do eixo de simetria de uma chama de metano sob ação de um campo magnético decrescente ($B \frac{dB}{dx} = -40 \text{ T}^2/m$).

é a diminuição da largura da chama. O campo magnético decrescente contribui para a convecção e difusão das espécies na direção radial, carregando o oxigênio para a zona de reação, e assim, diminuindo o diâmetro da chama. Visualmente as chamas tem diferenças no gradiente de temperatura, que podem ser melhor visualizadas na Fig.6.13. Essa figura apresenta uma comparação entre os perfis de temperatura ao longo do eixo de simetria obtidos através do FORTRAN e FLUENT. Considerando a altura da chama a posição axial onde se observa a maior temperatura, os dois programas apresentaram alturas da chama maiores do que as alturas observadas sem campo magnético. Enquanto nos resultados do FORTRAN a altura da chama foi de 15,8 cm, no FLUENT a altura da chama obtida foi de aproximadamente 14 cm.

A figura 6.14 apresenta uma comparação entre os campos de velocidade axial da chama de metano obtidos pelo código em FORTRAN e o programa FLUENT. A estrutura dos campos de velocidade axial do FORTRAN e FLUENT são semelhantes entre si, e quando comparados a chama de metano sem aplicação de campo magnético, apresentam maiores velocidade axiais. Analisando os campos e as linhas de corrente percebe-se a existência de uma zona de recirculação do ar que entra pela saída do queimador, alimentando a chama, e comprimindo-a. O campo magnético decrescente estimula esse processo de convecção, melhorando a mistura na reação de combustão. Esse aumento da convecção pode ser notado devido as maiores velocidades máximas atingidas pela chama de metano em um campo magnético decrescente.

Enquanto sem a aplicação do campo as maiores velocidades na saída do queimador foram de aproximadamente $4,0 \text{ m/s}$, com a aplicação do campo magnético decrescente as velocidades na saída do queimador atingem $7,0 \text{ m/s}$. Esses resultados indicam que a utilização de um campo magnético decrescente fomenta a zona de reação com mais oxidante, gera uma zona de recirculação próximo à parede e acelera o escoamento reativo. A literatura fundamenta que esses fenômenos também são gerados devido ao empuxo gravitacional. Assim, utilizando uma campo magnético decrescente, as forças gravitacionais e magnéticas contribuem positivamente para o processo de convecção e para otimização do escoamento reativo.

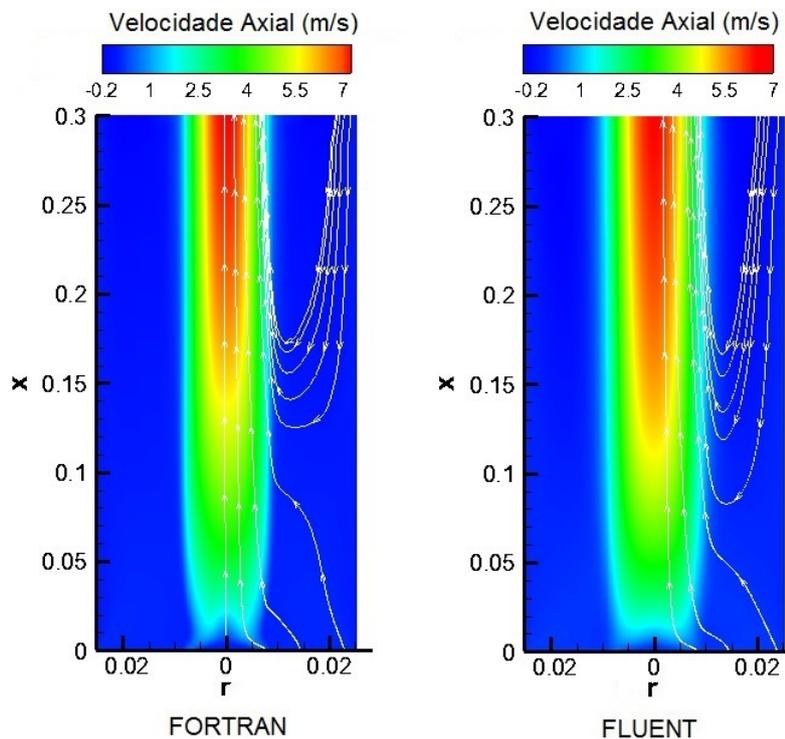


Figura 6.14: Comparação dos campos de velocidade axial da chama de metano entre os programas FORTRAN e FLUENT quando aplicado um campo magnético decrescente ($B \frac{dB}{dx} = -40 \text{ T}^2/m$).

Os campos de temperatura, velocidade, frações mássicas e fração de mistura da chama difusiva de metano sob influência de um campo magnético decrescente obtidos numericamente com o programa FORTRAN são apresentados na Fig. 6.15. Os resultados obtidos com o código FORTRAN serão analisados no capítulo 7, onde será realizada uma comparação entre a chama difusiva de metano sem a aplicação do campo magnético, e com a aplicação de campos magnéticos com gradientes crescente e decrescente. Os campos de temperatura, velocidade, frações mássicas e fração de mistura da chama de metano em um campo magnético decrescente obtidos com o programa FLUENT são apresentados na Fig. 6.16.

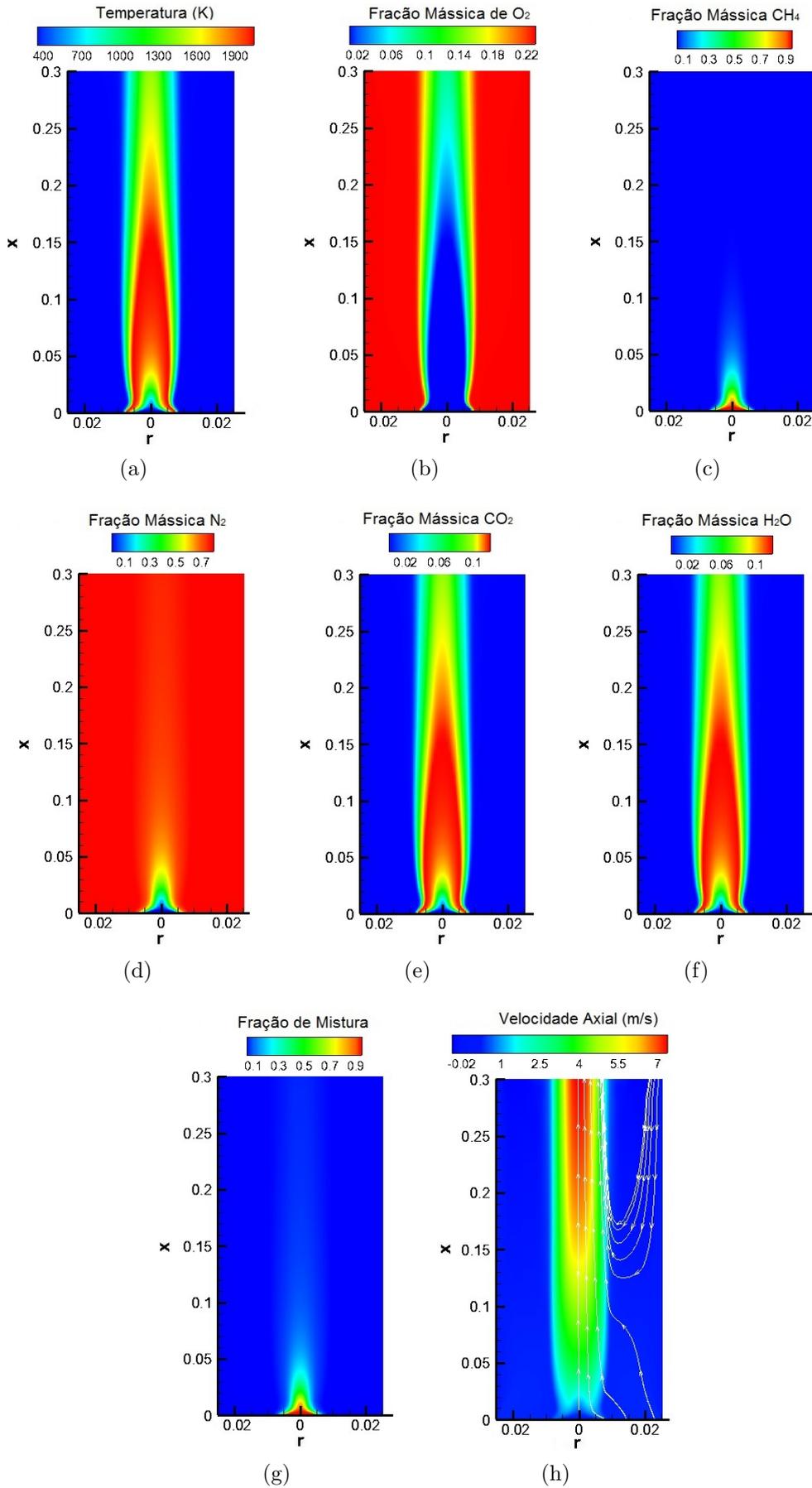


Figura 6.15: Perfis da chama de metano em um campo magnético decrescente obtidos com o programa FORTRAN ($B \frac{dB}{dx} = -40 \text{ T}^2/m$).

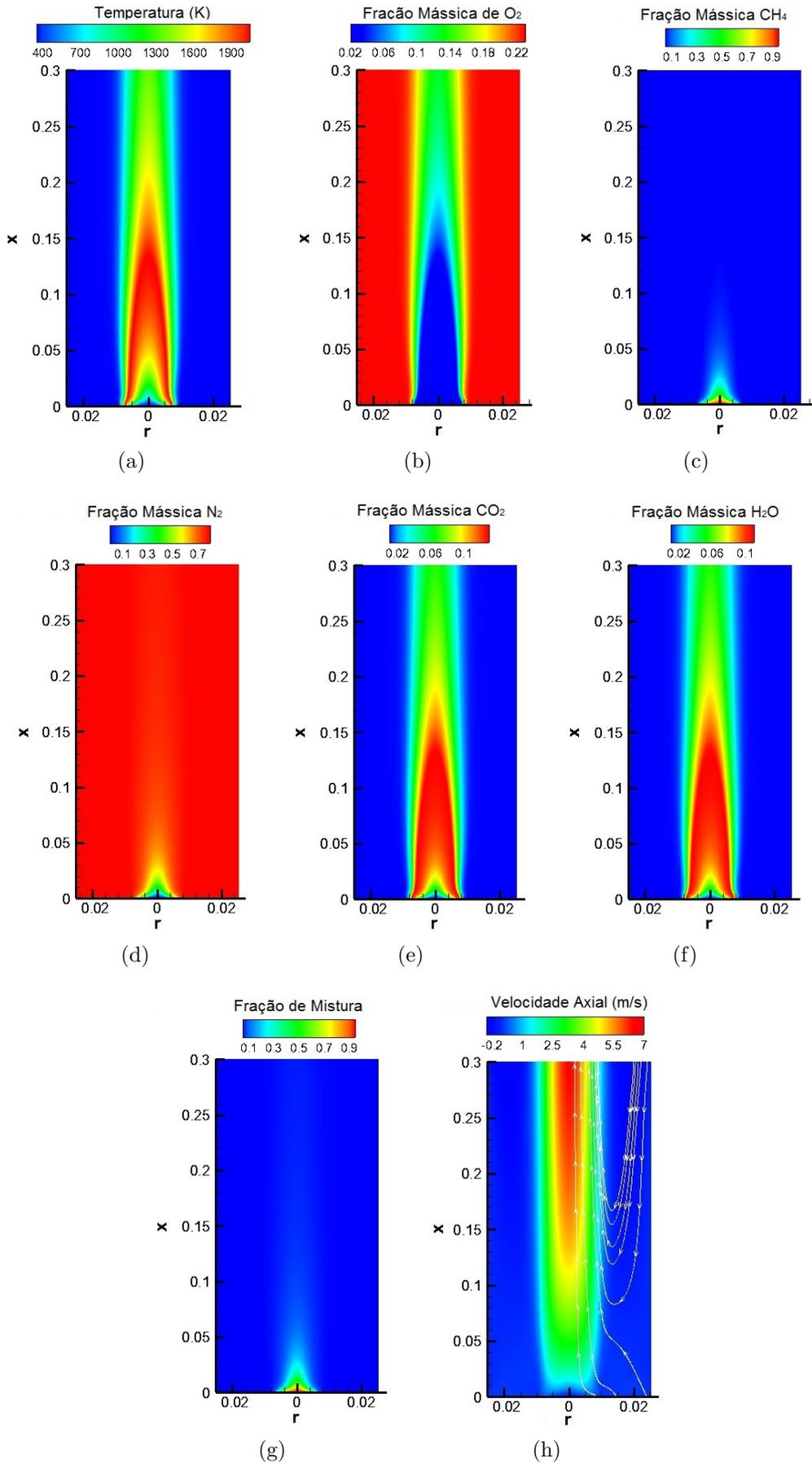


Figura 6.16: Perfis da chama de metano em um campo magnético decrescente obtidos com o programa FLUENT ($B \frac{dB}{dx} = -40 \text{ T}^2/m$).

6.4 Chama Difusiva de Metano com Campo Magnético Crescente

O campo magnético crescente atuando no escoamento reativo foi modelado da mesma maneira do campo decrescente, descrito na seção anterior. Foi acrescentado uma força de corpo na equação de quantidade de movimento tanto no código FORTRAN quanto no programa FLUENT. Com esse campo magnético crescente modelado, a figura 6.17 apresenta a comparação dos campos de temperatura da chama de metano entre os programas FORTRAN e FLUENT. A aplicação de um campo magnético crescente altera consideravelmente o formato da chama difusiva, e essa modificação na forma pode ser visualizada nos resultados dos dois programas. A chama difusiva diminui de tamanho, fica mais espessa, com um formato mais arredondado, como chamas situadas em ambientes de microgravidade. De forma geral, esse comportamento pode ser explicado devido a diminuição da convecção provocada pela aplicação do campo magnético crescente, mesmo em gravidade normal.

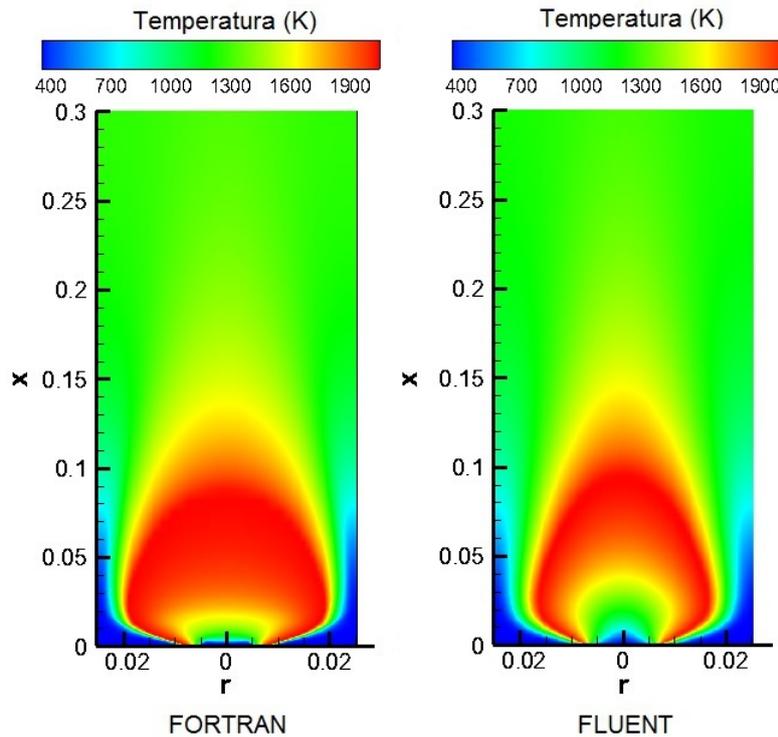


Figura 6.17: Comparação dos campos de temperatura da chama de metano entre os programas FORTRAN e FLUENT quando aplicado um campo magnético crescente ($B \frac{dB}{dx} = +40 \text{ T}^2/m$).

A força magnética atrai o oxigênio para as maiores intensidades do campo, no sentido oposto ao da zona de reação, fazendo com que não exista uma zona de recirculação e a chama não tenha um formato mais alongado. Dessa forma, a aplicação do campo magnético crescente contribui negativamente para o processo de convecção,

e dependendo da intensidade do campo pode até mesmo extinguir a chama.

Na Fig. 6.17 as maiores diferenças entre os resultados do FLUENT e FORTRAN se situam na região de entrada do combustível, onde o gradiente de temperatura é maior no resultado obtido pelo código FORTRAN. Essa característica da solução também pode ser visualizada na Fig. 6.18, onde a inclinação na região de entrada é maior para a solução obtida pelo FORTRAN. Nessa figura 6.18 é apresentado um comparativo dos perfis de temperatura ao longo do eixo de simetria de uma chama de metano sob ação de um campo magnético crescente. Nesta figura constata-se grandes diferenças de temperatura na região da entrada entre as duas soluções, porém temperaturas mais próximas na saída do queimador. Houve uma grande diminuição da altura da chama tanto para a solução do FORTRAN quanto para a solução do FLUENT. Utilizando o código FORTRAN, a altura da chama tem valor de 8,7 cm, e o programa FLUENT retornou a altura da chama igual a 9,0 cm, aproximadamente.

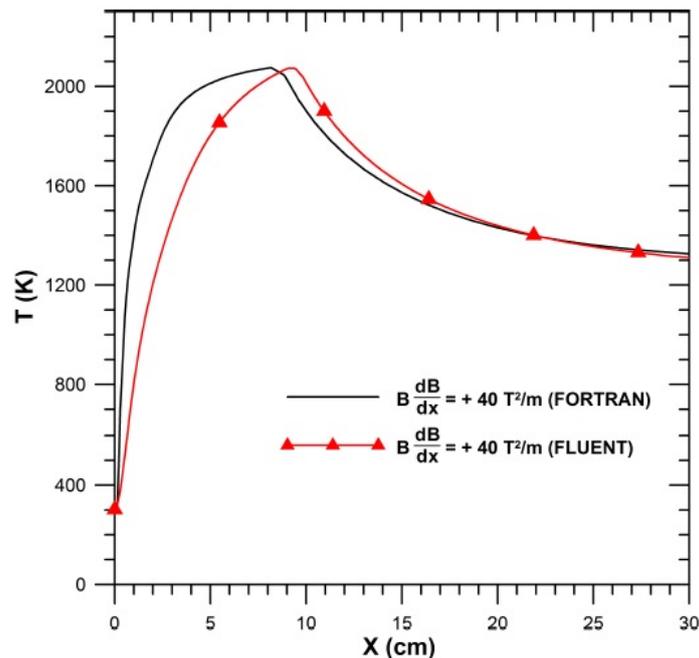


Figura 6.18: Comparativo dos perfis de temperatura ao longo do eixo de simetria de uma chama de metano sob ação de um campo magnético crescente ($B \frac{dB}{dx} = +40 \text{ T}^2/m$).

A Fig. 6.19 apresenta a comparação dos campos de velocidade axial da chama de metano entre os programas FORTRAN e FLUENT. Comparativamente, o campo de velocidade axial e as linhas de corrente apresentam boa concordância, mesma estrutura, e as velocidades axiais encontram-se na mesma faixa entre os resultados obtidos pelo FLUENT e FORTRAN. Como explicado anteriormente, a aplicação do campo magnético crescente diminuem a convecção e o empuxo gerados no escoamento. As velocidades axiais atingidas são bem menores do que nos outros dois casos do campo

magnético. Em geral, pode-se concluir que existem dois empuxos, um gerado pela força gravitacional e o outro gerado por forças magnéticas. Quando não é aplicado nenhum campo magnético, apenas o empuxo gravitacional estimula a convecção e a difusão radial das espécies. Aplicando um campo magnético decrescente, tanto o empuxo gravitacional quanto o empuxo magnético contribuem positivamente para o processo de convecção, aumentando a velocidade do escoamento. Contudo, em um campo magnético crescente, o empuxo magnético contribui negativamente para o processo de convecção, o que diminui consideravelmente as velocidades axiais.

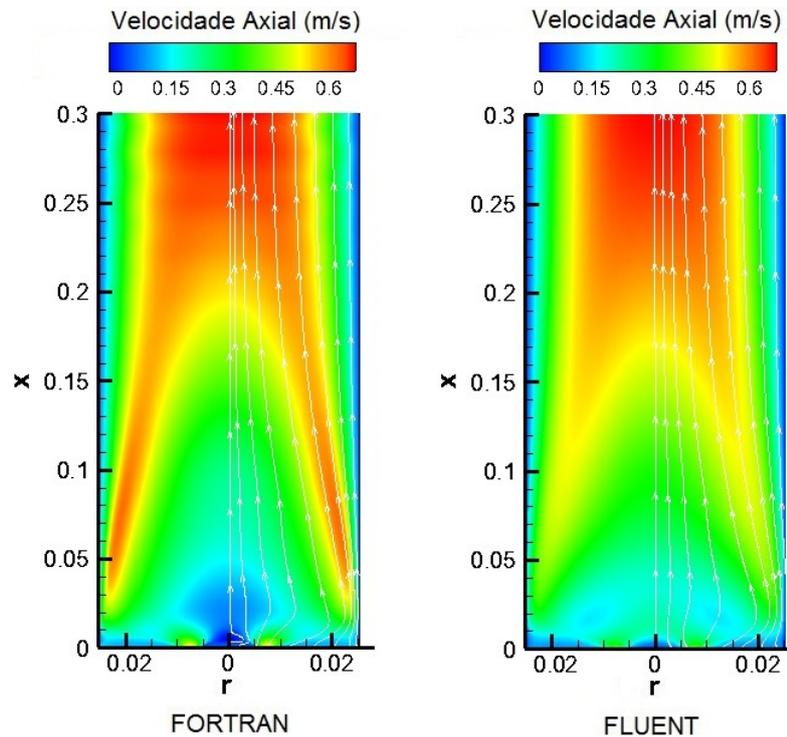


Figura 6.19: Comparação dos campos de velocidade axial da chama de metano entre os programas FORTRAN e FLUENT quando aplicado um campo magnético crescente ($B \frac{dB}{dx} = +40 \text{ T}^2/m$).

Os campos de temperatura, velocidade, frações mássicas e fração de mistura da chama difusiva de metano sob influência de um campo magnético crescente obtidos numericamente com o programa FORTRAN são apresentados na Fig. 6.20. Os resultados obtidos com o código FORTRAN serão analisados no capítulo 7, onde será realizada uma comparação entre a chama difusiva de metano sem a aplicação do campo magnético, e com a aplicação de campos magnéticos com gradientes crescente e decrescente. Utilizando o programa FLUENT, os campos de temperatura, velocidade, frações mássicas e fração de mistura da chama de metano em um campo magnético decrescente são apresentados na Fig. 6.21.

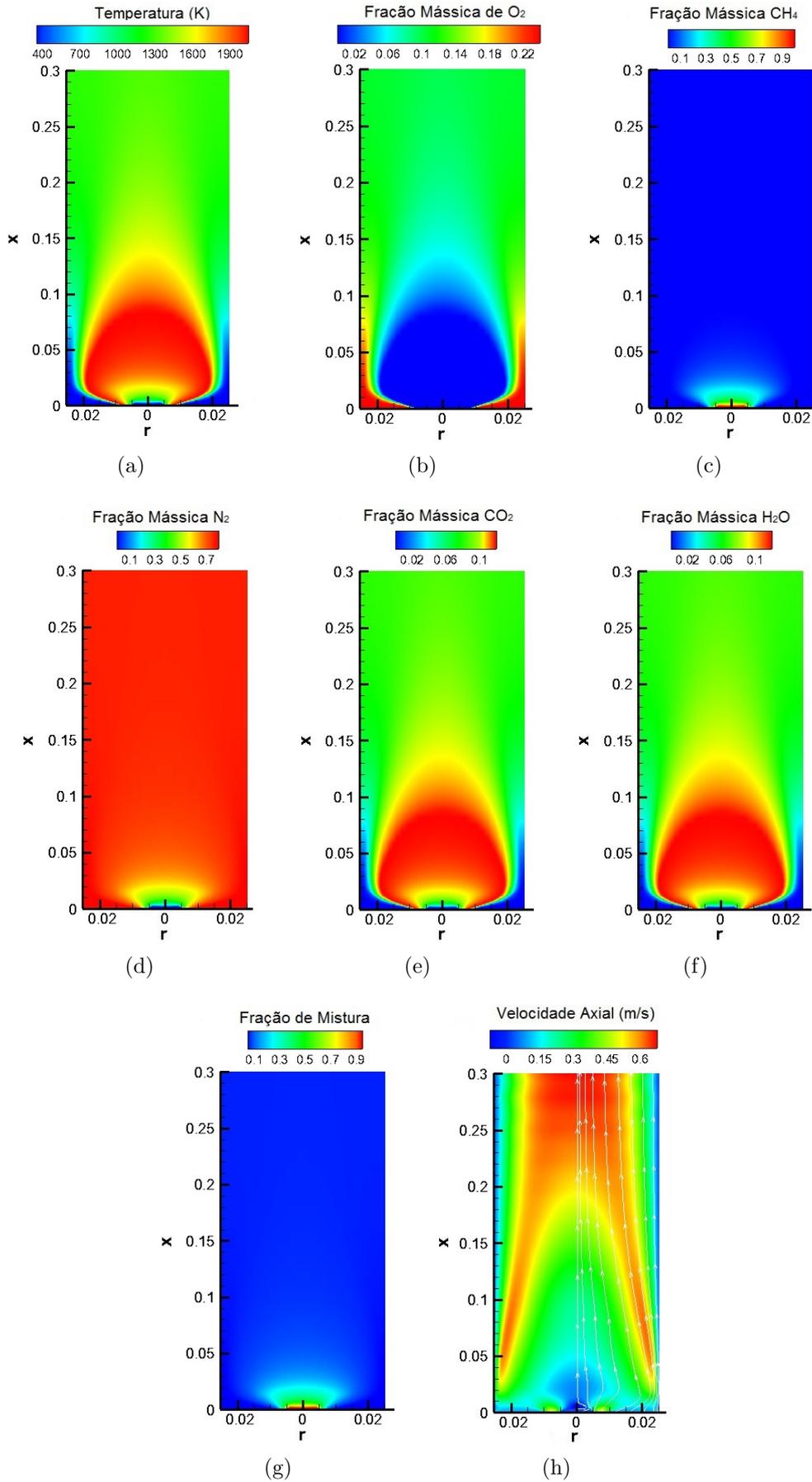


Figura 6.20: Perfis da chama de metano em um campo magnético crescente obtidos com o programa FORTRAN ($B \frac{dB}{dx} = +40 \text{ T}^2/m$).

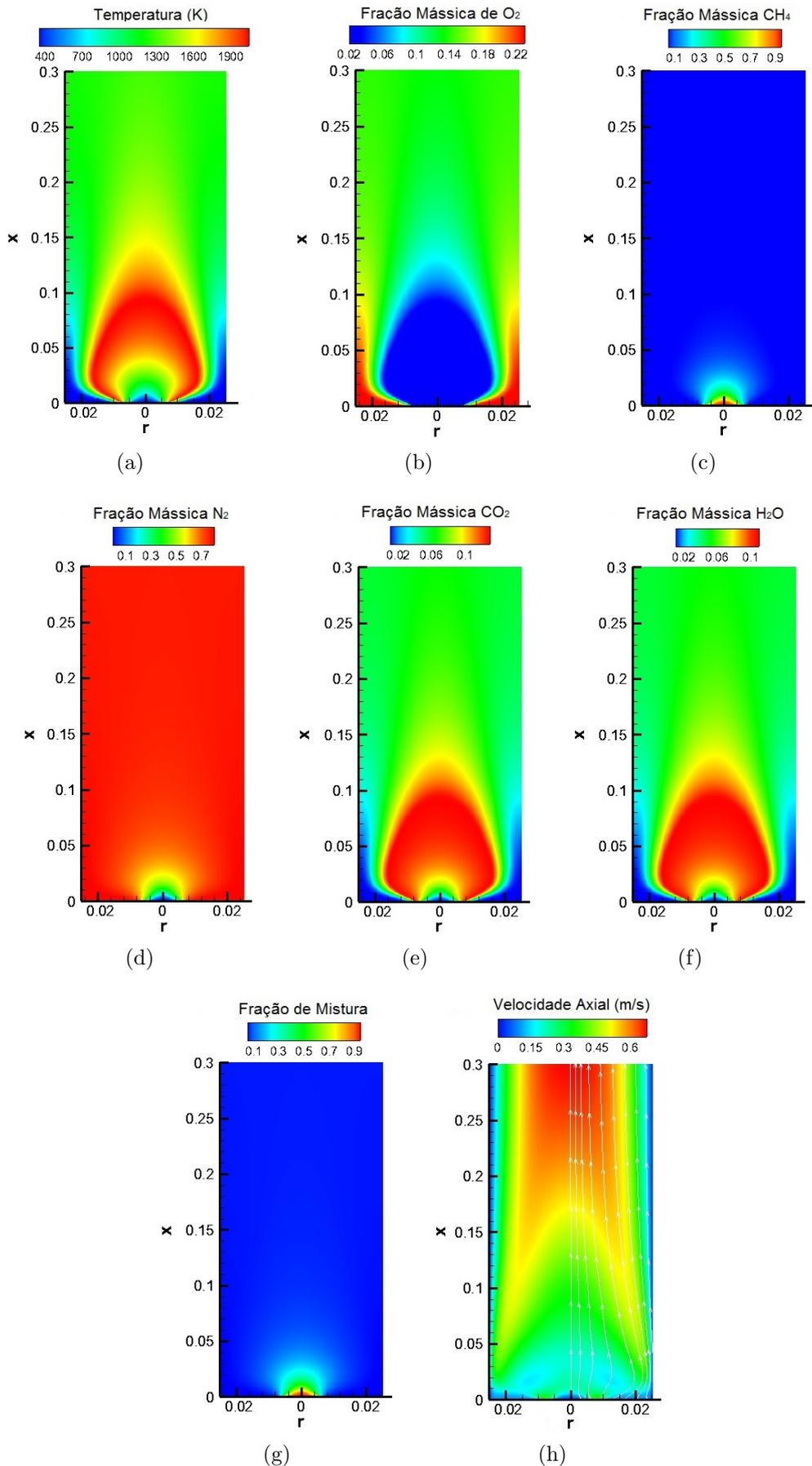
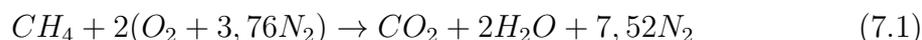


Figura 6.21: Perfis da chama de metano em um campo magnético crescente obtidos com o programa FLUENT ($B \frac{dB}{dx} = +40 \text{ T}^2/m$).

Capítulo 7

Chama Difusiva de Metano

No capítulo anterior foi realizada a comparação dos resultados da chama difusiva de metano obtidos pelo código desenvolvido em FORTRAN com o programa comercial FLUENT 15.0. O código FORTRAN apresentou a capacidade de obter resultados para a combustão da chama difusiva com boa concordância com resultados numéricos da literatura e do FLUENT. Assim, o código desenvolvido em FORTRAN será utilizado na obtenção dos resultados desse capítulo e dos próximos. Utilizando o código FORTRAN, a seguinte reação global de passo único foi considerada para obtenção dos resultados da simulação da chama difusiva de metano:



A altura da chama pode ser definida como a posição axial onde se localiza a maior temperatura ao longo do eixo de simetria, em virtude de ser possível obter essa medida experimentalmente. Assim, observando a figura 7.1, a altura da chama é determinada analisando em qual posição axial a chama atinge a temperatura máxima. A chama sem a aplicação do campo magnético apresenta altura igual a 14 cm [3]. Quando foi aplicado o campo magnético decrescente(a) a altura da chama teve um pequeno aumento atingindo 15,8 cm, e na presença do campo crescente(c) a chama diminuiu consideravelmente para 8,7 cm. Considerando que o aumento da transferência de calor de um queimador industrial para outros sistemas está diretamente relacionada com as velocidades e temperaturas dos gases de exaustão, pode-se inferir sobre a eficiência de um queimador com a aplicação de campos magnéticos. Com a aplicação de um campo magnético de gradiente crescente, após atingir o pico de temperatura, os valores das temperaturas decaem mais rapidamente do que nos outros dois casos, indicando que essa condição(c) é ineficiente para um queimador. Já a utilização de um campo magnético decrescente(b), apresenta maiores temperaturas dos gases de exaustão ao longo do eixo de simetria, assim essa condição é ideal para aumentar a eficiência do queimador em transferir

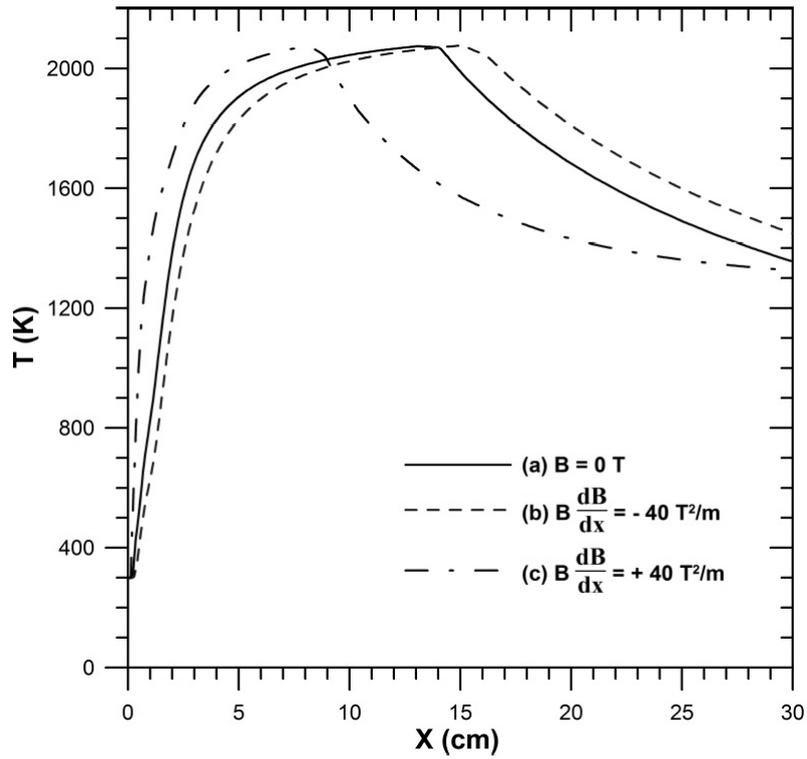


Figura 7.1: Comparativo dos perfis de temperatura ao longo do eixo de simetria da chama de metano.

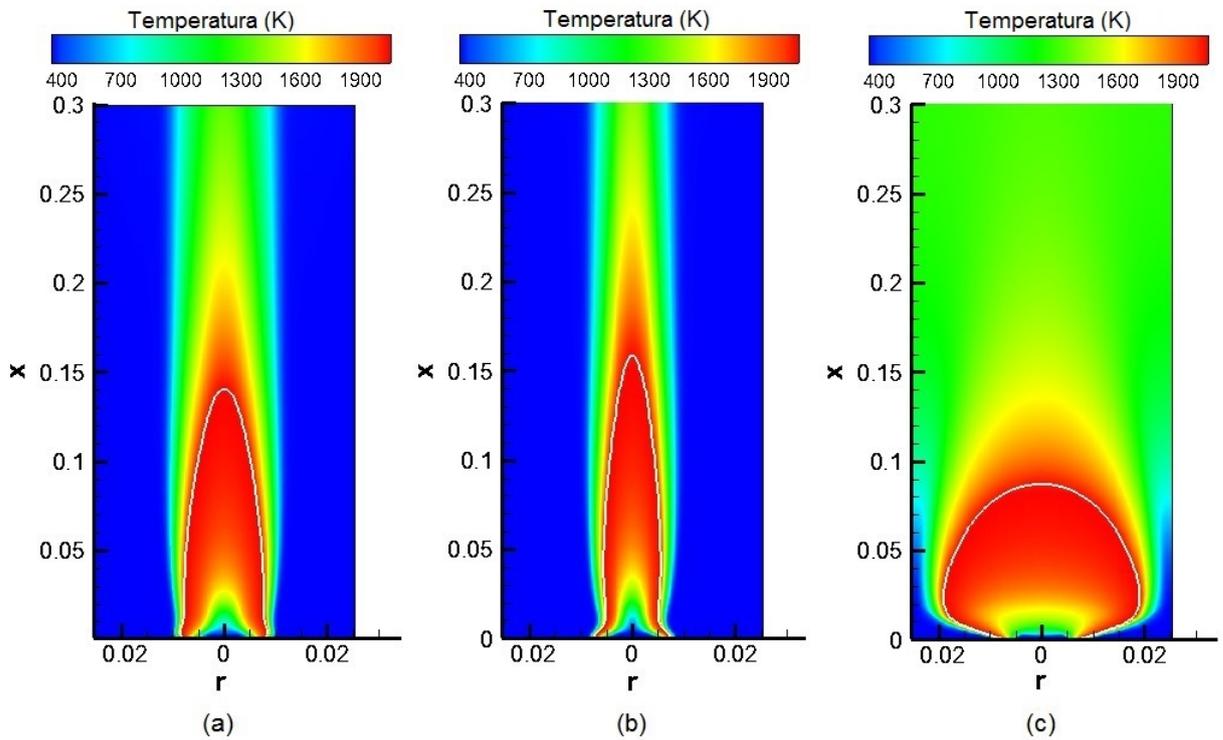


Figura 7.2: Perfis de temperatura e posição da chama de metano. Em (a) $B = 0$, (b) campo magnético decrescente, e (c) campo magnético crescente.

energia na forma de calor. A figura 7.2 apresenta uma comparação dos campos de temperatura e posição da chama de metano nas três condições do campo magnético. Nessa comparação pode ser observado que as maiores temperaturas dos gases de exaustão na saída do queimador ocorrem quando aplicado um campo magnético com gradiente decrescente. Essa condição do campo também contribui para um estreitamento da chama, afastando a chama da parede fria do queimador, como é observado em chamas sobreventiladas.

Na figura 7.3 é apresentado o perfil da fração de mistura e a posição da chama, obtida através da equação 4.46.

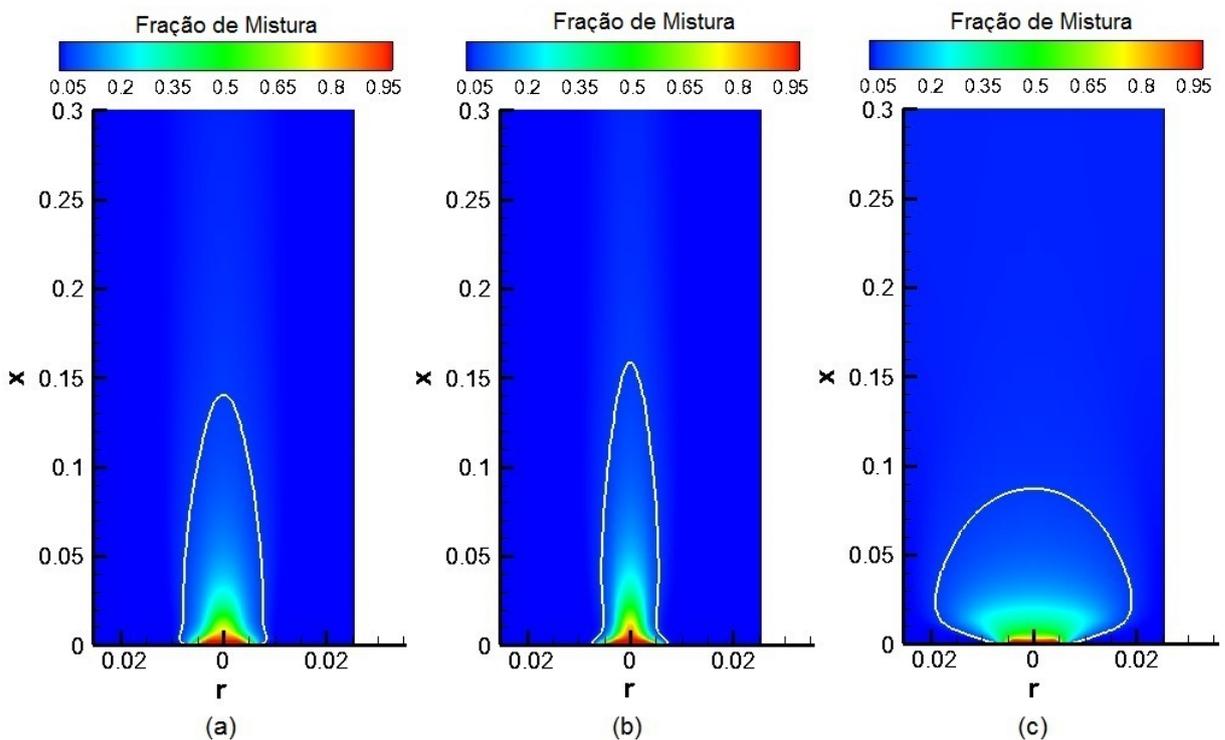


Figura 7.3: Perfis da fração de mistura e posição da chama de metano. Em (a) $B = 0$, (b) campo magnético decrescente, e (c) campo magnético crescente.

Analisando a posição da chama, pode ser observado que quando foi aplicado um campo magnético crescente(c) a chama se tornou menor, mais espessa, com sua superfície se aproximando da parede do queimador. Esse formato da chama também foi observado por outros pesquisadores [21][2], e se aproxima da definição de chama subventilada apresentada por BURKE e SCHUMANN [25], na qual a superfície da chama se aproxima da parede do queimador e a chama diminui de altura. Na presença do campo magnético decrescente(b) a chama tornou-se mais fina, alongada e maior, diferente de alguns estudos com campo magnético que apresentaram que a chama se torna mais fina, contudo diminui de tamanho. Esse aumento do tamanho da chama pode ser explicado, pois diferentemente dos experimentos realizados por

WAKAYAMA e outros pesquisadores, nessa simulação duas correntes são forçadas no interior do queimador: as correntes de combustível e oxidante. Nos trabalhos de WAKAYAMA, somente a corrente do combustível é forçada e o oxidante não é injetado no queimador. Dessa forma, a quantidade de movimento do oxidante na direção axial é muito menor quando comparada à esse estudo, contribuindo para diminuir a altura da chama. A chama difusiva sujeita a um campo magnético decrescente se torna mais fina, pois o escoamento do oxigênio paramagnético é induzido em direção a zona de reação, diminuindo a largura de chama (W_f). Essa indução radial do escoamento do ar em direção a zona de reação é consequência do aumento das velocidades axiais gerado pelo empuxo magnético. Assim, por conservação de massa, o aumento das velocidades axiais faz com que o oxigênio seja carregado radialmente na direção da zona de reação. O aumento da altura da chama também deve-se ao coeficiente estequiométrico mássico que é utilizado no modelo de chama fina. Neste modelo, o coeficiente estequiométrico mássico é constante e indica a massa de oxigênio que deve ser consumida por unidade mássica de combustível queimado. Assim, como esse coeficiente é constante e a reação ocorre na superfície da chama, a redução da largura da chama implica no aumento da altura da mesma.

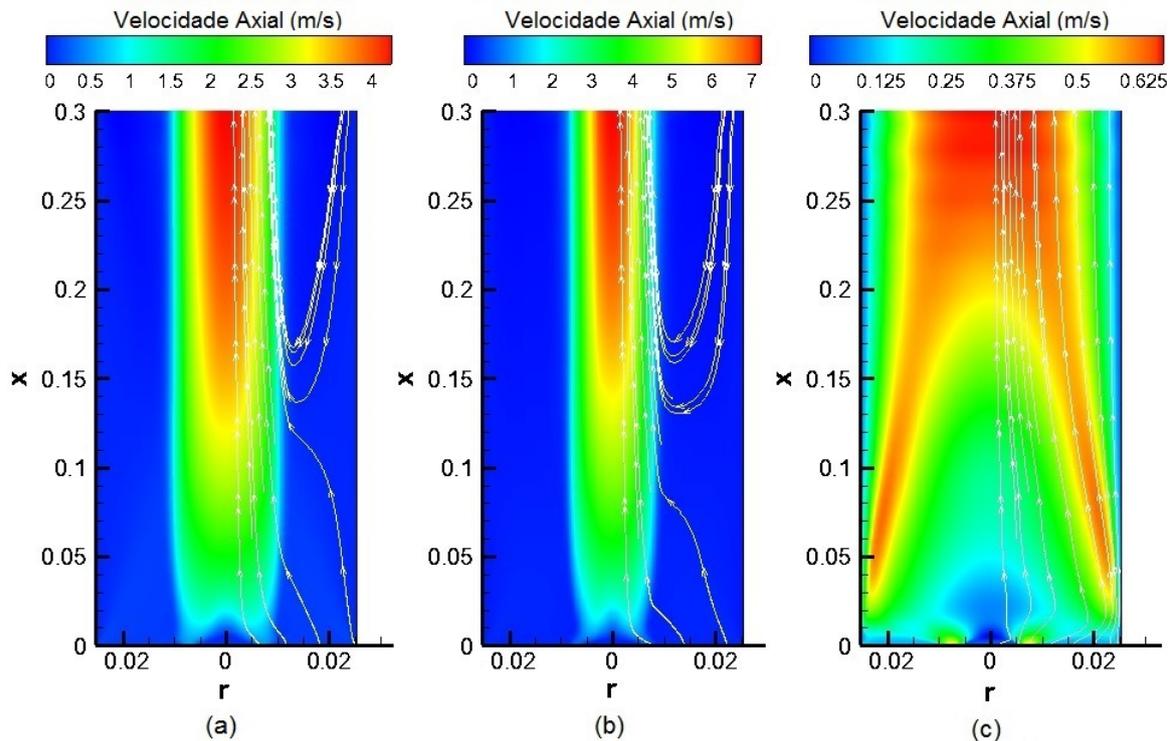


Figura 7.4: Perfis da velocidade axial e linhas de corrente da chama de metano. Em (a) $B = 0$, (b) campo magnético decrescente, e (c) campo magnético crescente.

A velocidade axial no domínio é apresentada na figura 7.4. Para os casos (a) e (b) essa velocidade é maior ao longo da linha de centro, devido a maior temperatura

nessa região e principalmente aos efeitos da convecção gerada pelo campo gravitacional e magnético. Em virtude do empuxo gravitacional e magnético, próximo a parede ocorre uma recirculação que causa o estreitamento e acelera o escoamento reativo alongando o formato da chama. Já para o caso do campo crescente (c), as velocidades axiais tem intensidades bem inferiores pois as forças magnéticas contribuem negativamente com o processo de convecção, podendo até extinguir a chama.

Os valores dos parâmetros que caracterizam a chama de metano em três condições do campo magnético são apresentados na tabela 7.1. A aplicação do campo magnético decrescente acelera o escoamento na direção axial, induzindo o escoamento radial do ar em direção a zona de reação para que haja conservação da massa. Esse mecanismo reduz a largura da chama em 24,8%. A redução da largura da chama indica o quanto a convecção na direção radial impacta o escoamento, portanto pode-se concluir que o campo magnético decrescente estimula o processo de convecção. Contudo, a aplicação de um campo magnético crescente produz grandes alterações no formato da chama. Nesse caso, a chama difusiva apresenta formato arredondado, no qual a altura da chama é reduzida e sua largura aumentada. Esse formato se aproxima da chama difusiva subventilada encontrada experimentalmente por BURKE e SCHUMANN [25], em que a largura da chama aumenta para reagir com o pouco oxigênio que entra no domínio pela injeção de ar. Com a aplicação do campo crescente, o oxigênio no queimador é atraído em direção contrária a zona de reação, no sentido da saída do queimador. Com pouco oxigênio no domínio, pois não existe uma recirculação gerada pela convecção natural, a chama difusiva nessa situação aumenta sua largura para reagir com o ar que entra no queimador pela injeção.

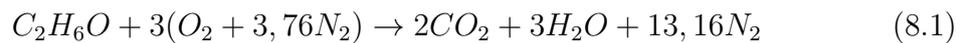
Tabela 7.1: Parâmetros de caracterização da chama de metano sob ação de campos magnéticos.

Parâmetro	(a) $B = 0$	(b) $B \frac{dB}{dx} = -40$	(c) $B \frac{dB}{dx} = +40$
Altura (cm)	$L_f = 14,0$	$L_f = 15,8$	$L_f = 8,7$
Máx. Largura (cm)	$W_{f,max} = 1,45$	$W_{f,max} = 1,09$	$W_{f,max} = 3,22$

Capítulo 8

Chama Difusiva de Etanol

Utilizando o código desenvolvido em FORTRAN, a mesma configuração do sistema e os mesmos campos magnéticos aplicados na queima de metano que foram descritos na seção 5.1, foi considerada a seguinte reação global de passo único para obtenção dos resultados da simulação da chama difusiva de etanol:



Na figura 8.1 é apresentado o campo de temperatura e a posição da chama, obtida através da equação 4.46.

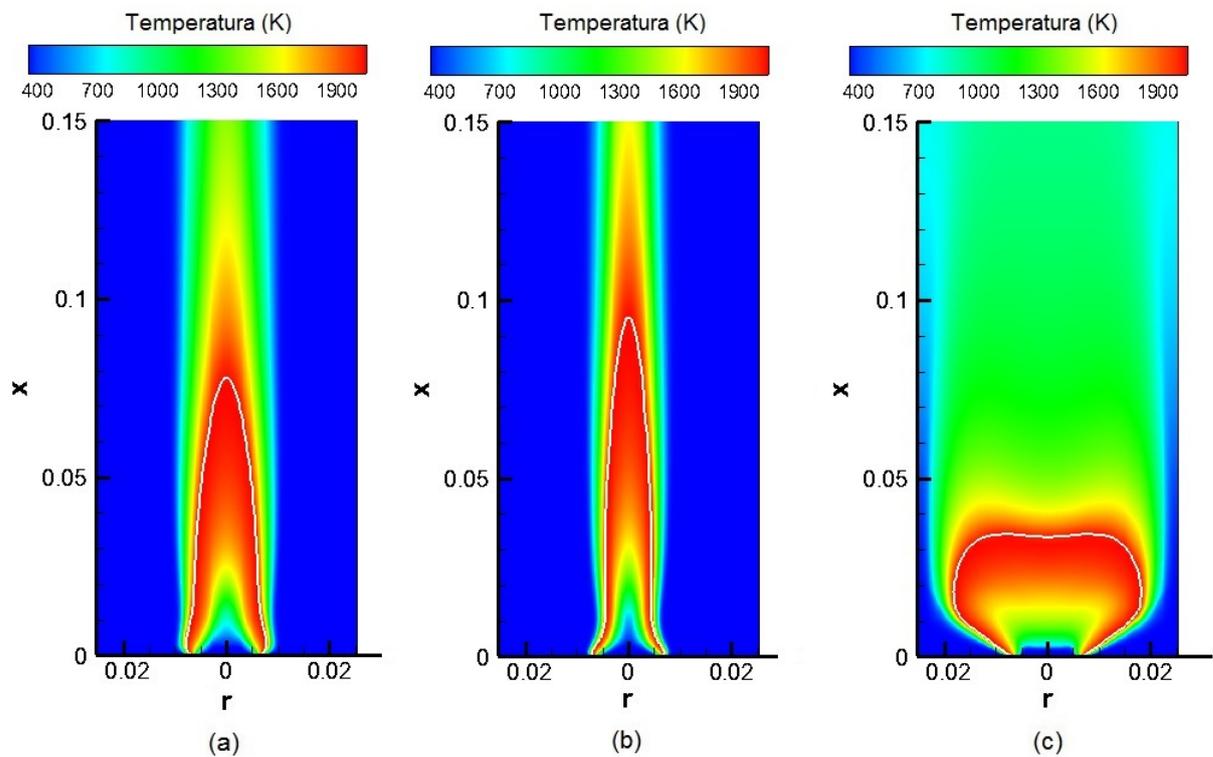


Figura 8.1: Perfis de temperatura e posição da chama de etanol. Em (a) $B = 0$, (b) campo magnético decrescente, e (c) campo magnético crescente.

Os campos são mostrados na figura até a metade axial do domínio, de 0 cm até 15 cm, para facilitar a visualização da chama. A análise da posição da chama indica que os campos magnéticos influenciam o formato da chama de etanol de forma semelhante as chamas de metano obtidas nessa dissertação e na literatura[2]. Ou seja, campos magnéticos decrescentes(a) diminuem a largura da chama, enquanto campos magnéticos crescentes(b) a tornam menor e espessa. Contudo, o etanol é um combustível oxigenado e essa característica influencia o valor do coeficiente estequiométrico mássico do etanol, modificando tanto a distribuição de temperatura quanto os perfis de composição molar. Por isso, apesar da forma semelhante, existem diferenças quantitativas significativas na posição da chama de etanol. A chama de etanol sem a aplicação do campo magnético apresenta altura igual a 7,8 cm, bem inferior a chama de metano. Segundo SAUER [3], essa divergência entre as estruturas das chamas de metano e etanol deve-se principalmente a diferença entre os coeficientes estequiométrico mássico (s) dos dois combustíveis. Esse coeficiente indica a massa de oxigênio que deve ser consumida em uma reação estequiométrica por unidade mássica de combustível queimado. Enquanto o coeficiente estequiométrico mássico para o etanol vale 2,087, para o metano vale 4,0, justificando as maiores alturas da chama de metano. Quando foi aplicado o campo magnético decrescente(a) a altura da chama teve um pequeno aumento atingindo os 9,5 cm, e na presença do campo crescente(c) a chama diminuiu consideravelmente para 3,4 cm. Visualmente, a chama de etanol pareceu ser mais afetada pelos campos magnéticos do que a chama de metano. O campo magnético decrescente diminuiu a largura da chama mais efetivamente e o campo magnético crescente achatou consideravelmente a chama de etanol.

A velocidade axial na combustão de etanol é apresentada na figura 8.2. Como observado também para chama de metano, a convecção induzida pelo campo magnético decrescente(b) causa o estreitamento da chama e acelera o escoamento, fazendo com que sejam obtidas maiores velocidades dos gases de exaustão. No caso do campo crescente (c), as velocidades axiais tem intensidades bem inferiores pois o empuxo magnético prejudica o processo de convecção, podendo até extinguir a chama. Comparativamente à combustão de metano, na chama de etanol as velocidades são pouco menores, e com a aplicação do campo magnético crescente(c) existem velocidades negativas devido a uma recirculação na zona de reação, contribuindo para o maior achatamento da chama.

Os valores dos parâmetros que caracterizam o formato da chama de etanol em três condições do campo magnético são apresentados na tabela 8.1. Em escoamentos relativos laminares, SUNDERLAND *et al.* [18] mostraram que o empuxo e a convecção radial contribuem para a diminuição da largura de chama. Dessa forma, o campo magnético decrescente estimula a convecção reduzindo a largura da chama de etanol

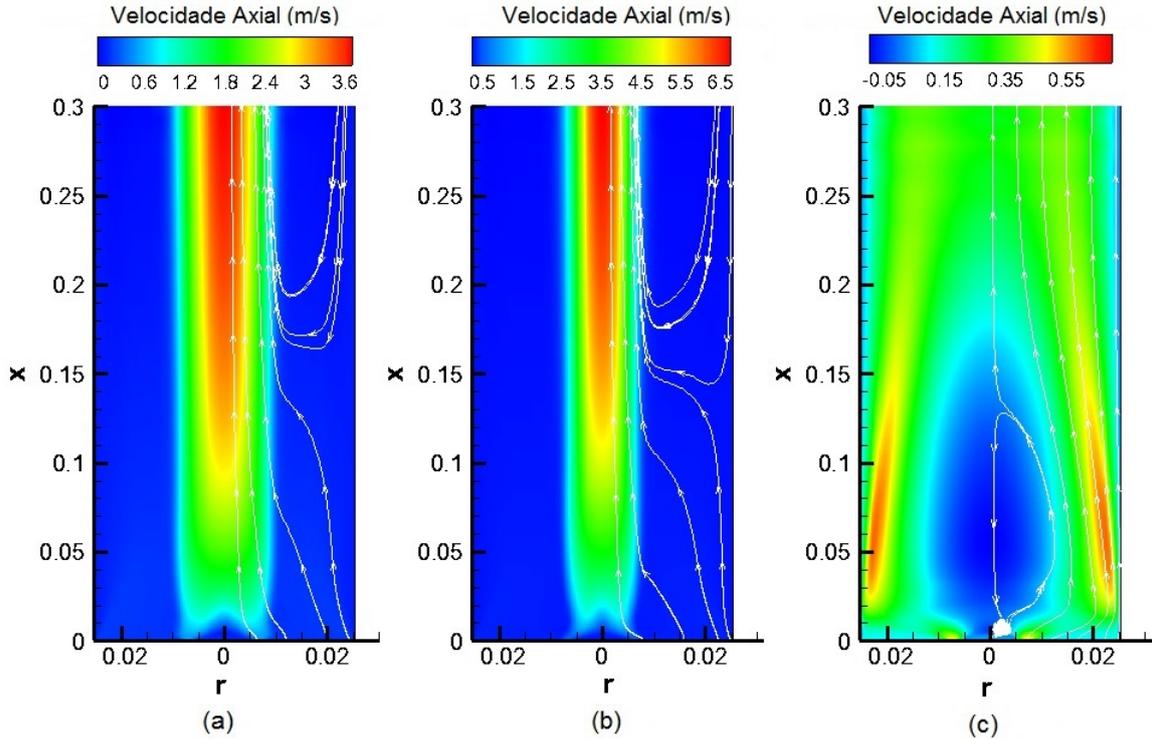


Figura 8.2: Perfis da velocidade axial e linhas de corrente da chama de etanol. Em (a) $B = 0$, (b) campo magnético decrescente, e (c) campo magnético crescente.

em 42,3%. Ou seja, a redução percentual da largura da chama de etanol é maior do que a de metano. Nesse caso do campo magnético decrescente, o empuxo magnético atua positivamente no escoamento relativo, acelerando o escoamento e induzindo o ar para a zona de reação. Esse efeito gerado pela força magnética também é gerado pela força gravitacional, fazendo com que os campos magnético e gravitacional contribuam positivamente para a convecção natural. Por outro lado, a utilização de um campo magnético crescente não gera empuxo necessário para acelerar o escoamento. E mesmo o campo gravitacional contribuindo para que exista empuxo, os efeitos da força magnética são mais intensos do que do campo gravitacional nessa dissertação.

Tabela 8.1: Parâmetros de caracterização da chama de etanol sob ação de campos magnéticos.

<i>Parâmetro</i>	(a) $B = 0$	(b) $B \frac{dB}{dx} = -40$	(c) $B \frac{dB}{dx} = +40$
Altura (cm)	$L_f = 7,79$	$L_f = 9,50$	$L_f = 3,36$
Máx. Largura (cm)	$W_{f,max} = 1,56$	$W_{f,max} = 0,90$	$W_{f,max} = 3,62$

Comparativamente, as chamas difusivas de metano e etanol obtidas através do código FORTRAN apresentam diferenças significativas, principalmente devido aos diferentes coeficientes estequiométrico mássico dos combustíveis. O maior coeficiente estequiométrico mássico do metano indica que é necessário uma maior quantidade de oxigênio para queimar 1 kg de combustível, implicando em uma maior altura

da chama difusiva de metano em relação à chama de etanol. Em relação a largura da chama, o campo magnético com gradiente decrescente influenciou mais a chama de etanol, na qual a redução percentual da largura foi maior do que a chama de metano. O campo magnético com gradiente crescente achatou mais a chama de etanol do que a chama de metano. A aplicação do campo com gradiente crescente reduziu percentualmente a altura da chama de etanol em 57%, enquanto a chama de metano teve sua altura reduzida em 38%, aproximadamente.

Capítulo 9

Otimização

O problema de otimização dessa dissertação consiste em aumentar a eficiência da combustão de metano através de um maior controle do escoamento reativo, mais precisamente, por meio de um aumento na taxa da mistura entre combustível e oxidante. O campo magnético com gradiente decrescente tem a capacidade de induzir o escoamento do oxigênio para a zona de reação e rejeitar mais eficientemente os produtos, o que resulta em consequências importantes na análise dessa dissertação:

1. Ocorre o aumento da convecção e difusão radial das espécies, aumentando a taxa de mistura.
2. A velocidade axial e a temperatura dos gases de exaustão aumentam, melhorando a transferência de calor com outros sistemas.
3. A chama difusiva diminui em largura (ou diâmetro).
4. A chama se afasta da parede fria do queimador.

A largura de chama foi escolhida como função objetivo deste problema, pois a sua minimização está diretamente relacionada com as outras três consequências benéficas ao escoamento reativo descritas na enumeração acima. Inicialmente, foram escolhidas alguns valores para as variáveis B_o e $\frac{dB}{dx}$. A partir de 42 pares $(B_o, \frac{dB}{dx})$ foram realizadas simulações independentes gerando um gráfico discreto 3D (Fig. 9.1), capaz de representar a tendência da minimização da largura da chama em relação essas duas variáveis. Nesta figura 9.1 pode ser observado que a minimização da largura da chama ocorre quando a variável B_o é maximizada, ou seja, ocorre em seu limite superior, no qual $B_o = 1,5T$. Contudo, a função objetivo é minimizada em um gradiente intermediário. Isso ocorre, pois a força magnética é função do produto do campo magnético pela sua derivada ($B\frac{dB}{dx}$), como apresentado na equação 4.9. Assim, elevados gradientes significam forças magnéticas maiores na entrada do queimador, mas atingindo o valor igual a zero com uma taxa maior. Ou seja, a força

magnética é nula em posições mais próximas dessa entrada, e atua apenas na base da chama. Enquanto, pequenos gradientes significam forças magnéticas menores na entrada do queimador, mas que podem se estender por toda extensão da chama. Como a largura da chama é calculada na metade da altura da chama, em $x = \frac{L_f}{2}$, campos magnéticos intermediários contribuem para minimizar essa função objetivo.

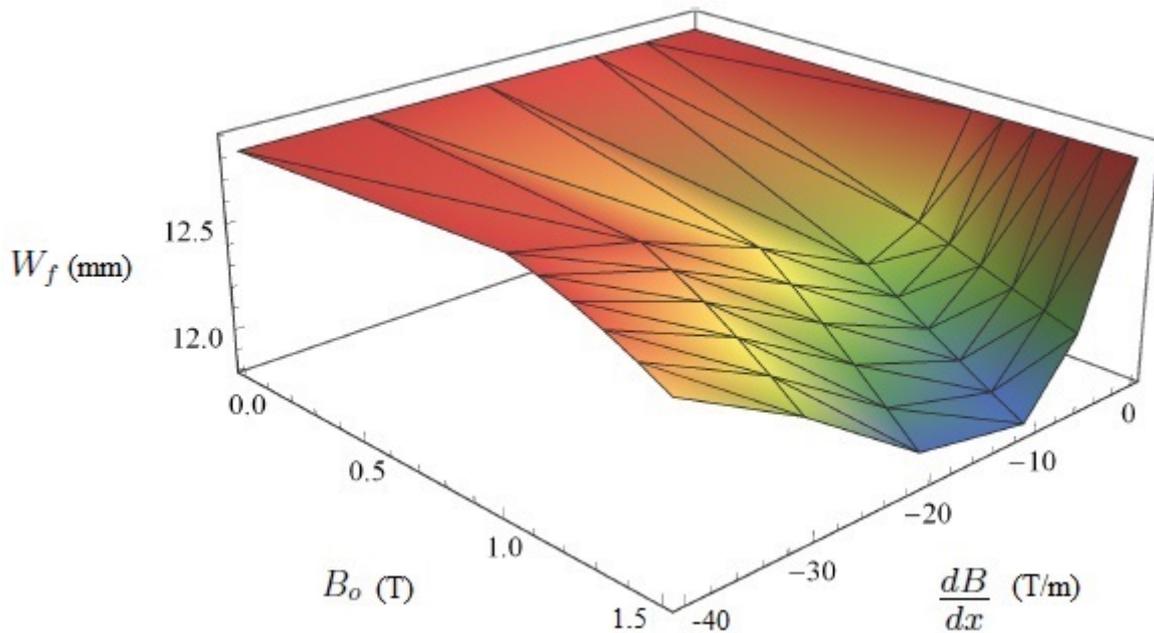


Figura 9.1: Gráfico 3D da otimização da largura da chama W_f em função das variáveis de projeto B_o e $\frac{dB}{dx}$.

Dessa forma, como a minimização da largura da chama ocorre no limite superior da variável B_o , é interessante analisar apenas a isolinha, na qual B_o é constante e igual a 1,5 T. Essa simplificação reduz consideravelmente o tempo computacional que seria gasto para solução, enquanto mantém o objetivo do problema, pois o mínimo global desse problema de otimização se situa nessa isolinha. Na figura 9.2 são apresentados alguns pontos dessa isolinha, onde o mínimo global está abaixo de 11,8 mm e ocorre em algum ponto do intervalo $10 > \left| \frac{dB}{dx} \right| > 20$.

Depois de todas essas análises, foi programado um método de otimização em FORTRAN e acoplado ao problema do escoamento reativo com campo magnético. O método heurístico utilizado nessa dissertação, e amplamente empregado no campo da engenharia, é o algoritmo que usa o conceito do Enxame de Partículas (*Particle Swarm*). Este método foi criado em 1995 pelo engenheiro elétrico Russel Eberhart e pelo psicólogo social James Kennedy [46]. A ideia dos criadores do Enxame de Partículas é baseada no comportamento social de várias espécies da natureza e tenta equilibrar a individualidade e a sociabilidade dos indivíduos a fim de localizar o ponto ótimo de interesse. No primeiro momento, Kennedy e Eberhart chegaram a ideia do método analisando pássaros procurando locais para o ninho. Quando a

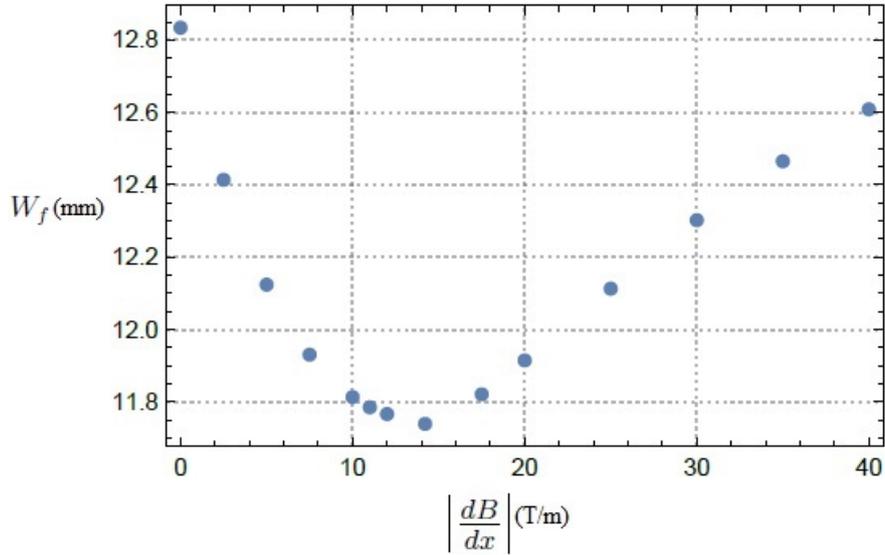


Figura 9.2: Gráfico 2D da otimização da largura da chama W_f em função do módulo da variável de projeto $\left| \frac{dB}{dx} \right|$, mantido $B_o = 1, 5T$.

individualidade aumenta, a procura por lugares alternativos para o ninho também aumenta. Contudo, se a individualidade se torna muito grande, o indivíduo nunca encontra o melhor lugar. Por outro lado, quando a sociabilidade aumenta, o indivíduo aprende mais com a experiência dos seus vizinhos. Mas, se a sociabilidade se tornar muito elevada, todos os indivíduos irão convergir para o primeiro mínimo encontrado, possivelmente um mínimo local[47][48].

Todas as simulações da chama difusiva dessa dissertação foram realizadas utilizando um computador pessoal com processador Intel Core i5, ou um *Cluster*, no qual foi utilizado apenas um dos nós com dois processadores do tipo Intel XEON. Um comparativo entre os tempos gastos em minutos na simulação da chama difusiva de metano, para os dois computadores utilizados, pode ser visualizado na tabela 9.1.

Tabela 9.1: Informações referentes ao tempo gasto em cada simulação em minutos.

Computador	Código FORTRAN	Programa FLUENT
Intel Core i5	120min.	5min.
<i>Cluster</i>	10min.	—

A simulação da chama difusiva no programa FLUENT não foi realizada no *cluster*. Essa simulação, mesmo utilizando o computador pessoal com processador core i5, apresentou baixo esforço computacional, convergindo para o regime permanente em apenas 5 minutos. Esse menor esforço computacional, deve-se principalmente a utilização de uma técnica mais avançada para solução do sistema de equações algébricas, chamada *multigrid*. Quando utilizado o código desenvolvido em FORTRAN, a simulação da chama difusiva de metano no *cluster* foi cerca de 12 vezes

mais rápida do que no computador com processador core i5. No problema de otimização, a simulação foi realizada no *cluster*, visto que a simulação do escoamento reativo é realizada diversas vezes para diferentes campos magnéticos. Apesar do maior tempo gasto na simulação do código FORTRAN em relação ao programa FLUENT, a utilização do código FORTRAN se justifica pela maior autonomia do usuário em implementar métodos de otimização acoplados ao problema da combustão.

Aplicado nessa dissertação, o algoritmo Enxame de Partículas consiste em cálculos repetidos da largura de chama para diferentes gradientes do campo magnético, que são modificados utilizando parâmetros probabilísticos dentro dos limites superior e inferior fornecidos. Em cada iteração, o valor da função objetivo é comparada ao valor da função obtido anteriormente. Sendo menor, esse valor da função na iteração atual substitui o anterior, do contrário o mínimo da iteração anterior é mantido. A repetição desse processo leva a convergência para o mínimo global, mas para a convergência do método, o número de vezes que a função objetivo é calculada depende da complexidade da função. Assim, mesmo não havendo prova matemática para os métodos heurísticos, se o critério de parada e os parâmetros probabilísticos forem bem escolhidos, o método Enxame de Partículas já demonstrou ser suficientemente robusto para retornar o mínimo global da maioria das funções. Como a função desse trabalho é unimodal, apresentando um único mínimo, um método determinístico como o Gradiente Conjugado poderia também ser utilizado. Porém, analisando a provável localização do mínimo na figura 9.2, o resultado do Enxame de Partículas apresentou-se dentro do esperado. O mínimo global foi calculado com um custo computacional satisfatório, e não é objetivo dessa dissertação comparar métodos de otimização. No método Enxame de Partículas, outro fator importante é o número da população de indivíduos, que pode diminuir ou aumentar o custo computacional. O critério de parada utilizado foi o número máximo de iterações, ou seja, o algoritmo chega ao fim por que atingiu a última iteração. Esse critério não é prático e pode parar antes da convergência, mas como as análises anteriores mostraram a tendência do valor da largura da chama mínimo, esse critério de parada se mostrou adequado. Para 4 números de população distintos a função objetivo foi calculada 60 vezes até o final do processo, mas a convergência ocorreu antes, em diferentes iterações. As figuras 9.3 e 9.4 apresentam a otimização da largura da chama em relação ao número de vezes que a função objetivo é calculada. As figuras são iguais, porém estão em escalas diferentes.

O critério de convergência estabelecido nesse problema é quando a largura de chama atinge valores abaixo de $11,74 \text{ mm}$. Nesse problema esse critério poderia ter um maior número de casas decimais, mas a obtenção da medida experimental da largura de chama em centésimos de milímetro é impraticável e desnecessário. Por-

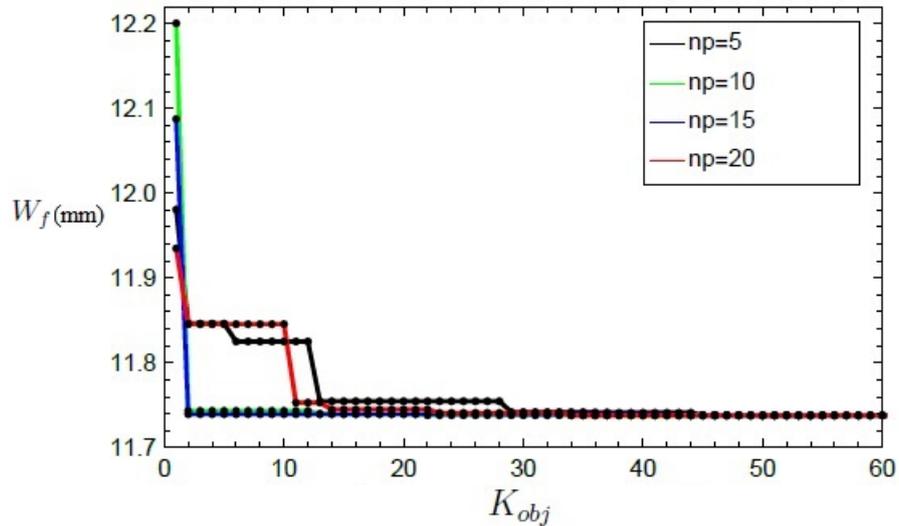


Figura 9.3: Gráfico da otimização da largura da chama W_f em função do K_{obj} .

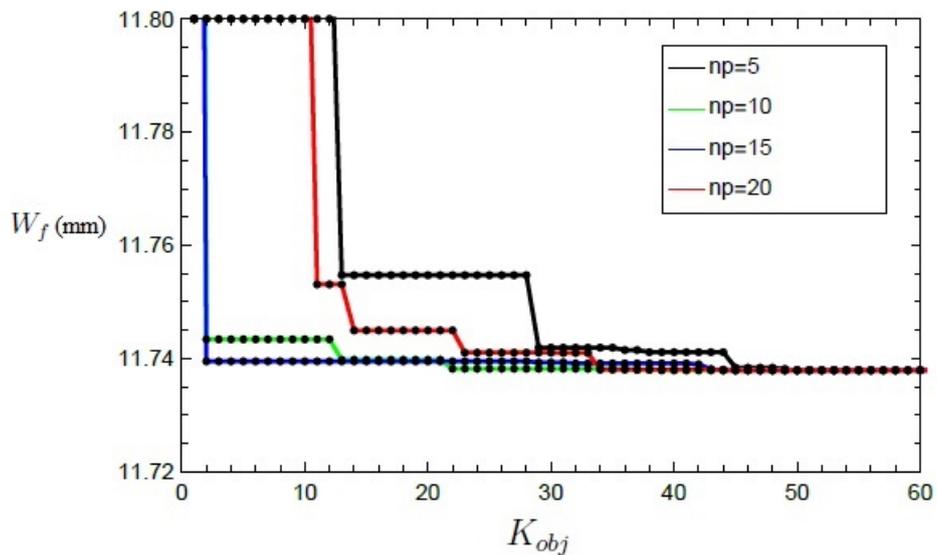


Figura 9.4: Gráfico da otimização da largura da chama W_f em função do K_{obj} , em escala diferente da figura anterior.

tanto, observando a figura 9.4 podemos inferir quantas vezes a função objetivo foi calculada até atingir a convergência para diferentes números da população. Utilizando o número da população igual a 5 a função objetivo foi calculada 45 vezes até a convergência, sendo esse o maior esforço computacional. A utilização da população igual a 10 e 15 retornaram os resultados com menor esforço computacional. Enquanto com o número da população igual a 10 a largura de chama foi calculada 13 vezes, para a população de 15 partículas com apenas 2 cálculos da função objetivo já houve convergência. Quando a população foi aumentada para 20 partículas o esforço computacional voltou a aumentar, convergindo apenas na iteração 33. Portanto, o número de partículas entre 10 e 15 aumenta a velocidade de convergência da otimização desse problema. É importante observar que cada cálculo da função

objetivo tem um custo computacional elevado, pois para cada cálculo da largura da chama, o código FORTRAN deve resolver o problema do escoamento reativo com campo magnético, a cada iteração do código de otimização. A tabela 9.2 apresenta os valores otimizados para as variáveis de projeto e para a função objetivo. Como apresentado anteriormente, a otimização do escoamento reativo através de um campo magnético ocorreu quando a variável de projeto B_o atingiu o valor de $1,5 T$. O valor ótimo do gradiente ($\frac{dB}{dx}$), que resultou na minimização da função objetivo, foi igual à $-14,8 T/m$. Esses valores ótimos dos parâmetros de projeto retornam a largura de chama minimizada, com valor igual à $11,737 mm$.

Tabela 9.2: Valores otimizados das variáveis de projeto B_o e $\frac{dB}{dx}$, e da função objetivo W_f

<i>Variáveis de Projeto</i>	<i>Valores Otimizados</i>
B_o	$1,5 T$
$\frac{dB}{dx}$	$-14,8 T/m$
<i>Função Objetivo</i>	<i>Valor Otimizado</i>
W_f	$11,74 mm$

Capítulo 10

Conclusões e Sugestões

Nessa dissertação foi realizado um estudo numérico da otimização de escoamentos reativos utilizando campos magnéticos. Com isso, foi realizada uma análise dos processos físicos e químicos que caracterizam uma chama difusiva laminar na presença de um campo magnético. Nesse trabalho, a chama difusiva é formada a partir da injeção de correntes de oxidante e de biocombustível, em dutos coaxiais, inicialmente separadas. Os biocombustíveis considerados na análise são metano e etanol, com o ar como oxidante. Como apresentado, os campos magnéticos influenciam o comportamento de chamas difusivas devido as propriedades paramagnéticas e diamagnéticas dos gases presentes no escoamento reativo. O escoamento é mais afetado pelo paramagnetismo, pois esse comportamento é três ordens de grandeza superior ao diamagnetismo. Na reação de combustão as maiores forças magnéticas atuam no oxigênio que é a principal substância paramagnética, fazendo com que essa espécie seja impelida na direção das maiores intensidades do campo magnético. Os resultados apresentados indicaram que a aplicação de um campo magnético pode influenciar características fundamentais em chamas difusivas, como o formato da chama, os campos de temperatura e velocidade, e os campos de frações mássicas. Assim, a aplicação de um campo magnético em uma chama difusiva tem o potencial de controlar e otimizar o processo de combustão.

As chamas difusivas são controladas pela mistura e pelo processo de difusão, portanto quanto melhor o transporte das espécies na interface combustível-oxidante, chamada de zona de reação, melhor é a característica da combustão. Esses sistemas são controlados pela difusão dos produtos da combustão na direção contrária da chama e do oxidante em direção a zona de reação. Os resultados dessa dissertação mostram que a aplicação de um campo magnético com gradiente decrescente pode carrear uma maior quantidade de oxidante em direção a zona de reação e, conseqüentemente, melhorar o processo de mistura entre combustível e oxidante. A aplicação do campo magnético decrescente também aumenta o empuxo no escoamento reativo, estimulando a convecção. Esses fenômenos que ocorrem na chama

difusiva indicam a capacidade de um campo magnético com gradiente decrescente em otimizar o escoamento reativo. A recirculação gerada pelos empuxos magnético e gravitacional aumenta a velocidade do escoamento e torna a chama alongada. Com o oxidante sendo carregado para a zona de reação ocorre a diminuição da largura da chama (W_f), que foi utilizada como função objetivo no problema de otimização. Por outro lado, os resultados da aplicação de um campo magnético crescente em uma chama difusiva indicam a capacidade dessa configuração em reduzir a convecção e, em caso extremo, extinguir a chama. Isso ocorre, pois a aplicação de um campo com gradiente crescente atrai o oxigênio no sentido contrário da zona de reação e não gera um empuxo capaz de manter a chama difusiva estável. A chama difusiva tende a apresentar um formato arredondado, diminuindo de comprimento e aumentando sua largura. Na comparação entre a combustão de metano e etanol, foi apresentado que os campos magnéticos influenciaram de maneira mais significativa o escoamento a chama difusiva de etanol. Em termos percentuais, o campo magnético decrescente diminuiu mais a largura da chama de etanol do que a chama de metano. A chama de etanol também sofreu mais influência quando foi aplicado o campo magnético crescente, fato verificado devido a um maior achatamento da chama e velocidades axiais negativas na zona de reação.

Os resultados sugerem que o escoamento reativo pode ser controlado por campos magnéticos. E a otimização da combustão pode ser realizada utilizando campos magnéticos decrescentes na direção axial, em que o oxigênio é atraído em direção a zona de reação, induzindo a convecção necessária para manutenção e estímulo da chama. Com o oxidante sendo atraído em direção ao eixo axial de simetria, a chama tende a diminuir de largura (W_f). Com isso, a combustão é otimizada ao passo que a largura da chama diminui (W_f), assim a minimização dessa variável maximiza a eficiência do sistema proposto.

10.1 Sugestões para Trabalhos Futuros

Nessa dissertação foi utilizada a largura da chama como função objetivo para o problema de otimização. Como apresentado, a minimização dessa variável é consequência do aumento no processo de convecção do ar em torno da chama e da atração do oxigênio no sentido da zona de reação. Contudo, existiam outras funções que poderiam ser escolhidas como função objetivo e também indicariam de forma efetiva a otimização da combustão. A maximização da taxa de transferência de calor da chama para outro sistema ou da taxa de mistura entre combustível e oxidante também poderiam ser escolhidas como funções objetivo. A escolha da minimização da largura da chama como função objetivo ocorreu devido a simplicidade em sua obtenção, e principalmente, porque esse fato era consequência de

fenômenos que influenciam positivamente o processo de combustão. Em relação as simulações no código FORTRAN e no programa comercial FLUENT, a utilização de um modelo mais complexo para a química da combustão pode retornar melhores resultados numéricos, mas representando um maior custo computacional. Para a simulação de uma chama difusiva laminar, ou seja, para um escoamento reativo de baixo número de Reynolds é interessante a utilização de um modelo de química finita, considerando mais reações e espécies químicas na reação de combustão. Para compreensão completa da aplicação de campos magnéticos em chamas difusivas é necessário a construção de um experimento. Essa análise experimental fornecerá subsídios para avaliação do modelo numérico e otimização experimental da combustão utilizando campos magnéticos com gradientes decrescentes. Nesse trabalho, o estudo numérico da chama difusiva sob aplicação de campos magnéticos foi capaz de avaliar os principais fenômenos físicos e químicos, contudo mais estudos experimentais são imprescindíveis para o domínio e aplicabilidade desta tecnologia em queimadores industriais.

Referências Bibliográficas

- [1] IEA. “International Energy Agency - Share of total primary energy supply in 2012”. Disponível em: <http://www.iea.org/statistics/>.
- [2] WAKAYAMA, N. I. “Effect of a gradient magnetic field on the combustion reaction of methane in air”, *Chemical Physics Letters*, v. 188, n. 3, pp. 279–281, 1992.
- [3] SAUER, V. M. “Analysis of biofuels reacting flows in ducts”, *M.Sc Thesis (in Portuguese)*, PEM/COPPE/UFRJ, 2012.
- [4] TURNS, S. *Introduction to Combustion: Concepts and Applications*. 2. ed., Singapura, Mcgraw Hill, 2000.
- [5] MITCHELL, R. E., SAROFIM, A. F., CLOMBURG, L. A. “Experimental and numerical investigation of confined laminar diffusion flames”, *Combustion and Flame*, v. 37, n. 0, pp. 227–244, 1980.
- [6] SWAMINATHAN, S. “Effects of Magnetic Field on Micro Flames”. 2005.
- [7] LA ROVERE, E. L., PEREIRA, A. S., SIMÕES, A. F. “Biofuels and Sustainable Energy Development in Brazil”, *World Development*, v. 39, n. 6, pp. 1026–1036, 2011.
- [8] FARADAY, M. “On the Diamagnetic Conditions of Flame and Gases”, *London, Edinburgh and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*, v. 31, pp. 401–421, 1847.
- [9] COLAÇO, M. J., DULIKRAVICH, G. S., ORLANDE, H. R. B. “Magnetohydrodynamic simulations using radial basis functions”, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v. 52, pp. 5932–5939, 2009.
- [10] CHAU, S. W., HSU, K. L. “Modeling steady axis-symmetric thermal plasma flow of air by a parallelized magneto-hydrodynamic flow solver”, *Computers and Fluids*, v. 45, pp. 109–115, 2011.

- [11] VON ENGEL, A., COZENS, J. R. “Flame Plasmas”. In: Marton, L. (Ed.), *Advances in Electronics and Electron Physics*, v. 20, pp. 99–146, Academic Press, 1965.
- [12] BAKER, J., CALVERT, M. E. “A study of the characteristics of slotted laminar jet diffusion flames in the presence of non-uniform magnetic fields”, *Combustion and Flame*, v. 133, n. 3, pp. 345–357, 2003.
- [13] UENO, S. “Quenching of Flames by Magnetic Fields”, *Journal of Applied Physics*, v. 65, n. 2, pp. 1243–1245, 1989.
- [14] WAKAYAMA, N. I. “Magnetic promotion of combustion in diffusion flames”, *Combustion and Flame*, v. 93, n. 3, pp. 207–214, 1993.
- [15] WAKAYAMA, N. I. “Effect of a decreasing magnetic field on the flow of nitrogen gas”, *Chemical Physics Letters*, v. 185, n. 5, pp. 449–451, 1991.
- [16] WAKAYAMA, N. I., ITO, H., KURODA, Y., et al. “Magnetic support of combustion in diffusion flames under microgravity”, *Combustion and Flame*, v. 107, pp. 187–192, 1996.
- [17] FUJITA, O., ITO, K., CHIDA, T., et al. “Determination of magnetic field effects on a jet diffusion flame in a microgravity environment”, *Symposium (International) on Combustion*, v. 27, n. 2, pp. 2573–2578, 1998.
- [18] SUNDERLAND, P. B., MENDELSON, B. J., YUAN, Z. G., et al. “Shapes of buoyant and nonbuoyant laminar jet diffusion flames”, *Combustion and Flame*, v. 116, n. 3, pp. 376–386, 1999.
- [19] MIZUTANI, Y., FUCHIHATA, M., OHKURA, Y. “Pre-mixed laminar flames in a uniform magnetic field”, *Combustion and Flame*, v. 125, pp. 1071–1073, 2001.
- [20] YAMADA, E., SHINODA, M., YAMASHITA, H., et al. “Experimental and numerical analyses of magnetic effect on OH radical distribution in a hydrogen-oxygen diffusion flame”, *Combustion and Flame*, v. 135, n. 4, pp. 365–379, 2003.
- [21] KINOSHITA, S., TAKAGI, T., HIDEKI, K., et al. “Numerical Simulation of Diffusion Flames With and Without Magnetic Field”, *IEEE Transactions on Applied Superconductivity*, v. 14, n. 2, pp. 1685–1688, 2004.
- [22] SHINODA, M., YAMADA, E., KAJIMOTO, T., et al. “Mechanism of magnetic field effect on OH density distribution in a methane air premixed jet

- flame”, *Proceedings of the Combustion Institute*, v. 30, n. 1, pp. 277–284, 2005.
- [23] LEGROS, G., GOMEZ, T., FESSARD, M., et al. “Magnetically induced flame flickering”, *Proceedings of the Combustion Institute*, v. 33, n. 1, pp. 1095–1103, 2011.
- [24] JOCHER, A., PITSCH, H., GOMEZ, T., et al. “Modification of sooting tendency by magnetic effects”, *Proceedings of the Combustion Institute*, v. 35, n. 1, pp. 889–895, 2015.
- [25] BURKE, S. P., SCHUMANN, T. E. W. “Diffusion Flames”, *Industrial and Engineering Chemistry*, v. 20, n. 10, pp. 998–1004, 1928.
- [26] GLASSMAN, I., YETTER, R. A. *Combustion*. San Diego, Elsevier, 2008.
- [27] KUO, K. K. *Principles of Combustion*. 2. ed., Nova Jersey, John & Wiley, 2005.
- [28] XU, Y., SMOOKE, M. D. “Application of a Primitive Variable Newton’s Method for the Calculation of an Axisymmetric Laminar Diffusion Flame”, *Journal of Computational Physics*, v. 104, n. 1, pp. 99–109, 1993.
- [29] XU, Y., SMOOKE, M. D., LIN, P., et al. “Primitive Variable Modeling of Multidimensional Laminar Flames”, *Combustion Science and Technology*, v. 90, n. 5-6, pp. 289–313, 1993.
- [30] TARHAN, T., SELÇUK, N. “Numerical Simulation of a Confined Methane/Air Laminar Diffusion Flame by the Method of Lines”, *Turkish Journal of Engineering and Environmental Science*, v. 27, pp. 275–290, 2003.
- [31] TARHAN, T., SELÇUK, N. “A Novel CFD Code Based on Method of Lines for Reacting Flows: Verification on Methane/Air Laminar Diffusion Flame”, *Combustion Science and Technology*, v. 179, pp. 39–60, 2007.
- [32] MANDAL, B. K., CHOWDHURI, A. K., BHOWAL, A. J. “Numerical simulation of a confined laminar diffusion flame with variable property formulation”, *Proceedings of the International Conference on Mechanical Engineering 2009*, 2009.
- [33] ZHANG, D., FANG, J., GUAN, J.-F., et al. “Laminar jet methane/air diffusion flame shapes and radiation of low air velocity coflow in microgravity”, *Fuel*, v. 130, n. 0, pp. 25–33, 2014.

- [34] CAO, S., MA, B., BENNETT, B. A. V., et al. “A computational and experimental study of coflow laminar methane/air diffusion flames: Effects of fuel dilution, inlet velocity, and gravity”, *Proceedings of the Combustion Institute*, v. 35, n. 1, pp. 897–903, 2015.
- [35] GUESSAB, A., ARIS, A., BENABDELLAH, T., et al. “Simulation of a confined laminar diffusion methane jet flame: comparison of two chemical kinetics mechanisms”, *Jounees Internationales de Thermique (JIHT)*, 2013.
- [36] ROPER, F. G. “The Prediction of Laminar Jet Diffusion Flame Sizes: Part I”, *Combustion and Flame*, v. 227, n. 29, 1977.
- [37] INCROPERA, F. P., DEWITT, D. P., BERGMAN, T. L. *Fundamentos de Transferência de Calor e de Massa*. Rio de Janeiro, LTC, 2008.
- [38] BIRD, R., STEWART, W. E., LIGHTFOOT, E. N. *Transport Phenomena*. Nova York, John Wiley & Sons, 2002.
- [39] WILLIAMS, F. A. *Combustion Theory: Second Edition*. Westview Press, 1994.
- [40] PAULING, L., WOOD, R. E., STURDIVANT, J. H. *J. Am. Chem. Soc.*, v. 68, pp. 795–798, 1946.
- [41] KEE, R. J., COLTRIN, M. E., GLARBORG, P. *Chemically Reacting Flow: Theory and Practice*. Nova Jersey, John & Wiley, 2003.
- [42] KANURY, A. M. *Combustion Phenomena*. Nova Iorque, Gordon and Breach, 1982.
- [43] NORTON, T. S., SMYTH, K. T., MILLER, J. H. “Comparison of Experimental and Computed Species Concentration and Temperature Profiles in Laminar, Two-Dimensional Methane/Air Flames”, *Combustion Science and Technology*, v. 90, pp. 1–34, 1993.
- [44] LITTLE, A. T. *Analysis of Alternative Fuel Combustion in a Perfectly Stirred Reactor*. Ohio, The Ohio State University, 2007.
- [45] FLUENT. “Ansys Fluent 12.0 - Theory Guide”. 2010.
- [46] KENNEDY, J., EBERHART, R. C. “Particle Swarm Optimization”, *Proceedings of the 1995 IEEE International Conference on Neural Networks*, v. 4, pp. 1942–1948, 1995.

- [47] COLAÇO, M. J., DULIKRAVICH, G. S. “A Survey of Basic Deterministic, Heuristic and Hybrid Methods for Single Objective Optimization and Response Surface Generation”. In: *Thermal Measurements and Inverse Techniques*, cap. 10, pp. 356–401, CRC Press, 2011.
- [48] COLAÇO, M. J., ORLANDE, H. R. B., DULIKRAVICH, G. S. “Inverse and Optimization Problems in Heat Transfer”, *Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering*, v. XVIII, 2006.